ได้นำเทคนิคมอนติคาร์โลบนโครงผลึก 2nnd มาใช้ในการจำลองแบบพอลิเอทิลลีนนาโนไฟเบอร์และอนุภาคนาโนโดยการรวมอันตรกิริยาภายในโมเลกุลและระหว่างโมเลกุลเป็นตัวแทนพลังงานของระบบ นาโนไฟเบอร์และอนุภาคนาโนสร้างขึ้นได้จากการเพิ่มมิติของกล่องจำลองแบบให้ยาวมากพอจนไม่มีแรงกระทำระหว่างกันกับโมเลกุลในกล่องข้างเคียง เช่น กรณีของนาโนไฟเบอร์จะมีเงื่อนไขการเป็นคาบของกล่องจำลองแบบเพียง 1 มิติ เนื่องจากตัวแปรพลังงานระหว่างโมเลกุลมีค่าเป็นลบ ดังนั้นโครงสร้างที่เสถียรสามารถเกิดขึ้นได้จากแรงดึงดูดดังกล่าว พอลิเอทิลลีนนาโนไฟเบอร์และอนุภาคนาโนจาก $C_{100}H_{204}$ จำนวน 72 โมเลกุลจะมีรัศมีประมาณ 5.0 nm บนโครงผลึก 2nnd สำหรับอนุภาคนาโนที่ได้ ฟังก์ชันการกระจายความหนาแน่นเชิงรัศมีจะมีลักษณะแบบไฮเปอร์โบลิคโดยมีกลุ่มของปลายสายโซ่มารวมกันที่พื้นผิวในขณะที่ส่วนภายในของโมเลกุลจะพบได้น้อยลงที่บริเวณนี้ การจัดเรียงในทิศทางเฉพาะจะพบทั้งระดับส่วนย่อยของสายโซ่และระดับโมเลกุล พลังงานพื้นผิวคำนวณได้โดยตรงจากพลังงานที่เกิดขึ้นบนโครงผลึกและแสดงเป็นฟังก์ชันกับรัศมี เมื่อเปรียบเทียบอนุภาคนาโนที่มีขนาดต่างกัน (ในช่วง 5.6 ถึง 7.6 nm) โดยมีจำนวนของโมเลกุลเท่านั้นที่แตกต่างกันพบว่ามีลักษณะที่เหมือนกัน การจำลองแบบกระบวนการตกผลึกของโมเลกุลพอลิเมอร์ในนาโนไฟเบอร์โดยการลดอุณหภูมิลงอย่างรวดเร็วที่ 298 K พบว่านาโนไฟเบอร์จะประกอบไปด้วยสายโซ่ยืดเกือบทั้งหมดซึ่งจะจัดเรียงขนานไปกับแกนของไฟเบอร์ บริเวณใกล้กับแกนไฟเบอร์จะจะมีความหนาแน่นน้อยและไร้ระเบียบมากกว่าปริเวณอื่น การเพิ่มอุณหภูมิของไฟเบอร์ให้สูงขึ้นต่ำกว่าจุดหลอมเหลวประมาณ 10 K พบว่าบริเวณที่ไร้ระเบียบนี้จะกำจัดได้ยากเมื่อเทียบกับการตกผลึกของพอลิเมอร์ในระบบฟิล์มบาง

Monte Carlo simulations of polyethylene (PE) nanofiber and nanoparticle were performed on the second nearest neighbor diamond (2nnd) lattice by including short and long-range interactions. Both nanofiber and nanoparticle can be obtained from equilibrate melts snapshots by increasing periodic side of two or three perpendicular directions to infinity. There is only one effective periodic boundary condition in the simulation of nanofiber. The presence of the attractive long-range interactions gives cohesion to the structure. PE nanofiber and nanoparticle, which contain up to 72 chains of $C_{100}H_{204}$ and have the radius ~ 5.0 nm, have been produced and equilibrated on the 2nnd lattice. In these nanoparticles, the density profiles are hyperbolic, with end beads being more abundant than the middle beads at the surface. There are orientational preferences at the surface on the scale of individual bond and whole chains. Surface energies can be calculated directly from the on-lattice energies and presented as a function of the nanoparticle radius. Comparison of nanoparticle with different thickness (the range from 5.6 to 7.6 nm), which contain different number of chains, does not indicate any significant differences in local and global equilibrium properties. Simulation of the nanofiber crystallization quenched from the melt to 298 K shows that the nanofiber adopts a configuration dominated by extended chains aligned parallel to the fiber axis. The vicinity of the fiber axis is less dense, and less well ordered, than the portions of the fiber located further from the fiber axis. Annealing at ~ 10 K below its melting temperature finds that this low-density region inside the fiber is not as easily removed, as is the grain boundary that usually develops inside a free-standing thin film upon rapid crystallization.