

目 錄

| | | |
|------|-----------------------|-----|
| 中文摘要 | | i |
| 英文摘要 | | ii |
| 誌謝 | | iii |
| 目錄 | | iv |
| 圖目錄 | | v |
| 一、 | 序論..... | 1 |
| 二、 | 理論..... | 3 |
| 2.1 | 假位能..... | 3 |
| 2.2 | 結構以及動力學性質..... | 5 |
| | A. 徑向分佈函數..... | 5 |
| | B. 靜態結構因子..... | 5 |
| | C. 歸一化速度相干函數..... | 6 |
| | D. 動態結構因子..... | 6 |
| 2.3 | 瞬間正則模..... | 9 |
| 三、 | 分子動力模擬及計算..... | 11 |
| 四、 | 結果分析..... | 13 |
| | (一)徑向分佈函數與靜態結構因子..... | 13 |
| | (二)歸一化速度相干函數..... | 13 |
| | (三)動態結構因子與色散關係..... | 14 |
| | (四)瞬間正則模分析..... | 15 |
| 五、 | 結論..... | 18 |
| 參考文獻 | | 19 |