

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ТЕРМОДИНАМИКА
МОЛЕКУЛЯРНЫХ АДсорбционных СЛОЕв:
ФАЗОВые РАВНОВЕСИЯ, ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ И САМООРГАНИЗАЦИЯ

Е. А. Устинов

ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН

В докладе будет представлена методология определения химического потенциала жидких и кристаллических фаз на основе молекулярных расчетов двухфазных систем методом кинетического Монте-Карло в основной ячейке с наложенным внешним полем. Особое внимание будет уделено контактными молекулярными слоям на поверхности твердых тел. Будут рассмотрены фазовые переходы 1-го рода, низкотемпературные ориентационные переходы в системе азот – графит и результаты численного моделирования самоорганизующихся молекулярных слоев органических веществ с определением их термодинамических потенциалов.