**Ефремов, Дмитрий Кириллович.**

## Зонный подход метода Монте-Карло в рамках большого канонического ансамбля для моделирования адсорбционных и адсорбционно-каталитических систем : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.15. - Новосибирск, 1999. - 146 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Ефремов, Дмитрий Кириллович

СОДЕРЖАНИЕ.

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ.

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.

1.1 ВВЕДЕНИЕ К ЛИТЕРАТУРНОМУ ОБЗОРУ.

1.2 ОБЩИЙ ОБЗОР КОМПЬЮТЕРНЫХ МЕТОДОВ.

1.3 ТРАДИЦИОННЫЙ МЕТОД МК БКА.

1.3.1 Общие понятия

1.3.2Анализ причин неэффективности традиционного алгоритма

МК БКА в применении к адсорбции на открытой поверхности

ГЛАВА 2 ЗОННЫЙ ПОДХОД В МЕТОДЕ МК БКА ДЛЯ

ГЕТЕРОГЕННЫХ АДСОРБЦИОННЫХ СИСТЕМ.

2.1 СЛУЧАЙ ОДНОЦЕНТРОВЫХ МОЛЕКУЛ С ТРЕМЯ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ.

2.2 ЦЕПЬ МАРКОВА ДЛЯ ЛИНЕЙНЫХ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ В ГОМОГЕННОЙ СРЕДЕ. ОБОБЩЕНИЕ ДЛЯ ЗОННОГО ВАРИАНТА МК БКА.

2.3 ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ. ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИЕ КОРРЕКЦИИ ДЛЯ ДИСПЕРСИОННОГО И КВАДРУПОЛЬ-КВАДРУПОЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ.