

*„Zastosowanie modelu hantli w badaniach właściwości fizykochemicznych i strukturalnych układów homo- i heterogenicznych metodą Monte Carlo”*

Termodynamiczne i strukturalne właściwości liniowych cząsteczek i jonów modelowanych za pomocą hantli w układach homo- i heterogenicznych zostały zbadane za pomocą symulacji Monte Carlo. Hantle składają się z dwóch przylegających do siebie sztywnych kul. Omówione zostały radialne funkcje rozkładu oraz zależności współczynnika aktywności, średniej energii potencjalnej, pojemność cieplna przy stałej objętości od stężenia.. Wyniki porównano z modelami: PM i RPM+SPM. Dla układu heterogenicznego rozważane są dwa przypadki są:

1. nienaładowany model składający się z płaskiej ściany i hantli
2. model z ładunkiem składający się z płaskiej elektrody i elektrolitu zawierającego dodatnio naładowane hantle.

Struktura układów heterogenicznych opisana została za pomocą singletowych funkcji rozkładu oraz funkcji orientacji średniej. Analizowany jest wpływ średnicy oraz stężenia. W modelu z ładunkiem właściwości podwójnej warstwy elektrycznej są opisane za pomocą potencjału elektrostatycznego i elektrycznej pojemności różniczkowej dla szeregu stężeń elektrolitu i gęstości ładunku powierzchniowego. Zbadane zostały jednowartościowe, dwuwartościowe i elektrolit o asymetrycznych ładunkach oparte na modelu hantli. Również przeprowadzona została analiza fuzji kul hantli oraz modelu z niecentrycznie umieszczonym ładunku w kuli.