**Гальперин, Дмитрий Евгеньевич.**

## Морфология разветвленных иономерных систем : Компьютерное моделирование : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.06. - Москва, 2006. - 96 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Гальперин, Дмитрий Евгеньевич

Введение.

1,Обзор литературы.

1.1 Дендримеры в растворе.

1.1.1 Основные модели дендримеров.

1.1.2 Детальное атомистическое моделирование дендримеров.

1.1.3 Влияние электростатических взаимодействий на конформации дендримеров.

1.2 Протоннообменные мембраны для топливных элементов. Мембрана Nafion®.

1.2.1 Феноменологические модели структуры мембраны Nafion®.

Обзор экспериментальных данных.

1.2.2 Моделирование микрофазно-разделенных структур протоннообменных мембран.

1.2.2.1 Атомистическое моделирование.

1.2.2.2 Свойства отдельных молекул.

1.2.2.3 Морфология гидрофильной фазы.

1.2.2.4 Влияние мономерной последовательности на структуру мембраны.

1.2.2.5 Мезоскопическое моделирование морфологии мембраны Nafion®. 27 2. Структура заряженной молекулы дендримера полипропиленимина и распределение зарядов в ней.

2.1 Описание модели.

2.2 Алгоритмы моделирования.

2.3 Моделирование нейтральной молекулы дендримера.

2.4 Изучение заряженной молекулы дендримера полипропиленимина в рамках модели «мигрирующих» зарядов.

2.5 Изучение заряженной молекулы дендримера полипропиленимина в рамках модели «мигающих» зарядов. Кривые титрования.

2.6 Сравнение моделей. Влияние рН раствора на размер молекулы дендримера. Сравнение моделей.

3. Морфология протонно-обменной мембраны Nafion®.

3.1 Алгоритм моделирования.

3.2. Огрубленная модель молекулы Nafion®.

3.3 Микрофазно-разделенные структуры гидратированной мембраны Nafion®.

3.4 Внутренняя структура водных кластеров.

3.5 Воссоздание атомистической структуры мембраны по полям средних концентраций компонентов системы. 75 Заключение. 86 Благодарности. 88 Список литературы.