

③

$$U_2(r_{ij}) = \varepsilon \cdot f_2\left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right) = \varepsilon \cdot f_2(\bar{r}_{ij}) \quad ; \quad \bar{r}_{ij} = \frac{r_{ij}}{\sigma} \quad ; \quad \frac{\partial \bar{r}_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{1}{\sigma}$$

$$\frac{\partial U_2(r_{ij})}{\partial r_{ij}} = \frac{\partial U_2(r_{ij})}{\partial \bar{r}_{ij}} \cdot \frac{\partial \bar{r}_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{\varepsilon}{\sigma} \cdot \frac{\partial f_2(\bar{r}_{ij})}{\partial \bar{r}_{ij}}$$

$$f_2(\bar{r}_{ij}) = \begin{cases} A(B \cdot \bar{r}_{ij}^{-4} - 1) \cdot \exp[(\bar{r}_{ij} - a)^{-1}] & ; \quad r < a \\ 0 & ; \quad r \geq a \end{cases}$$

$$\frac{\partial f_2(\bar{r}_{ij})}{\partial \bar{r}_{ij}} = -4 \cdot A \cdot B \cdot \bar{r}_{ij}^{-5} \cdot \exp[(\bar{r}_{ij} - a)^{-1}] - A(B \cdot \bar{r}_{ij}^{-4} - 1) \cdot \exp[(\bar{r}_{ij} - a)^{-1}] \cdot (\bar{r}_{ij} - a)^{-2}$$