2011年1月13日(木)

原子間ポテンシャルモデル関数のモデル化

+1 価のイオンと -1価のイオンの間の原子間ポテンシャルは，原子間距離 r に対して，

$$\Phi(r) = f\left(-\frac{1}{r} - a_1 \operatorname{cosech}^{\alpha}\frac{r}{\gamma} + a_2 \operatorname{cosech}^{\alpha+1}\frac{r}{\gamma}\right)$$

の形で比較的良くモデル化されるようである。ただし，f は定数で，エネルギーの単位を電子ボルト (eV)，距離の単位をオングストローム (Å) で表すとき，

$$f = \frac{\mathrm{e}}{4\pi\varepsilon_0}\times 10^{10} = \frac{\left(1.60217646\times 10^{-19}\right)\times 10^{10}}{4\pi\times\left(8.85418782\times 10^{-12}\right)} = 14.3996439\ \left[\mathrm{eV}\cdot\text{Å}\right]$$

関数

$$\operatorname{cosech} x = \frac{1}{\sinh x} = \frac{2}{e^{x}-e^{-x}}$$

は双曲余割関数 (hyperbolic cosecant function) とよばれる初等関数である。

a_1 , a_2 , α, γ の４パラメータを含み，各パラメータによる偏微分は，

$$\frac{\partial\Phi(r)}{\partial a_1} = -f \operatorname{cosech}^{\alpha}\frac{r}{\gamma}$$

$$\frac{\partial\Phi(r)}{\partial a_2} = f \operatorname{cosech}^{\alpha+1}\frac{r}{\gamma}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\Phi(r)}{\partial \alpha} &= f\ \frac{\partial}{\partial\alpha}\left(-a_1 \operatorname{cosech}^{\alpha}\frac{r}{\gamma} + a_2 \operatorname{cosech}^{\alpha+1}\frac{r}{\gamma}\right)\\ &= f\left(\operatorname{cosech}^{\alpha}\frac{r}{\gamma}\right)\left(-a_1 + a_2 \operatorname{cosech}\frac{r}{\gamma}\right)\ln\left(\operatorname{cosech}\frac{r}{\gamma}\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\Phi(r)}{\partial \gamma} &= f\ \frac{\partial}{\partial\gamma}\left(-a_1 \operatorname{cosech}^{\alpha}\frac{r}{\gamma} + a_2 \operatorname{cosech}^{\alpha+1}\frac{r}{\gamma}\right)\\ &= f\left[-a_1\alpha\sinh\frac{r}{\gamma} + a_2(\alpha+1)\right]\left(\operatorname{cosech}^{\alpha+2}\frac{r}{\gamma}\right)\left(\frac{r}{\gamma^2}\right)\left(\cosh\frac{r}{\gamma}\right)\end{aligned}$$

となる。なお，関数 $\sinh x = \dfrac{e^{x}-e^{-x}}{2}$ は双曲正弦関数 (hyperbolic sine function)，関数 $\cosh x = \dfrac{e^{x}+e^{-x}}{2}$ は双曲余弦関数 (hyperbolic cosine function) である。