

Fizyka komputerowa V – o wyznaczeniu energii swobodnej i o problemie Keplera¹⁾

Krzysztof Witold WOJCIECHOWSKI

Institut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk
ul. Smoluchowskiego 17/19, 60-179 Poznań
e-mail: kww@man.poznan.pl

Otrzymano 16 stycznia 1999 roku

Streszczenie. Współczesne symulacje komputerowe umożliwiają wyznaczanie energii swobodnej różnych faz termodynamicznych. W niniejszej pracy przedstawiono kilka podstawowych metod obliczania energii swobodnej. Jako ilustracji działania tych metod użyto klasycznego układu twardych kul. Wybór tego układu podyktowany jest jego znaczeniem w teorii cieczy oraz wynikami najnowszych badań teoretycznych i symulacji komputerowych dotyczących fazy stałej twardych kul. Ostatnio bowiem Hales rozwiązał *problem Keplera*²⁾, a najnowsze symulacje komputerowe pozwoliły wykazać, że spośród różnych struktur twardych kul, których objętość w gęstym upakowaniu jest minimalna, najbardziej stabilną jest struktura kubiczna powierzchniowo centrowana (f.c.c.). Wyniki te pozwalają zrozumieć struktury krystaliczne gazów szlachetnych.

Słowa kluczowe: symulacje komputerowe, całkowanie termodynamiczne, próbkowanie parasolowe, energia swobodna, twarde kule, gęste upakowanie, struktury krystaliczne, struktury amorficzne, sieci f.c.c., sieci h.c.p, problem Keplera

¹⁾ Praca wykonana w ramach grantu 8T11F01214.

²⁾ Problem Keplera sprowadza się do znalezienia najgęstsze (ale niekoniecznie periodycznego) upakowania twardych kul. W 1611 roku Kepler wysunął przypuszczenie, że najgęstsze upakowanie twardych kul odpowiada gęsto upakowanej sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej.