

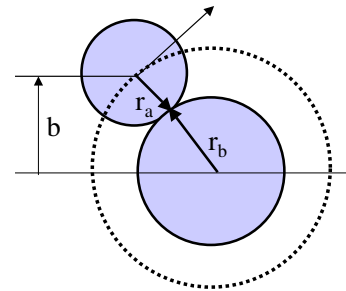
1 Rutherford 散乱断面積

♣ 衝突断面積について一言

速度 v の入射粒子 (projectile) A が、静止している標的粒子 (target) B に衝突する。粒子の半径は r_a, r_b とし、共に剛体球と仮定する。衝突径数 (impact parameter) を b とすると、 $b \leq (r_a + r_b)$ であれば必ず衝突するが、 $b > (r_a + r_b)$ のときは衝突しない。故に、衝突するかしないかということに関する限り、大きさを持たない質点が半径 $(r_a + r_b)$ の球と衝突するのと同じ。つまりこの質点にとっては、標的は、

$$\sigma = \pi(r_a + r_b)^2$$

の断面積を持つ。 σ を衝突断面積と呼ぶ。粒子 A が標的 B の気体の中を長さ l だけ動くとき、衝突の起こる回数 (衝突しても素通りするものとして) λ σl の体積の円筒内に含まれる B の数、 $\sigma l n$ 、に等しい (n は単位体積 (cm^3) 中の B の個数密度)。



平均自由行程 (mean free path) : $\lambda = \frac{\text{走行距離}}{\text{その間の衝突回数}} = \frac{l}{\sigma l n} = \frac{1}{n\sigma}$

であり、衝突から次の衝突までに走る平均距離である。別の見方：長さ dx を走る間に衝突して減衰する割合は、 $dI = -I(x)\sigma n dx$ $I(x) = I_0 e^{-n\sigma x}$ 。これより、ある時刻から $1/e$ に減少するまでに走る距離は、 $e^{-1} = e^{-n\sigma x}$ $x = \frac{1}{n\sigma} = \lambda$ 、即ち、 $1/e$ になる距離でもある。

衝突間の平均自由時間 (mean free time) : $\tau = \frac{\lambda}{v} = \frac{1}{n\sigma v}$

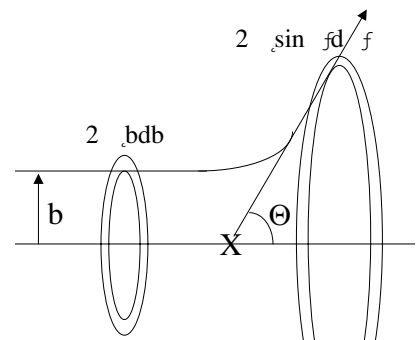
1 秒間の衝突の頻度 (collision frequency) : $Z_a = \frac{1}{\tau} = n\sigma v$

特に、 $Z_{ab} = \sigma v$ 、を衝突頻度因子と呼び、反応速度定数に関連した量。

断面積の定義は粒子数保存から： $2\pi b db$ に入った粒子数 $n(b) = 2\pi \sin \Theta d\Theta$ に散乱された粒子数 $n(\Theta)$

$$\sigma(\Theta) = \frac{\text{散乱粒子数}/(\text{単位時間} \cdot \text{単位立体角})}{\text{入射粒子数}/(\text{単位時間} \cdot \text{単位立体角})} = \frac{n(\Theta)/2\pi \sin \Theta d\Theta}{n(b)/2\pi b db} = \frac{bdb}{\sin \Theta d\Theta} = \frac{b}{\sin \Theta (d\Theta/db)}$$

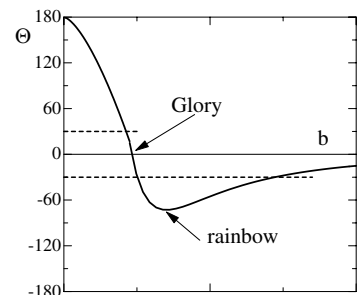
b と Θ は 1 : 1 対応すると言ったが、より一般的には (引力ポテンシャルが共存するような場合) 図のようになる。故に、ある角度 (例えば、 $\pm 30^\circ$) では、3 つの b が対応する (実験的には区別不可能)。



$$\sigma(\Theta) = \sum_i \left| \frac{b}{\sin \Theta (d\Theta/db)} \right| \quad \text{正負は条件による。}$$

- rainbow (虹) 散乱 : $d\Theta/db = 0$ のとき
- Glory (グロ - リ) 散乱 : $\sin \Theta = 0$ のとき

で、共に $\sigma(\Theta)$ が非常に大きくなるのに対応する。



1.1 古典的計算 (簡単方法)

μ, v_i は換算質量、相対速度で、初期エネルギーは

$$E_i = \frac{p_i^2}{2\mu} = \frac{\mu v_i^2}{2}$$

弾性散乱より、 $p_i = p_f = \mu v_i$,

運動量移行 (momentum transfer) は

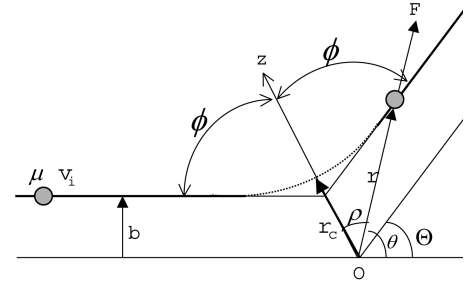
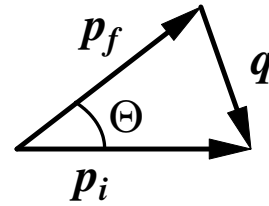
$$\mathbf{q} = \Delta\mathbf{p} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f$$

$$\rightarrow q^2 = 2p_i^2(1 - \cos\Theta) = 4p_i^2 \sin^2(\Theta/2)$$

$$\rightarrow q = 2p_i \sin(\Theta/2)$$

一方、これは力積 (但し図の z 成分) に等しいから、

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} F_z dt = \int_{-\phi}^{\phi} \frac{z_1 z_2 e^2}{r^2} \cos\rho dt$$



角運動量保存 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = r\mathbf{e}_r \times \mu \left(\frac{dr}{dt} \mathbf{e}_r + r \frac{d\rho}{dt} \mathbf{e}_\rho \right) = \mu r^2 \frac{d\rho}{dt} = \mu v_i b \quad \rightarrow dt = \frac{r^2}{b v_i} d\rho$

$$\rightarrow q = \frac{z_1 z_2 e^2}{b v_i} \int_{-\phi}^{\phi} \cos\rho d\rho = \frac{2z_1 z_2 e^2}{b v_i} \sin\phi = \frac{2z_1 z_2 e^2}{b v_i} \cos(\Theta/2), \quad (\Theta + 2\phi = \pi \text{ より})$$

2つの q 式から、 $q = 2\mu v_i \sin(\Theta/2) = \frac{2z_1 z_2 e^2}{b v_i} \cos(\Theta/2), \quad \rightarrow \tan \frac{\Theta}{2} = \frac{z_1 z_2 e^2}{\mu v_i^2 b} = \frac{d}{2b}$

ここで、 $d = \frac{z_1 z_2 e^2}{\mu v_i^2 / 2} = \frac{z_1 z_2 e^2}{E_i}$ 、は collision-diameter と呼ばれ $b=0$ (head-on-collision) のときの最近接距離に相当する。故に、或るひとつの衝突径数に対してひとつの散乱角 (今の場合 C M系での角度 Θ) が対応する。散乱断面積は「 b で来たものは Θ 方向に必ず行く」という粒子数保存の考えでよいから、

$$\sigma(\Theta) 2\pi \sin\Theta d\Theta = 2\pi b db, \quad \rightarrow \sigma(\Theta) \sin\Theta d\Theta = b db, \quad b \text{ と } \Theta \text{ の関係式から}$$

$$\sigma(\Theta) \sin\Theta d\Theta = \frac{d^2 \cos(\Theta/2) d\Theta}{8 \sin^3(\Theta/2)} = \left(\frac{z_1 z_2 e^2}{4E_i} \right)^2 \frac{\sin\Theta d\Theta}{\sin^4(\Theta/2)}$$

散乱立体角 $d\Omega_f = d\varphi \sin\Theta d\Theta$ を用いて、 $\sigma(\Theta) d\Omega_f = \left(\frac{z_1 z_2 e^2}{4E_i} \right)^2 \frac{d\Omega_f}{\sin^4(\Theta/2)}$

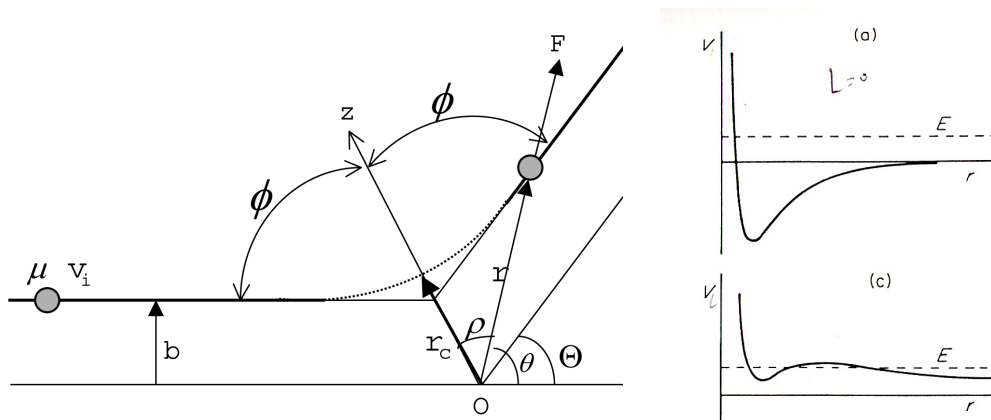
1.2 古典的計算 (一般的)

$$\left\{ \begin{array}{l} L = \text{保存} = r p \sin \theta, \text{ 紙面裏向きベクトルで初期値 } \mu v_i b \text{ に等しい} \\ \text{一般には, } \mathbf{v} = \dot{r} \mathbf{e}_r + r \dot{\theta} \mathbf{e}_\theta \text{ より } \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mu r^2 \dot{\theta} \rightarrow \dot{\theta} = \frac{b v_i}{r^2} \\ E_i = \frac{\mu}{2} v_i^2 = \text{保存} = \frac{\mu}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + V(r) = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + \underbrace{V(r) + \frac{\mu v_i^2 b^2}{2 r^2}}_{V_{eff}} = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + V_{eff} \end{array} \right.$$

$V_{eff} = V(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2}$ を有効ポテンシャルと呼ぶ。第1項は2粒子の核間距離 r の方向 (動径成分) の運動エネルギーで、 $\frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 = E_i - V_{eff}$ 、これがゼロの場合の r が最近接距離で、classical-turning-point とも呼ぶ。 $V(r)$ の形 (斥力、引力、どっち?) や、角運動量 L (または衝突径数 b) の大きさに依存して、下図右のように1個だけとは限らない。

最も簡単な、 $V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} = \frac{k}{r}$ 、の場合 $E_i = \frac{k}{r} + \frac{\mu v_i^2 b^2}{2 r^2}$ $2E_i r^2 - 2kr - \mu v_i^2 b^2 = 0$ の正の解、

$$r_c = \frac{k}{2E_i} + \sqrt{\frac{k^2}{4E_i^2} + b^2} \quad : \text{closest approach distance (下図)}$$



軌道計算 (単純クーロンポテンシャルの場合)

$$E_i \text{ 式より, } \dot{r} = \pm v_i \sqrt{1 - \frac{2}{\mu v_i^2} V(r) - \frac{b^2}{r^2}} = \pm v_i \sqrt{1 - \frac{k}{r E_i} - \frac{b^2}{r^2}}$$

$$\Rightarrow \frac{dr}{d\theta} = \frac{dr}{dt} \frac{dt}{d\theta} = \frac{\dot{r}}{\dot{\theta}} = \frac{\dot{r} r^2}{b v_i} = \pm \frac{r^2}{b} \sqrt{1 - \frac{k}{r E_i} - \frac{b^2}{r^2}} \quad (\text{正は衝突前、負は後})$$

なお、 $\sqrt{\text{正}}$ より $r \geq r_c$ が得られる。 $r = r_c$ のときの角度を ϕ とすると対称性から $2\phi + \Theta = \pi$ 。衝突前 ($r = \infty \sim r_c$) の軌道について積分して ϕ を計算すればよい。

$$\begin{aligned} (\phi + \Theta) - \pi = -\phi &= \int_{\pi}^{\phi + \Theta} d\theta = \int_{\infty}^{r_c} \frac{d\theta}{dr} dr = \int_{\infty}^{r_c} \frac{b dr}{r^2 \sqrt{1 - k/E_i r - b^2/r^2}}, \quad \chi \equiv \frac{1}{r} \text{ として} \\ &= \int_{1/r_c}^0 \left(1 - \frac{k\chi}{E_i} - b^2 \chi^2\right)^{-1/2} b d\chi = \int_{1/r_c}^0 \left[\left(\frac{\sqrt{4E_i^2 b^2 + k^2}}{2E_i b}\right)^2 - \left(b\chi + \frac{k}{2E_i b}\right)^2 \right]^{-1/2} b d\chi \end{aligned}$$

ここで、 $b\chi + \frac{k}{2E_i b} = \frac{\sqrt{4E_i^2 b^2 + k^2}}{2E_i b} \sin \eta$ 、とおく。積分範囲は、 $0 \leq \chi \leq 1/r_c \rightarrow \eta_0 \leq \eta \leq \eta_1$

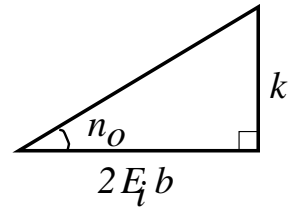
$$\chi = 0 \text{ では、} \sin \eta_0 = \frac{k}{\sqrt{4E_i^2 b^2 + k^2}} \quad \text{右図}$$

$$\chi = \frac{1}{r_c} \text{ では、} \sin \eta_1 = 1 \quad \rightarrow \quad \eta_1 = \pi/2$$

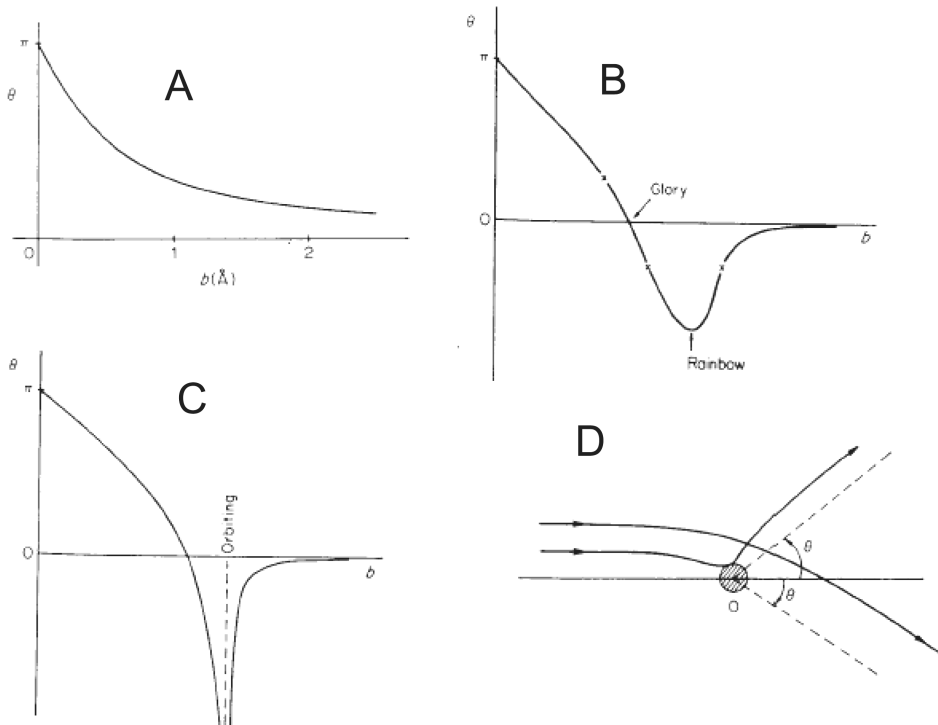
$$\eta \text{ 積分より、} \quad -\phi = \int_{\eta_1}^{\eta_0} d\eta = \eta_0 - \frac{\pi}{2}$$

$$\rightarrow \quad \Theta = \pi - 2\phi = 2\eta_0$$

$$\rightarrow \quad \tan \frac{\Theta}{2} = \tan \eta_0 = \frac{k}{2E_i b} = \frac{z_1 z_2 e^2}{2E_i b} = \frac{z_1 z_2 e^2}{\mu v_i^2 b} = \frac{d}{2b}$$



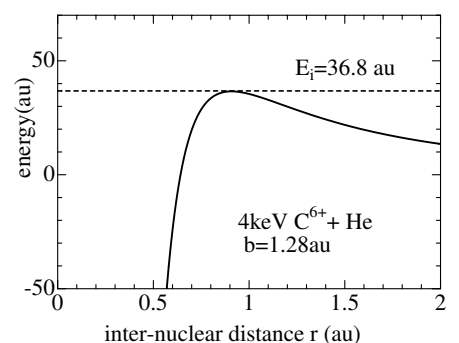
断面積は前節と同様にして求まる。この式より電子が無いイオン同士の散乱では、散乱角 Θ と衝突径数 b の関係は 1 対 1 に対応する (下の A 図)。しかし、電子による核電荷の遮蔽 (screening) がある時や低速度の衝突では、B, C 図のように 1 : 1 対応ではなく、ある散乱角度に対応する b は複数個になる。負の散乱角とは図 D のような軌道に対応する。



低速度のイオン (電荷を qe とする) と中性原子との衝突では、ポテンシャルの形は上述のような単純クーロン型ではなく、原子の分極による「引力」ポテンシャルとなる (次式)。

$$V(r) = -\alpha \left(\frac{qe}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{2r^4} = -\frac{\alpha q^2}{2r^4} \quad \alpha : \text{原子の分極率}$$

第 1 式は MKS 表記、第 2 式は原子単位。実例として 4keV の C^{6+} イオンとヘリウム原子の衝突 ($E_i = 36.8 \text{ au}$) で、この $V(r)$ を用いた有効ポテンシャルを図示する。衝突径数によって壁の頂点の高さが異なり、図示したのは $b = 1.28 \text{ au} = 0.68 \text{ \AA}$ の場合。このときは、 r が 0.9 au あたりで入射エネルギーと一致する (つまり最近接距離)。 b がこれより小さいと壁の高さは点線よりも下がるため、入射イオンは原子の内部まで入り込み、核の周りをグルグルといつまでも回ることがある。この現象が上図 C に示した orbiting。

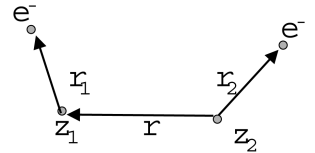


相互作用ポテンシャル

粒子同士が相互作用 (interaction) によって或る反応を起こす過程は、シュレーディンガ方程式を解けばよい。方程式自体は正確に書いて、例えば、1電子系 (H型) 同士の系については、

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - Z_2 e^2 \int \frac{n_1(\mathbf{r}_1) d^3 \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}_1|} - Z_1 e^2 \int \frac{n_2(\mathbf{r}_2) d^3 \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} + e^2 \int \frac{n_1(\mathbf{r}_1) n_2(\mathbf{r}_2) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

である。しかし、これですら解くのは不可能で、1個の水素原子内の電子に対してのみ可能である。理由は、上式に含まれる電子密度 $n(r)$ 自体が波動関数 $(|\psi(x)|^2)$ から決まるものであるため。要は、2体以上 (多電子原子) の場合は無理ということ。そこでこれまで色々な近似形が考案されてきた。分類としては、screened クーロンポテンシャル (screened Coulomb)、ボルン-メイヤー (Born-Mayer) 型、引力型、折衷型 (Combined)、経験的、解析的など。



1. Screened Coulomb ポテンシャル

$$V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \phi(r/a), \quad \phi(r/a) = \sum_i c_i e^{-d_i r/a}, \quad \sum_i c_i = \phi(0) = 1$$

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} a_0 z_{eff}^{-1/3} = 0.88534 a_0 z_{eff}^{-1/3}: \text{スクリーニング長、Thomas-Fermi 半径}$$

$z_{eff} = (z_1^x + z_2^x)^y$: 有効電荷、トーマス・フェルミのモデルでは、 $xy = 1$ 、の関係

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{@Firsov モデル} & x = 1/2, y = 2 \rightarrow a_F = 0.88534 a_0 (z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^{-2/3} \\ \text{@Lindhard モデル} & x = 2/3, y = 3/2 \rightarrow a_{LS} = 0.88534 a_0 (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{-1/2} \\ \text{@Robinson モデル} & a_R = 0.0750 \text{\AA} \quad (z_1 = z_2 \text{ に対してのみ}) \end{array} \right.$$

以上の中で最も簡単なものは Bohr ポテンシャルで、展開項がひとつのもの。

$$V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} e^{-r/a_B}, \quad a_B = a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$$

この型は遠方の r でよくない。トーマスフェルミポテンシャル (下記) の解析的近似解として Moliere が考案したものは3つの展開項を持つもので、表の通りの数値。

スクリーニング長としてよく使われるのは Firsov の a_F であるが、 a_{LS} と比べてどう良いかについての決定的な理由が無いので、実験に合わせたパラメタと考えてよい。

Wilson は多数の原子間ポテンシャルを計算するために「自由電子法」を用い、Kr-C モデルと呼ばれる。このポテンシャルは色々な粒子間の組み合わせに対してかなりよい平均値であることが知られている。

もっと一般には、数百個から1万個程のイオン-原子の組み合わせで求めたものがあり、ZBL (Ziegler, Biersack, Littmark) モデルというものがあり、"universal potential" と呼ばれており、モリエール型よりも良く実験値を再現する。

$$\text{ZBL では、} xy = 0.69, \text{ の関係で、} \quad a_{ZBL} = 0.88534 a_0 (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1}$$

Kr-C 型は、この a_{ZBL} を用いると ZBL とよく一致し、Firsov の a_F を用いるとモリエール型に合うようになる。

次に、Lenz-Jensen モデルでは、 $\phi(x)$ の形自体が異なり、

$$\phi(x) = (1 + y + 0.3344y^2 + 0.485y^3 + 0.002647y^4) e^{-y}, \quad y = \sqrt{9.67x}, \quad x = r/a_{LS}$$

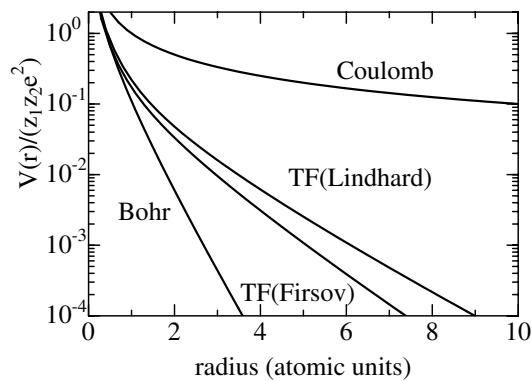
係数	Bohr	Moliere	Kr-C	ZBL	Lenz-Jensen
c_1	1	0.35	0.190945	0.028171	0.01018
c_2	0	0.55	0.473674	0.28022	0.24330
c_3	0	0.10	0.335381	0.50986	0.7466
c_4	0	0	0	0.18175	0
d_1	1	0.3	0.278544	0.20162	0.206
d_2	0	1.2	0.637174	0.40290	0.3876
d_3	0	6.0	1.919249	0.94229	1.038
d_4	0	6.0	0	3.1998	0

2. Born-Mayer ポテンシャル

$$V(r) = A_{BM} e^{r/a_{BM}}, \quad A_{BM} = 52(z_1 z_2)^{3/4} \text{eV}, \quad a_{BM} = 0.219 \text{\AA}$$

ごく簡単なものであるため計算では非常によく用いられる。 A_{BM} や a_{BM} の値は各元素ごとに与えられていて、universal なものとして、上の式が提唱されている (Sigmund)。

(問題: He + C 衝突でのポテンシャルが右図となることを確かめよ)



----- メモ: 1原子の中の1電子に対するポテンシャル -----

♣ Hartree ポテンシャル (1電子近似)

$$i \text{ 番目の電子のハミルトニアン}; H_i = -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} + \sum \int \frac{e^2}{r_{ij}} |\phi_j(\mathbf{r}_j)|^2 d^3 \mathbf{r}_j$$

計算手順: 1電子系で求めた $\phi_j(\mathbf{r}_j)$ (初期値) 代入し、H決定 $\phi_j(\mathbf{r}_j)$ 導出 式代入 H決定 $\phi_j(\mathbf{r}_j)$ 決定

また、この式にスピン相互作用を入れたものが Hartree-Fock 近似で軽原子には良い近似である。しかし、これら方法は多電子系には複雑過ぎる、収束性が悪いなどの欠陥があり、次のト・マス・フェルミ近似が普通

♣ Thomas-Fermi ポテンシャル

* フェルミ粒子の集団として扱う。

* 基底状態では、ある最大運動量 (p_0) まで許される状態すべてに電子が詰まっているとする。各状態には spin の2個の電子が詰まる。物理空間の体積を L^3 として、

$$\text{電子数} = 2 \times \frac{4\pi p_0^3 L^3}{3h^3} = \frac{p_0^3}{3\pi^2 \hbar^3} L^3 = n(r) L^3$$

任意の場所 (r) での電子の最大運動エネルギー - T は、 $E = T + V = 0$ のときで、 $T = p_0^2/2m = -V(r)$ なので、 $p_0^2 = -2mVB(r)$

$$n(r) = \frac{(-2mVB(r))^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \quad \text{と書ける。} n(r) : r \text{ の位置での電子数密度}$$

self-consistency (自己無撞着) の条件、「静電ポテンシャル ($= -V(r)/e$) は $n(r)$ の電子群が作るポアソン方程式から決定される」から

$$\frac{1}{-e} \Delta V(r) = -\frac{\rho(r)}{\epsilon_0} (MKCS) = -4\pi \rho(r) (CGS \text{ ガウス系}) = 4\pi e n(r)$$

$$-\Delta V(r) = \frac{4e^2}{3\pi\hbar^3} (-2mV(r))^{3/2} = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} (-V)^{3/2} (\text{原子単位で})$$

これを解けばよい。条件は、 $V(r)|_{r=0} \rightarrow Z/r$ (screen 無し), $V(r)|_{r=\infty} \rightarrow 0$ (完全 screen)

解き方 $V(r) = -\frac{Z}{r}\phi(r)$, とおく。 $\Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)$ より $\Delta V = -\frac{Z}{r} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2}$

Poisson 方程式の右辺 = $\frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \left(\frac{Z\phi}{r} \right)^{3/2} \rightarrow \frac{d^2\phi}{dr^2} = \frac{8\sqrt{2}Z\phi^{3/2}}{3\pi\sqrt{r}}$, 最後に $r = ax$ として、

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = a^{3/2} \frac{8\sqrt{2}Z}{3\pi} x^{-1/2} \phi^{3/2} \rightarrow a = \left(\frac{3\pi}{8\sqrt{2}} \right)^{2/3} Z^{-1/3} = 0.88534a_0 Z^{-1/3} \text{ とおく。}$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = x^{-1/2} \phi^{3/2} \quad \text{Thomas-Fermi 標準形}$$

この方程式には解析解は無し、数値積分のみ(下表)。

**最も簡単な式は、Lindhard 近似式、 $\phi(x) = 1 - \frac{x}{\sqrt{3+x^2}}$

**最も普通には、上述のモリエ - ル近似式

x	ϕ	x	ϕ	x	ϕ
0	1.000*	2.500	0.193	10.44	0.0225
0.010	0.985*	2.708	0.176	10.67	0.0216
0.030	0.959*	2.918	0.162	10.92	0.0206
0.060	0.924*	3.125	0.150	11.16	0.0198
0.080	0.902*	3.333	0.138	11.43	0.0189
0.100	0.882*	3.542	0.127	11.72	0.0180
0.150	0.835*	3.750	0.118	12.01	0.0171
0.200	0.793	3.960	0.110	12.31	0.0163
0.250	0.755	4.167	0.102	12.63	0.0155
0.292	0.727	4.375	0.0956	12.97	0.0147
0.333	0.700	4.583	0.0895	13.33	0.0139
0.375	0.675	4.792	0.0837	13.72	0.0131
0.417	0.651	5.000	0.0788	14.12	0.0123
0.458	0.627	5.209	0.0739	14.55	0.0116
0.500	0.607	5.418	0.0695	15.01	0.0109
0.542	0.582	5.625	0.0656	15.48	0.0102
0.584	0.569	5.834	0.0619	16.00	0.0094
0.625	0.552	6.042	0.0587	16.56	0.0088
0.667	0.535	6.250	0.0554	17.14	0.0081
0.709	0.518	6.458	0.0526	17.78	0.0075
0.750	0.502	6.667	0.0500	18.46	0.0069
0.792	0.488	6.875	0.0473	19.20	0.0064
0.833	0.475	7.083	0.0450	20.00	0.0058
0.875	0.461	7.292	0.0430	20.87	0.0053
0.917	0.449	7.500	0.0408	21.82	0.0048
0.958	0.436	7.708	0.0389	22.85	0.0043
1.000	0.425	7.917	0.0371	24.00	0.0038
1.042	0.414	8.125	0.0355	25.26	0.0034
1.083	0.406	8.333	0.0340	26.67	0.0030
1.125	0.393	8.542	0.0321	28.24	0.0026
1.167	0.382	8.750	0.0310	30.00	0.0022
1.208	0.374	8.958	0.0298	32.00	0.0019
1.250	0.364	9.167	0.0287	34.29	0.0016
1.458	0.322	9.375	0.0275	36.92	0.0011
1.667	0.287	9.583	0.0265		
1.875	0.259	9.792	0.0255		
2.083	0.234	10.000	0.0244		
2.292	0.212	10.22	0.0235		

♣♣ 参考：低速衝突で、分子軌道になってしまう場合

1) 経験的ポテンシャル

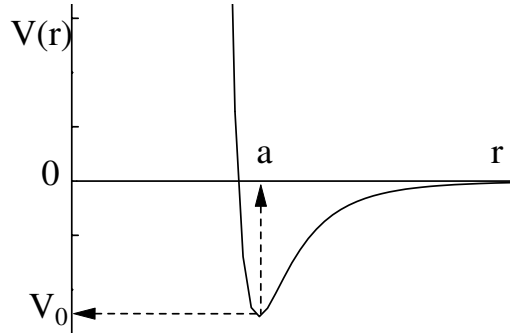
分子間力ポテンシャルを分子の向きで平均したものを ($r \rightarrow \infty$ での系のエネルギー - を基準として) 使用し、次式で表されるものを Lennard-Jones の (n, m) 型ポテンシャルと呼ぶ。

$$V(r) = \frac{A}{r^n} - \frac{B}{r^m}, \quad (A > 0, B > 0, n > m > 0)$$

よく用いられるのは、 $n = 12, m = 6$ で

$$V(r) = V_0 \left\{ \left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right\} = 4V_0 \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\}, \quad a \equiv 2^{1/6}\sigma$$

a は最小値を与える原子間距離、 $V(r) = 0$ になるのは、 σ 。



このように、斥力ポテンシャルと引力ポテンシャルが共存している場合が、本当は最も一般的なポテンシャルの形である。入射粒子の軌道 (trajectory) も面白いように変化する (後述)。

♣ 分極力およびファン・デル・ワ - ルス力について

(培風館 物理学辞典より) 2つの中性の安定な分子の間に働く分子間力、特にそのなかで遠くまで影響力をもつ弱い引力部分をさす。分子間距離を r として $1/r$ のべきに展開する多重極展開理論においては、双極子・双極子相互作用の項から出てくる分散力が主な寄与をしている。この場合、力は遠方で $1/r^7$ に比例する。圧力を上げ温度を下げる時気体が液体に変わるのは、ファン・デル・ワ - ルス力の存在による。同じ力は化学的に安定な分子を弱くではあるが結びつけている分子の集団 (クラスタ -) や分子性結晶を作る。2つの原子がファンデルワ - ルス力によって結合し、分子をつくることもある。これをファンデルワ - ルス分子という。

簡単な例

予備知識 $\left\{ \begin{array}{l} \text{双極子モ - メントが作る電位 ; } \phi(r) = \frac{p \cos \theta}{r^2} \\ \text{それによる } r \text{ 方向の電場 ; } E(r) = -\frac{\partial \phi}{\partial r} = \frac{2p \cos \theta}{r^3} \end{array} \right.$

例 1) 原点にある原子から r の位置に電荷 Ze のイオンがある場合

電荷が原点に作る電場 $E = z_e/r^2$ 。一方、双極子モ - メント p はこの E によってつくられるから、 $p = \alpha E$ (α は原子の分極率)。次に、この p により電荷 z_e の受ける力は上式 ($\theta = 0$) から

$$F = z_e \frac{2p}{r^3} = \frac{2\alpha(z_e)^2}{r^5}, \quad \text{この力を } \infty \rightarrow r \text{ まで積分すると、「分極ポテンシャル」と呼ばれる引力が生じる。}$$

$$V(r) = \int_{\infty}^r F dr = -\frac{\alpha(z_e)^2}{2r^4}$$

例 2) 中性原子同士 (= 双極子同士) をやるとファン・デル・ワ - ルス力がでる (略)