物性物理学 No.10

61908697 佐々木良輔

問 1

$U(R)$ の極値は

$$\frac{dU(R)}{dR} = -12\varepsilon\sigma^6\left(\frac{\sigma^6}{R^{13}} - \frac{1}{R^7}\right) = 0$$
$$\therefore\ R = \pm\sigma \tag{1}$$

ただし

$$U(\sigma) = -\varepsilon \tag{2}$$

また $R \to \infty$ では $U(R) \to 0$, $R \to 0$ では $U(R) \to \infty$ なのでポテンシャルは図 1 のような形になる.

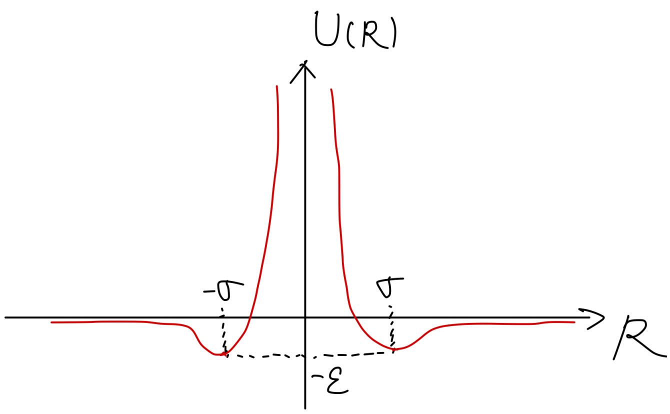

図 1　ポテンシャルの概形

問 2

図 2 のように面心立方格子の単位格子を考えると, 青い原子の周りの赤い原子が最近接である. これは $(1/2, 1/2, 0)$ にある原子であるので

$$N_1 = {}_3C_1 \times 2^2 = 12 \tag{3}$$

となる.

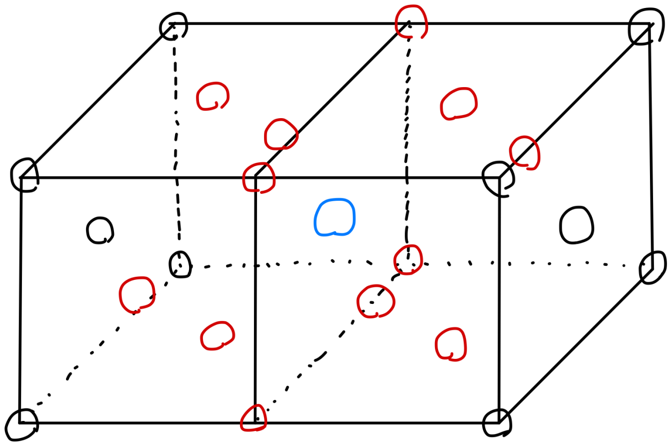

図 2　面心立方格子の配位数

問 3

第 2 近接原子は $(1, 0, 0)$ にある原子であるので, その数は

$$N_2 = {}_3 C_1 \times 2 = 6 \tag{4}$$

また $\sqrt{(a/2)^2 + (a/2)^2 + 0^2} = a/\sqrt{2} = R$ としたので,

$$R_2 = \sqrt{a^2 + 0^2 + 0^2} = a = \sqrt{2}R \tag{5}$$

となる.

問 4

第 3 近接原子は $(1, 1/2, 1/2)$ にある原子であるので, その数は

$$N_3 = {}_3 C_1 \times 2^3 = 24 \tag{6}$$

またその距離は

$$R_3 = \sqrt{1^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2} a = \sqrt{\frac{3}{2}} a = \sqrt{3}R \tag{7}$$

となる.

問 5

(2) 式の第 1 項について

$$\begin{aligned} \sum_{j \neq i} \frac{\sigma^{12}}{R_{ij}^{12}} &= \sigma^{12} \left(12 \frac{1}{R^{12}} + 6 \frac{1}{(\sqrt{2}R)^{12}} + 24 \frac{1}{(\sqrt{3}R)^{12}} \right) \\ &\simeq 12.13 \frac{\sigma^{12}}{R^{12}} \end{aligned} \tag{8}$$

また第 2 項について

$$\begin{aligned}\sum_{j \neq i} \frac{\sigma^6}{R_{ij}^6} &= \sigma^6 \left(12 \frac{1}{R^6} + 6 \frac{1}{(\sqrt{2}R)^6} + 24 \frac{1}{(\sqrt{3}R)^6} \right) \\ &\simeq 13.64 \frac{\sigma^6}{R^6}\end{aligned} \tag{9}$$

となる.

問 6

問 1 と同様に極値を求めると

$$\begin{aligned}\frac{dU_S(R)}{dR} = -12 \frac{N\varepsilon\sigma^6}{2} \left(A_{12} \frac{\sigma^6}{R^{13}} - A_6 \frac{1}{R^7} \right) = 0 \\ \therefore\ R = \pm \left(\frac{A_{12}}{A_6} \right)^{1/6} \sigma \simeq \pm 0.9806\sigma\end{aligned} \tag{10}$$

また $U_S(R)$ の極値は

$$\begin{aligned}U_S(R) &= \frac{N\varepsilon}{2} \left(A_{12} \left(\frac{A_6}{A_{12}} \right)^2 - 2A_6 \left(\frac{A_6}{A_{12}} \right)^1 \right) \\ &= -\frac{N\varepsilon}{2} \left(\frac{A_6^2}{A_{12}} \right) \simeq -7.669 N\varepsilon\end{aligned} \tag{11}$$

問 7

もっともポテンシャルが低い状態が実現するならば (10) 式から相互作用下での R は希ガス原子対に比べて小さいことがわかる.