

Spis treści

Wstęp	7
Opis ważniejszych oznaczeń	11
Rozdział 1. Podstawy modelowania w mechanice	13
Rozdział 2. Nanostruktury materialne	17
2.1. Podstawy mechaniki molekularnej	17
2.2. Model PARRINELLO–RAHMANA	30
2.3. Model ciała afinicznie sztywnego	39
2.4. Modele kontynualno-molekularne	45
2.4.1. Hipoteza Cauchy–Borna	45
2.4.2. Uogólniona reguła Cauchy–Borna	50
2.4.3. Aproksymacja harmoniczna	55
2.4.4. Modele mechaniki konstrukcji	56
2.5. Nanokompozyty	72
Rozdział 3. Kwantowe struktury materialne	75
3.1. Podstawy mechaniki kwantowej	75
3.1.1. Nieskończona bariera potencjału	77
3.1.2. Nieskończona studnia kwantowa	79
3.1.3. Skończona studnia kwantowa	81
3.1.4. Tunelowanie	83
3.1.5. Oscylator harmoniczny	84
3.1.6. Układ cząstek	85
3.2. Wariacyjna postać równania Schrödingera	90
3.3. Twierdzenie HELLMANNA–FEYNMANA	91
3.4. Kwantyzacja układu	93
3.4.1. Kwantyzacja układu cząstek afinicznie sztywnych	95
3.5. Tunelowanie w mechanice pękania	96
3.6. Kwantowomechaniczne podstawy wytrzymałości i wyężenia materiałów	99
3.7. Deformacyjne efekty w kropkach kwantowych	100

Rozdział 4. Podsumowanie	103
4.1. Rezultaty dotyczące deformacji	103
4.2. Rezultaty dotyczące miar naprężeń	104
4.3. Rezultaty dotyczące równań ruchu	105
4.4. Wnioski	106
Bibliografia	107