

Fizyka komputerowa IV – symulacje stałych sprężystości w układach modelowych¹⁾

Krzysztof W. WOJCIECHOWSKI

Instytut Fizyki Molekularnej, Polska Akademia Nauk
ul. Smoluchowskiego 17/19, 60-179 Poznań
e-mail: kww@man.poznan.pl

Otrzymano 20 listopada 1997 roku

Streszczenie. Stałe sprężystości odgrywają istotną rolę w opisie makroskopowych własności ciał stałych i dostarczają ważnych informacji dotyczących potencjału oddziaływań międzymolekularnych. W artykule opisano prosty sposób wyznaczania stałych sprężystości układów klasycznych za pomocą symulacji komputerowych przy wykorzystaniu fluktuacji składowych tensora odkształceń. Rozważania zilustrowano na przykładzie skrajnie anharmonicznego potencjału twardych kul.

Słowa kluczowe: stałe sprężystości, współczynnik Poissona, fluktuacje składowych tensora odkształceń, symulacje komputerowe, metoda Monte Carlo

¹⁾ Praca wykonana w ramach grantu 8T11F 010 08p04.