24. ročník, úloha II . 2 ... *Lennard-Jonesův potenciál* *!!! chybí statistiky !!!*

Mezi dvěma atomy inertního plynu působí tzv. Lennard-Jonesův potenciál

$$U(R) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6} \right) .$$

Předpokládejte, že pohyb atomů je omezen na přímku. Určete rovnovážnou polohu, aniž byste derivovali! Význam konstant σ a ε bude podrobněji vysvětlen ve vzorovém řešení.

Jakub si rád hraje s atomy

Lennard-Jonesův potenciál je zjednodušeným matematickým modelem chování dvou částic plynu. Chování částic závisí na jejich vzdálenosti R a modeluje se pouze v jedné dimenzi.

Pro lepší představu můžeme vidět na obrázku, jak vypadá závislost potenciální energie na vzdálenosti mezi těmito částicemi. K určení rovnovážné polohy tedy vlastně musíme zjistit, kde je minimum této křivky, kterou můžeme popsat rovnicí

$$U(R) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6} \right) . \tag{1}$$

Minimum bez derivování můžeme zjistit pomocí upravení na čtverec.

Pro větší přehlednost si nejprve zavedeme substituci

$$A = \frac{2\sigma^6\sqrt{\varepsilon}}{R^6} .$$

Pravou stranu rovnice (1) pak můžeme přepsat jako

$$U(R) = A^2 - 2A\sqrt{\varepsilon} = (A - \sqrt{\varepsilon})^2 - \varepsilon . \tag{2}$$

Pro doplnění na čtverec jsme přičetli a odečetli ε (čímž se hodnota nezmění) a již vidíme, že kvadratický člen bude $(A - \sqrt{\varepsilon})$ a konstantní $-\varepsilon$. Z tohoto tvaru je již patrné, že minimum má potencál v bodě $A = \sqrt{\varepsilon}$, tj.

$$r_0 = \sigma\sqrt[6]{2} .$$

Hloubka tohoto minima je rovna

$$U(r_0) = -\varepsilon .$$

Vypočteme-li $U(\sigma) = 0$. Nyní je již znám význam konstant σ a ε. σ je vzdálenost, které odpovídá nulová energie a ε je hloubka potenciálové jámy.

K vyřešení úlohy můžeme použít i jiný obecnější postup. Budeme zkoumat rovnici $U(R) = U_0$ a hledat U_0 takové, aby tato rovnice měla právě jeden kořen. Tento je extrémem a jemu odpovídající konstanta U_0 jeho hodnotou.

Ukažme si tento postup v praxi. Vyjděme z rovnice (2).

$$A^2 - 2A\sqrt{\varepsilon} - U_0 = 0 .$$

Tato rovnice bude mít jeden kořen, právě tehdy pokud diskriminant $D = 0$, tj.

$$D = 4A^2\varepsilon + 4A^2U_0 = 0 ,$$

toto je splněno pro $U_0 = -\varepsilon$. Dále pro jediný kořen této rovnice platí

$$A = \frac{2\sqrt{\varepsilon}}{2} = \sqrt{\varepsilon}\,.$$

Tento výsledek se shoduje s výsledkem uvedeným výše.

Lada Peksová
`lada@fykos.cz`