

# 物性物理学

わっふる。

2021 年 7 月 14 日

## 1 凝集エネルギーの計算

Lennerd-Jones ポテンシャルは

$$U(R) = 4\varepsilon \left( \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right) \quad (1)$$

で与えられる。

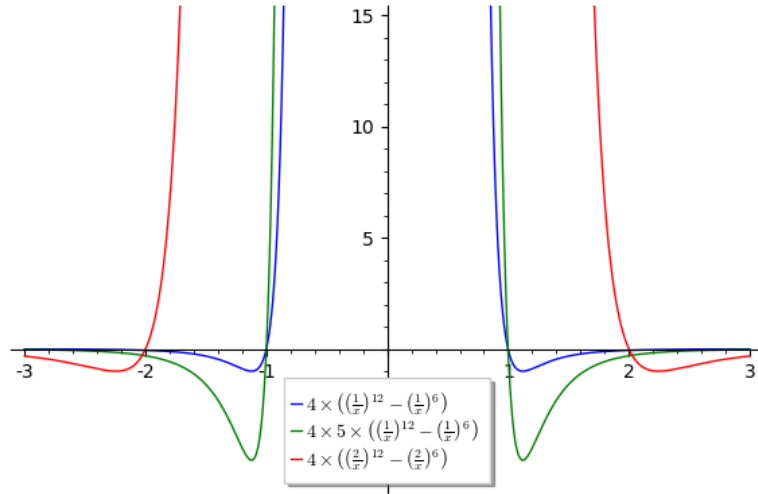


図 1 Lennerd-Jones ポテンシャル．適当にパラメータを選んでプロットした．

$N$  個の原子からなる結晶のポテンシャルエネルギーは，重複を除いた和を取って

$$U_{\text{tot}} = \frac{1}{2} N \cdot 4\varepsilon \left( \sum_j' \left( \frac{\sigma}{p_{ij} R} \right)^{12} - \sum_j' \left( \frac{\sigma}{p_{ij} R} \right)^6 \right) \quad (2)$$

となる．電子の安定点は Eq.(2) の極値で，すなわち， $R$  で微分して微分係数がゼロになる点である．

$$0 = \frac{dU_{\text{tot}}(R)}{dR} = 2N\varepsilon \left( \frac{-12}{R} \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} \left( \sum_j' p_{ij}^{-12} \right) - \frac{-6}{R} \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \left( \sum_j' p_{ij}^{-6} \right) \right) \quad (3)$$

を満たす点を  $R =: R_0$  とすると，

$$\left( \frac{\sigma}{R_0} \right)^6 = \frac{1}{2} \frac{\sum_j' p_{ij}^{-6}}{\sum_j' p_{ij}^{-12}} \quad (4)$$

となる。また、この点でのポテンシャルエネルギーは、

$$U(R_0) = 2N\varepsilon \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \left( \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \left( \sum_j 'p_{ij}^{-12} \right) - \sum_j 'p_{ij}^{-6} \right) \quad (5)$$

となる。与えられた値を用いて計算した<sup>i</sup>結果を表 1 に記す。

表 1 Eq.(4),(5) の具体的な格子に関する計算結果.

	$(\sigma/R_0)^6$	$U_{\text{tot}}(R_0)/(N\varepsilon)$
fcc, hcp	0.600	-8.61
bcc	0.671	-8.21
sc	0.677	-5.69

## 2 不活性ガスの結晶構造について.

Lennerd-Jones ポテンシャル Eq.(1) を考えると、安定点は Eq.(5) で与えられる。しかし、表 1 より、その安定点のエネルギーは結晶構造により異なり、最密構造のものが最もエネルギー的に安定である。よって、不活性ガスは最密構造を取る。

## 参考文献

[Kit] Kittel. 宇野良清他訳. “キッテル固体物理学入門” 第 8 版. 丸善.

[Ash] Ashcroft, Mermin, Wei. “Solid State Pysics” Revised edition. Cengage Learning.

---

<sup>i</sup>. 計算には一部 SageMath を用いた.