

Nghiên cứu một số tính chất cơ bản của hệ
hạt nano từ bằng phương pháp mô phỏng
trên máy tính / Trần Nguyên Lân ; Nghd. : PGS.TS.
Trần Hoàng Hải . - H. : ĐHCN, 2010 . - 69 tr. + CD-
ROM

Tóm tắt: Giới thiệu sơ lược về ngành khoa học vật liệu tính toán, đề cập đến phương pháp Monte Carlo. Trình bày một số vấn đề cơ bản và ứng dụng của hạt nano từ trong y sinh học. Tiến hành các mô hình và mô phỏng: Năng lượng của hệ hạt nano từ, phương pháp mô phỏng (gồm: Hệ tọa độ; tính toán năng lượng lưỡng cực; thuật toán mô phỏng; lựa chọn thông số). Đưa ra kết quả và thảo luận: Nhiệt độ khóa, chu trình trễ và tính chất tập hợp của hệ hạt nano từ

NỘI DUNG

	<i>Trang</i>
Bảng chữ cái viết tắt	5
MỞ ĐẦU	6
Chương 1 - TỔNG QUAN	8
1.1. Mô hình hóa và mô phỏng trong khoa học vật liệu	8
1.1.1. Ý tưởng cơ bản của việc mô hình hóa và mô phỏng	8
1.1.2. Xây dựng mô hình toán học từ những bức tranh hiện tượng	9
1.1.3. Một số lưu đồ mô tả quá trình mô hình hóa và mô phỏng	9
1.1.4. Phân loại mô hình	11
1.2. Phương pháp Monte Carlo	11
1.2.1. Giới thiệu	11
1.2.2. Phương pháp Monte Carlo lấy mẫu đơn giản	12
1.2.3. Phương pháp Monte Carlo lấy mẫu quan trọng - thuật toán Metropolis	12
1.3. Khái niệm và tính chất cơ bản của hạt nano từ	15
1.3.1. Sự phân chia domain trong vật liệu sắt từ	15
1.3.2. Hạt đơn domain	16
1.3.3. Sự từ hóa của hạt nano từ	17
1.3.4. Tính chất của hạt nano từ tại nhiệt độ hữu hạn	19
1.3.5. Một số phép đo xác định tính chất của hệ hạt nano từ	24
1.3.6. Sự tương tác giữa những hạt nano từ	25
1.4. Ứng dụng của hạt nano từ trong y sinh học	27

1.4.1.	Tách từ	27
1.4.2.	Truyền dẫn thuốc	28
1.4.3.	Nâng thân nhiệt cục bộ	29
1.4.4.	Tăng tính tương phản cho MRI	30
Chương 2-	MÔ HÌNH VÀ MÔ PHỎNG	33
2. 1.	Năng lượng của hệ hạt nano từ	33
2.2.	Phương pháp mô phỏng	35
2.2.1.	Hệ tọa độ	35
2.2.2.	Tính toán năng lượng lưỡng cực	35
2.2.3.	Thuật toán mô phỏng	36
2.2.4.	Lựa chọn thông số	38
Chương 3-	KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN	39

3.1. Nhiệt độ khóa của hệ hạt nano từ	39
3.1.1. Độ từ hóa trong quá trình zero-field-cooled	39
3.1.2. Sự phân bố rào thế trong hệ hạt nano từ	40
3.1.3. Sự tán sắc của mẫu	41
3.1.4. Tương tác tĩnh từ giữa các hạt	42
3.1.5. Sự phụ thuộc của đỉnh ZFC vào từ trường ngoài	43
3.2. Chu trình từ trễ của hệ hạt nano từ	47
3.2.1. Ảnh hưởng của nhiệt độ	47
3.2.2. Sự tán sắc của mẫu	48
3.2.3. Tương tác tĩnh từ giữa các hạt	49
3.3. Tính chất tập hợp của hệ hạt nano từ	51
KẾT LUẬN VÀ HƯỚNG NGHIÊN CỨU TƯƠNG LAI	53
Tài liệu tham khảo	55
PHỤ LỤC: Các bài báo liên quan đến luận văn	