

(モース・ポテンシャル (Morse potential) における安定なつりあい点の周りの微小振動)Morse-potential-qa080716.tex

x 軸上を運動する粒子 (質量 m) に, ポテンシャル (Morse(モース)ポテンシャル)

$$U(x) = U_0 [e^{-2ax} - 2e^{-ax}], \quad (U_0 > 0, a > 0) \quad (1)$$

が働いている。(原子間相互作用のポテンシャルのモデルのひとつとして提案された。)

1. 横軸を x 軸、縦軸にポテンシャルの値 $U(x)$ をとり、このポテンシャルの概略を描け。
2. 力のつりあい点 (ポテンシャルの 1 次微分がゼロとなる点) を求めよ。
3. そのつりあい点は安定点かどうかを調べよ。
4. 安定点の場合には、その点の周りでポテンシャル関数を 2 次までのテーラー展開近似を行って、微小振動の角振動数を求めよ。(ヒント: 関数 $f(x)$ の点 $x = 0$ の周りにおけるテーラー展開とは $f(x) = f(0) + f'(0)x + f''(0)x^2/2 + \dots$ である。)

(解答例)

1. とりあえず、(適当な次元を無視して) 定数 $U_0 = 1, a = 1$ とおいてもよい。 $x \rightarrow -\infty$ の極限では、 e^{-2ax} 項が圧倒的に大きな寄与をするので、ポテンシャルの値は $U(x \rightarrow -\infty) \rightarrow +\infty$ となる。また $x = 0$ 点において、ポテンシャルの値は $U(0) = -2U_0 < 0$ となる。さらに、 $x \rightarrow +\infty$ の極限で、ポテンシャルの値は $U(x \rightarrow +\infty) \rightarrow 0$ となる。(マイナスの値から漸近的にゼロに近づく。) 有限の $+x$ の点で極値をもつことがわかる。

2.

$$\begin{aligned} \frac{dU}{dx} &= -2a U_0 e^{-2ax}(1 - e^{ax}) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

より、 $x = 0$ で関数は極値となる。

3.

$$\begin{aligned} \frac{d^2U}{dx^2} &= 2a^2 U_0 e^{-2ax}(2 - e^{ax}) \\ \rightarrow \frac{d^2U}{dx^2}|_{x=0} &= 2a^2 U_0 > 0. \end{aligned} \quad (3)$$

ゆえに、2 階微分が正で、下に凸のポテンシャルであるから、 $x = 0$ は安定なつりあい点である。

4. 題意より

$$\begin{aligned} U(x) &\approx U(0) + U'(0)x + \frac{1}{2!}U''(0)x^2 \\ &= -U_0 + \frac{1}{2}(2a^2U_0)x^2 \end{aligned} \quad (4)$$

となる。(保存)力 $F(x)$ は

$$F(x) = -\frac{dU}{dx} = -(2a^2U_0)x \quad (5)$$

となり、変位に比例する復元力(フックの力)となることが分かる。

したがって、バネ定数 $k = 2a^2U_0$ のバネのポテンシャルに相当し、その際の微小振動の角速度 $\omega = a\sqrt{2U_0/m}$ となり、周期 T は

$$\begin{aligned} T &= 2\pi/\omega \\ &= \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2m}{U_0}}. \end{aligned} \quad (6)$$