**Рыжков Александр Владимирович Математическое моделирование структуры и магнитодеформационного отклика феррогелей методом крупнозернистой молекулярной динамики**

ОГЛАВЛЕНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

кандидат наук Рыжков Александр Владимирович

Введение

Глава 1. Современное состояние исследований

1.1 Феррогели как интеллектуальные магнитополимерные системы

1.1.1 Магнитные наночастицы

1.1.2 Гидрогели

1.1.3 Синтез феррогелей

1.1.4 Экспериментальное изучение феррогелей

1.2 Математические модели магнитополимерных систем

1.2.1 Модели магнитных наночастиц

1.2.2 Модели полимерных матриц

1.2.3 Метод молекулярной динамики

1.3 Выводы по главе

Глава 2. Математическая модель микрообъекта из феррогеля

2.1 Содержательная и концептуальная постановки задачи

2.2 Математические соотношения модели отклика микроферрогеля

2.2.1 Потенциалы взаимодействия

2.2.2 Виртуальные блобы

2.2.3 Уравнения движения

2.3 Реализация модели методом крупнозернистой молекулярной динамики

2.4 Выводы по главе

Глава 3. Структурные и механические изменения в микроферрогеле

во внешнем магнитном поле

3.1 Эволюция агрегатов из магнитных анизотропных наночастиц в

микроферрогеле

3.1.1 Исследование структуры с помощью радиальной функции распределения

3.1.2 Анализ степени агрегирования

3.2 Влияние магнитной анизотропии частиц на изменение объема и намагничивание микрогеля в поле

3.2.1 Анализ изменения объема

3.2.2 Намагничивание микроферрогеля

3.3 Выводы по главе

Глава 4. Влияние магнитных свойств наночастиц и их концентрации

на структурную организацию агрегатов в микроферрогеле

4.1 Анализ цепочечных агрегатов и объема микроферрогеля в отсутствие поля

4.2 Механизм изменения объема образца при намагничивании в

случае умеренной концентрации частиц

4.3 Выводы по главе

Глава 5. Структурные особенности и деформирование

феррополимеросомы, индуцированное внешним полем

5.1 Математическая модель феррополимеросомы

5.2 Деформирование полимеросомы в однородном поле

5.3 Анализ распределения концентрации наночастиц в мембране феррополимеросомы во внешнем поле

5.4 Выводы по главе

Заключение

Список литературы

Приложение А. Фрагменты листинга программы «Пре- и

постпроцессор для расчета крупнозернистой молекулярной динамики микроферрогеля»