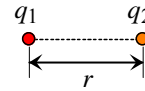


10. 分子間力

10.1 双極子相互作用

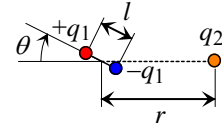
クーロン相互作用 : $V = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$

ϵ_0 : 真空の誘電率 [F m^{-1}]



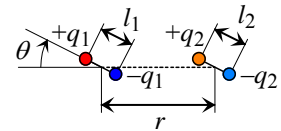
点双極子 (μ_1) と点電荷 (q_2) の相互作用 : $V = -\frac{\mu_1 q_2 \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}$

$$\mu_1 = q_1 \times l$$



平行な双極子 (μ_1) と双極子 (μ_2) の相互作用 :

$$V = \frac{\mu_1 \mu_2 (1 - 3 \cos^2 \theta)}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$



双極子と双極子の平均ポテンシャルエネルギー (キーサムの相互作用)

$$\langle V \rangle = -\frac{C}{r^6} \quad C = \frac{2\mu_1^2 \mu_2^2}{3(4\pi\epsilon_0)^2 kT} \quad (10.1)$$

k : ボルツマン定数

双極子-誘起双極子

$$\langle V \rangle = -\frac{C}{r^6} \quad C = \frac{\mu_1^2 \alpha'_2}{4\pi\epsilon_0} \quad (10.2)$$

α' : 分極率体積

誘起双極子-誘起双極子 (ロンドン力)

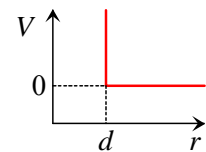
$$V = -\frac{C}{r^6} \quad C = \frac{2}{3} \alpha'_1 \alpha'_2 \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2} \quad (10.3)$$

I : イオン化エネルギー

10.2 相互作用ポテンシャル

剛体球ポテンシャル

$$\begin{aligned} V &= \infty & (r \leq d) \\ V &= 0 & (r > d) \end{aligned} \quad (10.4)$$



レナード-ジョーンズ (L-J) ポテンシャル

$$V = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right\} \quad (10.5)$$

問題 10.1

L-J ポテンシャルの

- $V=0$ となる r , および
- V の極小値と V が極小となる r , を求め、その概形を図示せよ。

$$V = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right\} \quad (10.5)$$

(解)

a) $V=0$ となるのは $r=r_0$ および $r \rightarrow \infty$ b) $dV/dr=0$ から $r=2^{1/6}r_0$. この r において $V=-\varepsilon$ [答] a) $r=r_0$ および $r \rightarrow \infty$.b) $r=2^{1/6}r_0, V=-\varepsilon$.

概形は右図.

