**Заблоцкий, Сергей Владимирович.**

## Диаграммы состояний мультиблоксополимеров из гибких и полужестких блоков : компьютерное моделирование : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.06 / Заблоцкий Сергей Владимирович; [Место защиты: Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова]. - Москва, 2017. - 124 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Заблоцкий, Сергей Владимирович

Содержание

1 Введение

2 Обзор литературы

2.1 Теория и компьютерное моделирование одиночной макромолекулы

2.1.1 Теория фазовых переходов в одиночной полимерной цепи

2.1.2 Компьютерный эксперимент: выявление различных внутримолекулярных структур и переходов между ними

2.2 Сополимеры

2.3 Методы определения точек псевдо-фазовых переходов в системах конечного размера

2.3.1 Канонический анализ

2.3.2 Микроканонический анализ

2.4 Алгоритмы "плоских гистограмм" Монте-Карло

2.4.1 Алгоритм мультиканонического моделирования

2.4.2 Алгоритм Ванга-Ландау

2.4.3 Недостатки алгоритма Ванга-Ландау

2.4.4 Алгоритм стохастического приближения Монте-Карло (СПМК)

2.5 Выводы к разделу 2

3 Модель системы и разработка алгоритма

3.1 Многомерный алгоритм стохастического приближения Монте-Карло (МСПМК)

3.1.1 Теория

3.1.2 Перспективы приложения МСПМК для построения крупнозернистых моделей полимерных систем

3.2 Модель одиночной цепи гибко-жестко цепного сополимера

3.3 Основные физические величины, характеризующие конформацию полимерной цепи

3.4 Выводы к разделу 3

4 Диаграмма состояний одиночной макромолекулы гибко - жест-коцепного сополимера

4.1 Получение полных диаграмм состояний с помощью двумерного

алгоритма СПМК

4.2 Диаграмма состояний для длины блока b = 4

4.3 Диаграммы состояний для длин блоков b = 8,16,32

4.4 Микроканонический анализ для случая длины блока b =16

4.5 Выводы к разделу 4

5 Сравнение определений энтропии Больцмана и Гиббса для анализа псевдо-фазовых переходов в одиночной макромолекуле

5.1 Выбор термодинамических потенциалов

5.2 Энтропия Больцмана и Гиббса как функция конформационной энергии

5.3 Энтропия Больцмана и Гиббса как функция полной энергии

5.4 Анализ и сравнение данных для учета различных законов сохранения

5.5 Выводы к разделу 5

6 Заключение и выводы

7 Литература

8 Приложение

8.1 Функция плотности состояний в фазовом пространстве

8.2 Закон сохранения углового момента

9 Благодарности