

Таблица 1. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия

Вид потенциала	Область применимости	Комбинационные правила для взаимодействия молекул разного сорта	Наименование потенциала
1	2	3	4
$\varphi = \infty$ $\varphi = 0$	$r < \sigma$ $\sigma < r < \infty$		Жесткая сфера (рис.1.2,а)
$\varphi = \epsilon r^{-\alpha}$	$0 \leq r \leq \infty$		Точечный центр отталкивания (рис.1.2,б)
$\varphi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$	$0 \leq r \leq \sigma$	$\epsilon_{12} = \sqrt{\epsilon_{11}\epsilon_{22}}$ $\sigma_{12} = \frac{1}{2}(\sigma_{11} + \sigma_{22})$	Потенциал(12-6) Леннарда-Джонса (рис.1.2,е)
$\varphi = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + \delta \left(\frac{\sigma}{r}\right)^3 \right]$	$0 \leq r \leq \infty$	$\epsilon_{12} = \sqrt{\epsilon_{11}\epsilon_{22}}; \sigma_{12} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2}$ $\delta = \sqrt{\delta_{11}\delta_{22}}$	Потенциал (12-6-3)
$\varphi = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + q^* \left(\frac{\sigma}{r}\right)^5 \right]$	$0 \leq r \leq \infty$	$\epsilon_{12} = \sqrt{\epsilon_{11}\epsilon_{22}}; \sigma_{12} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2}$ $q_{12}^* = \sqrt{q_{11}^* q_{12}^*}$	Потенциал (12-6-5)
$\varphi = \infty$ $\varphi = -\epsilon(\sigma/r)^6$	$r < \sigma$ $\sigma < r < \infty$		Модель Сазерленда (рис.1.2,д)

Продолжение табл.1.

Вид потенциала	Область применимости	Комбинационные правила для взаимодействия молекул разного сорта	Наименование потенциала
$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] - \frac{\mu^2}{r^3} q(v_1, v_2, \Phi);$ $q = 2\cos v_1 \cdot \cos v_2 - \sin v_1 \cdot \sin v_2 \cdot \cos \Phi$	$0 \leq r \leq \infty$		Потенциал Штокмайера
$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] - \frac{\alpha_1 \mu_2^2}{r^6}$ $\varphi = \varepsilon e^{-\lambda r}$	$0 \leq r \leq \infty$	$\sigma'_{12} = \sigma_{12} \left(1 + \frac{\alpha_1 \mu_2^2}{4\varepsilon_{12} \sigma_{12}^6} \right)^{-1/6} =$ $= \frac{1}{2} (\sigma_{11} + \sigma_{22}) \xi;$ $\varepsilon'_{12} = \sqrt{\varepsilon_{11} \varepsilon_{22}} \xi;$ $\xi = 1 + \frac{\alpha_1}{4\sigma_{11}^3} \cdot \frac{\mu_2^2}{\varepsilon_{22} \sigma_{22}^3} \sqrt{\frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}}}$	Потенциал взаимодействия полярной и неполярной молекул Рис.1.2,в
$\varphi = \varepsilon \left[e^{-2C \frac{r-r_m}{\sigma}} - 2e^{-C \frac{r-r_m}{\sigma}} \right]$	$0 \leq r \leq \infty$	$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_{11} \varepsilon_{22}}; C_{12} = \frac{C_{11} + C_{22}}{2};$ $\sigma_{12} = 2C_{12} \left(\frac{C_{11}}{\sigma_{11}} + \frac{C_{22}}{\sigma_{22}} \right)^{-1};$ $r_{m12} = \sigma_{12} (1 + \ln 2 / C_{12})$	Потенциал Морзе

Продолжение табл. 1.

Вид потенциала	Область применимости	Комбинационные правила для взаимодействия молекул разного сорта	Наименование потенциала
$\varphi = \frac{\varepsilon}{1 - \frac{6}{\alpha}} \cdot \left\{ \frac{6}{\alpha} e^{\alpha(1 - \frac{r}{r_m}) - (\frac{r_m}{r})^6} \right\}$	$r \geq r_{\max}$		Модифицированный потенциал (6- <i>exp</i>) Букингема
$\varphi = \infty$ $\varphi = \infty$ $\varphi = -\varepsilon$ $\varphi = 0$	$r \leq r_{\max}$ $r < \sigma$ $\sigma < r < \alpha\sigma$ $r > \alpha\sigma$		Прямоугольная потенциальная яма рис.1.2,г
$\varphi = A\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^m - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n \right]$	$0 \leq r \leq \infty$	$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_{11}\varepsilon_{22}};$ $\sigma_{12} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2}$	Потенциал (<i>m-n</i>)