**Назаренко, Екатерина Сергеевна.**

## Формирование бинарных и трехкомпонентых кластеров и нуклеация наночастиц атмосферного происхождения : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.04 / Назаренко Екатерина Сергеевна; [Место защиты: ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»]. - Москва, 2021. - 171 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Назаренко Екатерина Сергеевна

Введение

Глава 1. Проблемы математического моделирования молекулярных и нано-объектов в многокомпонентных газах

1.1 Математическое моделирование наноразмерных систем с использованием молекулярных и континуальных методов

1.2 Современная практика применения математических методов высокого порядка

1.3 Способы проверки адекватности математических моделей

молекулярных кластеров и наночастиц

Выводы к главе

Глава 2. Алгоритмы обработки и анализа данных математического моделирования молекулярных структур

2.1 Проблемы организации вычислительных экспериментов

2.2 Алгоритмы подготовки вычислительных заданий

2.3 Планирование вычислительной работы

2.4 Перезапуск вычислительных экспериментов

2.5 Модификация начальных условий

2.6 Обработка результатов вычислений

Выводы к главе

Глава 3. Комплексное исследование молекулярных гидратов серной кислоты

3.1 Анализ модельных результатов и их сравнение с данными натурных экспериментов, тестирование математических моделей

3.2 Коллективные и энтропийные эффекты

3.3 Масштабные эффекты

Выводы к Главе

Глава 4. Моделирование влияния алифатических аминов на многокомпонентную нуклеацию

4.1 Равновесные геометрии и свойства кластеров

4.2 Новые термодинамические данные и их анализ

4.3 Влияние MA на формирование нуклеирующих кластеров при

атмосферных условиях

Выводы к главе

Глава 5. Моделирование скоростей трехкомпонентной нуклеации диметиламина

5.1 Аномально высокие расхождения погрешности в термодинамических данных и их причины

5.2 Модель трехкомпонентной нуклеации ДМА и сравнение результатов

моделирования с экспериментальными данными

Выводы к главе

Заключение

Список литературы

Приложение А. Молекулярные структуры

Приложение Б. Диаграммы зависимости плотности кластера и

макроскопической жидкости от содержания серной кислоты

Приложение В. Листинги программ

Мутатор пространственных координат для атомно-молекулярного

конструирования

Программный модуль для классификации, первичной обработки и подготовки к публикации результатов математического моделирования

молекулярных и наноструктур

Реставратор некорректно завершенных квантовохимических расчетов

атомно-молекулярного конструирования (Рехутор)

Приложение Г. Результаты численных экспериментов