

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра компьютерного моделирования

БИЛЬДАНОВ
Эльдар Эмирович

РАВНОВЕСНЫЕ И ДИФФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА АНСАМБЛЯ НА-
НОЧАСТИЦ С КОНКУРИРУЮЩИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Дипломная работа

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор
В. С. Вихренко

Допущена к защите

« ___ » _____ 201__ г.

Зав. кафедрой компьютерного моделирования
кандидат физико-математических наук, доцент О. Г. Романов

Минск, 2017

РЕФЕРАТ

Дипломная работа 56 страниц, 39 рисунков, 1 таблица, 69 источников.

РЕШЕТОЧНЫЕ СИСТЕМЫ, МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО, КОНКУРИРУЮЩЕЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ, БДПО-ПОТЕНЦИАЛ, РАВНОВЕСНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ, ДИФФУЗИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ, АНСАМБЛЬ НАНОЧАСТИЦ С КОНКУРИРУЮЩИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ.

Объект исследования: решеточная модель на треугольной решетке с конкурирующим взаимодействием.

Предмет исследования: равновесные и диффузионные характеристики.

Цель дипломной работы: исследовать равновесные и диффузионные свойства ансамбля наночастиц с конкурирующим взаимодействием.

Задачи дипломной работы: изучить теоретические основы построения решеточных моделей; разработать алгоритм моделирования и построить программный аппарат для изучения равновесных и диффузионных характеристик решеточных систем с БДПО взаимодействием; провести анализ полученных данных.

Методы исследования: методы Монте-Карло, алгоритм Метрополиса в каноническом и большом каноническом ансамбле.

Полученные результаты и их новизна: разработан программный аппарат для моделирования решеточных систем с конкурирующим взаимодействием. Получены равновесные (химический потенциал, термодинамический фактор, корреляционные функции) и диффузионные (коэффициенты диффузии коллективной и самодиффузии, коэффициент Хавена) характеристики БДПО систем при различных термодинамических параметрах. Алгоритмы реализованы в среде Delphi.

Область применения, практическая значимость: полученные модели используются в основном в области физики коллоидных систем. Результаты исследований могут использоваться для выявления кластерных фаз и точек фазового перехода в БДПО системах, задания термодинамических режимов работы для получения той или иной фазы.