

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ "МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ имени М. В. ЛОМОНОСОВА"  
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ КАФЕДРА ФИЗИКИ  
ПОЛИМЕРОВ И КРИСТАЛЛОВ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

«Морфологии в расплавах  
гибко-жесткоцепных сополимеров в  
тонких пленках: компьютерное  
моделирование»

Выполнила студентка 417 группы  
Яцевич В. Б. \_\_\_\_\_

Научный руководитель  
Иванов В. А. \_\_\_\_\_

Научный руководитель  
Мартемьянова Ю. А. \_\_\_\_\_

Допущена к защите 10.06.2020г.  
Заведующий кафедрой Хохлов А. Р.  
\_\_\_\_\_

Москва  
2020 г.

# Содержание

<b>ВВЕДЕНИЕ</b>	<b>3</b>
<b>1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ</b>	<b>4</b>
1.1 Морфологии в расплавах диблок-сополимеров . . . . .	4
1.2 Метод молекулярной динамики . . . . .	7
<b>2 МОДЕЛИ И МЕТОДЫ</b>	<b>9</b>
2.1 Модель системы . . . . .	9
2.2 Средства реализации . . . . .	10
<b>3 РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ</b>	<b>11</b>
3.1 Моделирование расплава в объеме . . . . .	11
3.2 Моделирование расплава вблизи стенки . . . . .	15
3.3 Влияние размера базовой ячейки на результаты . . . . .	21
3.4 Диаграмма состояний для систем разного размера . . . . .	26
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</b>	<b>28</b>
<b>СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ</b>	<b>29</b>