

# 計算物理学 IV レポート 2

202210807 時長隆乃介

## 速度 Verlet 法の導出

$v(t + \Delta t)$  を  $t$  の周りで Taylor 展開すると

$$\begin{aligned}v(t + \Delta t) &= v(t) + \frac{dv(t)}{dt}\Delta t + \frac{1}{2}\frac{d^2v(t)}{dt^2}\Delta t^2 + O(\Delta t^3) \\&= v(t) + \frac{1}{m}F(t)\Delta t + \frac{1}{2m}\frac{dF(t)}{dt}\Delta t^2 + O(\Delta t^3) \\&= v(t) + \frac{1}{m}F(t)\Delta t + \frac{1}{2m}(F(t + \Delta t) - F(t))\Delta t + O(\Delta t^3) \\&= v(t) + \frac{1}{2m}(F(t) + F(t + \Delta t))\Delta t + O(\Delta t^3)\end{aligned}$$

よって導出された。

## Morse ポテンシャルから力の導出

Morse ポテンシャル

$$V(r) = D_e(1 - e^{-a(r-r_e)})^2$$

を  $r$  で微分して

$$\begin{aligned}F(r) &= -\frac{dV(r)}{dr} \\&= 2D_e(1 - e^{-a(r-r_e)}) \cdot (ae^{-a(r-r_e)})\end{aligned}$$

## LJ.c の実験

LJ.c を 初期温度 0-1000K の間で 100K 区切りで実行し、その結果を元に拡散係数を求め、プロットした。 グラフを Figure 1 に示す。

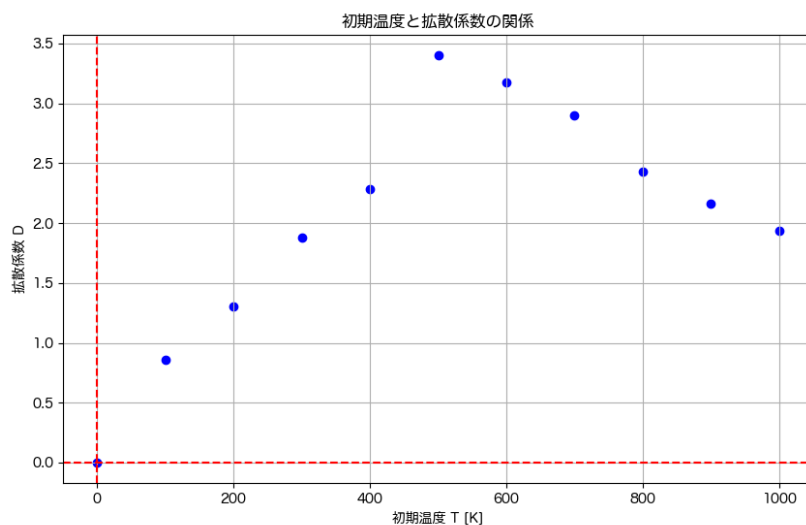


Figure 1: 拡散係数の温度依存性