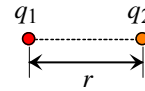


10. 分子間力

10.1 双極子相互作用

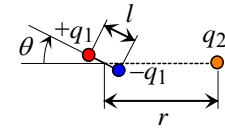
クーロン相互作用 : $V = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$

ϵ_0 : 真空の誘電率 [F m^{-1}]



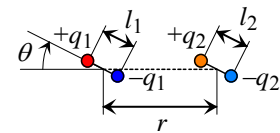
点双極子 (μ_1) と点電荷 (q_2) の相互作用 : $V = -\frac{\mu_1 q_2 \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}$

$\mu_1 = q_1 \times l$



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)

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

k_B : 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

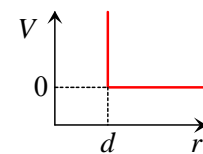
10.2 相互作用ポテンシャル

剛体球ポテンシャル

$$V = \infty \quad (r \leq d)$$

$$V = 0 \quad (r > d)$$

(10.4)



レナード-ジョーンズ (L-J) ポテンシャル

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

