



冶金熔体结构和性质的 计算机模拟计算

谢 刚 阎江峰 李荣兴 张皓东 编著

冶金工业出版社



冶金熔体结构和性质的 计算机模拟计算

谢 刚 阎江峰 编著
李荣兴 张皓东

北 京
冶 金 工 业 出 版 社
2006

内 容 提 要

本书共有 8 章, 主要内容包括绪论、计算机模拟原理和方法、碱金属硅酸盐熔体结构研究、钙硅酸盐和钙铝硅酸盐熔体结构的 MD 计算、硼酸盐熔体结构的 MD 计算和拉曼光谱、冰晶石—氧化铝体系熔融盐结构的分子动力学计算、碳酸盐和亚硝酸盐的拉曼光谱研究以及稀土金属卤化物熔体结构的 MD 计算。本书适合从事冶金熔体结构和性质的计算机模拟研究人员及科研院所高校相关专业人员阅读参考。

图书在版编目(CIP)数据

冶金熔体结构和性质的计算机模拟计算/谢刚等编著.

—北京: 冶金工业出版社, 2006. 3

ISBN 7-5024-3906-4

I. 冶… II. 谢… III. 计算机应用—熔融金属—
计算 IV. TF02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 160558 号

出版人 曹胜利 (北京沙滩嵩祝院北巷 39 号, 邮编 100009)

责任编辑 杨盈园 美术编辑 李 心

责任校对 卿文春 李文彦 责任印制 牛晓波

北京百善印刷厂印刷; 冶金工业出版社发行; 各地新华书店经销

2006 年 3 月第 1 版, 2006 年 3 月第 1 次印刷

850mm×1168mm 1/32; 6.5 印张; 173 千字; 200 页; 1—2000 册

20.00 元

冶金工业出版社发行部 电话:(010)64044283 传真:(010)64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街 46 号(100711) 电话:(010)65289081

(本社图书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

前 言

冶金熔体是研究冶金过程中熔盐、熔铈、熔渣和金属溶液等四大熔体的性质、结构及其相互关系；建立高温溶液模型，进行熔体参数计算，是冶金过程，特别是火法冶金过程的理论基础。冶金熔体结构和性质理论指导了冶金生产实践，而冶金生产的发展又促进了冶金熔体结构和性质基础理论研究的深化。

熔体结构和性质的早期研究是根据熔体的热力学性质进行计算和热力学分析得到的。如 20 世纪 50 年代 X 射线结构研究、70 年代中子衍射和拉曼 (Raman) 光谱结构研究以及近年来采用激光、核磁共振进行结构和性质的研究。这些研究为冶金熔体结构和性质提供了有效的研究手段。但是冶金熔体的实验研究存在温度高、腐蚀严重、谱分析不易等困难，因此，冶金熔体理论仍然不成熟。

近年来，随着计算机技术的日益发展和推广普及，计算机模拟计算技术越来越得到广泛应用，在实验条件或实验技术上存在困难的情况下，计算机模拟方法往往是最为有效的方法。正如国家自然科学基金委员会编写的“自然科学学科发展战略调研报告（冶金与矿业科学）”中指出：“冶金四大熔体，较成熟的应采用计算机模拟其结构，使理论与实验相结合；对相对较弱的应用近代技术如激光、核技术等探讨其结构……”。目前，计算机模拟已成为化学和分子物理学、材料科学中的主要研究方法之一，在某些情况下成为理论和实验结果分析

的重要手段。在冶金高温熔体的研究中,由于高温实验的困难和熔体理论的不成熟,计算机模拟计算更成为一种重要的研究方法。

本书是我们多年来从事冶金熔体结构和性质的计算机模拟研究成果的集成和总结,主要对一些常见硅酸盐冶金熔体,典型的冰晶石—氧化铝熔融盐以及稀土化合物熔体的结构和性质进行研究所得到的研究成果展示给有兴趣的读者。由于冶金熔体种类繁多、复杂多变,本书只涉及其中的一小部分,如能给读者提供一些有益的参考,就达到编写本书的目的了。

本书的第1、2章由谢刚编写,第3章第3节和第5、7章由阎江峰编写,第3章第1、2、4节和第4、6章由李荣兴编写,第8章由张皓东编写,由谢刚最终统稿。马文会副教授、研究生侯怀宇、崔衡、刘国华、陈书荣参加了书中有关内容的研究工作。本书所涉及的研究内容得到了国家自然科学基金“冰晶石熔体结构与阳极过程”、“熔体局部结构和高温X衍射研究”、“冶金熔体结构的计算机模拟及实验研究”以及云南省自然科学基金“计算冶金基础理论及应用研究”的资助。本书的研究内容和成书过程中得到东北大学邱竹贤院士、上海大学陈念贻教授和昆明理工大学杨显万教授的指导和支持,在此一并表示感谢。

由于作者水平所限,书中有不足之处,敬请读者批评指正。

作者
2005年11月

目 录

1 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 冶金熔体计算机模拟研究的发展	3
2 计算机模拟原理和方法	7
2.1 引言	7
2.2 离子间势	8
2.3 边界条件	12
2.4 Monte Carlo (MC) 模拟计算方法	13
2.5 分子动力学 (MD) 模拟计算方法	17
2.6 热力学性质和结构的计算结果分析	28
2.7 高温拉曼光谱	32
3 碱金属硅酸盐熔体结构研究	43
3.1 引言	43
3.2 $(\text{Na}_2\text{O})_x \cdot (\text{SiO}_2)_{1-x}$ 熔体结构的分子 动力学计算	44
3.3 $\text{Na}_2\text{Si}_2\text{O}_3\text{-CaF}_2$ 熔体 MD 计算及拉曼光谱	53
3.4 $\text{K}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$ 和 $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2$ 熔体结构 的 MD 计算	61
4 钙硅酸盐和钙铝硅酸盐熔体结构的 MD 计算	73
4.1 $(\text{CaO})_x \cdot (\text{SiO}_2)_{1-x}$ 熔体结构的模拟计算	73
4.2 $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ 熔体结构的 MD 计算	84
5 硼酸盐熔体结构的 MD 计算和拉曼光谱	103
5.1 引言	103
5.2 偏硼酸锂和二硼酸锂熔体结构的拉曼 光谱和 MD 计算	106

6 冰晶石—氧化铝体系熔融盐结构的分子动力学计算	122
6.1 引言	122
6.2 熔融 $(\text{NaF})_x \cdot (\text{AlF}_3)_{1-x}$ 体系的 MD 计算	123
6.3 氧化铝的冰晶石—氧化铝混合熔体的结构计算	130
7 碳酸盐和亚硝酸盐的拉曼光谱研究	135
7.1 固体和熔融碱金属碳酸盐的拉曼光谱研究	135
7.2 固体和熔融亚硝酸钠的 Raman 光谱研究	140
8 稀土金属卤化物熔体结构的 MD 计算	144
8.1 单一稀土氯化物熔体结构的 MD 计算	144
8.2 KCl-LaCl_3 熔体结构的 MD 计算	154
8.3 $\text{RECl}_3\text{-KCl-NaCl}$ 系熔体结构的 MD 计算	163
8.4 $\text{LaF}_3\text{-LiF}$ 熔体结构的 MD 模拟计算	184
参考文献	197

1 绪 论

1.1 引言

冶金学发展到今天,生产的规模不断扩大,所涉及的体系越来越多,越来越复杂,因而越来越需要用一般的理论来解释和预言体系的行为,于是基础理论的研究也越来越重要,在各种冶金过程涉及的体系中,冶金工作者最为关心的是液相性质。但不幸的是我们目前对液体,尤其是冶金高温熔体的知识还相当缺乏,甚至没有成熟的处理方法,这是一个有待解决的问题。

冶金技术的产生和发展可追溯到整个人类文明的发端时期,但建立起较为系统的理论和研究方法,并自觉地用理论来指导生产实践,则是在第二次工业革命以后的事。那时物理学和化学的知识体系已经建立和完善起来,从而产生了冶金物理化学这一学科。近百年来,冶金学理论从来都是伴随着物理学和化学的发展而发展的。

当前,经历了从宏观定性研究到微观定量研究这一重大变革的化学学科,已经发展到从分子运动和分子间相互作用出发,来研究物质宏观性质的程度。分子热力学是这一发展过程中的重要产物之一,它把经典热力学和统计力学结合起来,可以有效地解决许多经典热力学难以解决的问题。目前在化工过程的研究中,分子热力学的研究方法已经得到自觉的应用,但它还很少应用于对冶金高温熔体的研究中。冶金工作者应当尽量地将这些新的成果和方法应用于自己的研究领域中,并在应用中继续发展已有的理论成果。

分子热力学可称为“应用统计热力学”,它是用统计热力学的原理和方法建立起来的一种研究复杂体系的分子理论。研究宏观化学现象有两种方法,一种是宏观热力学的方法,以经典热力学

的三大定律为基础，其结论是从对宏观行为的直接观测归纳出来的，并有着高度的可靠性和普适性。但热力学本身并不能对它的结论提供更为本质的解释。另一种是统计力学的方法，它是由研究组成系统的微观结构单元的行为出发的，把宏观行为作为微观结构单元的行为的统计平均，其起点是粒子间的相互作用。我们知道，宏观化学现象中涉及大量粒子的排列和运动，其典型的数量级为 10^{23} 。然而，由这样的大量粒子组成的系统，其宏观行为并不是微观行为的简单求和，而是带有统计性质的。相对于宏观热力学方法，统计力学方法给出了体系的宏观行为的微观解释，对于认识和阐明体系的宏观性质的起因，以及预测某一体系的行为，无疑起着重要的作用。

关于液体结构的研究，一般有两种方法：一种是先提出一个简化的物理结构模型，再由统计力学得出配分函数等，得到对于宏观性质的表达方式；另一种是不明确提出结构模型，而是从分子间力和统计力学出发，建立起径向分布函数，由径向分布函数探讨其结构和平衡性质。对于冶金熔体这种复杂体系来说，提出一个简单而精致、适用面广的物理模型是相当困难的。因此分子热力学中的径向分布函数理论可能是研究熔体结构和性质的有效途径。

近年来，随着计算机技术的日益发展和推广普及，一种使用计算机模拟物系的微观结构和运动并在此基础上用数值运算统计求和的研究方法正在兴起和广泛应用，这就是计算机模拟计算技术，主要包括分子动力学（molecular dynamics, MD）方法和蒙特卡罗（Monte Carlo, MC）方法。自 20 世纪 50 年代以来，已用计算机模拟计算方法研究过液体和溶液、液晶、晶态和非晶态固体的结构和性质，界面和表面的结构和性质，体系中的混合过程、输运过程和化学反应过程等许多课题，并在许多方面和实验结果及宏观理论研究结果取得了相当一致的结论，同时还修正了一些传统方法的结果。计算机模拟计算方法也被称作“计算机实验”，它具有极大的灵活性，除了可以模拟真实流体的行为，还

可以计算实际上不存在的“模型流体”的行为，从而有效地考察体系的微观结构和粒子间作用形式对体系宏观性质的影响，借以抽提新概念和提出有关现象的新理论，并对新实验方法的设计起到极大的作用，因此，它是纯理论研究和真实实验研究之间的一道桥梁。此外，在实验条件或实验技术上存在困难的情况下，计算机模拟方法往往是最为有效的方法。目前，研究计算机模拟已成为化学和分子物理学、材料科学中的主要研究方法之一，在某些情况下成为理论和实验结果的验证手段。在熔体的研究中，由于高温实验的困难和液体理论的不成熟，计算机模拟计算更成为一种重要的研究方法。

从研究体系的微观结构单元的行为出发研究体系宏观性质的实验方法主要是光谱分析方法，包括 X 射线衍射、中子散射、核磁共振技术和红外光谱及拉曼光谱技术。这些方法以往主要是应用于固体和低温溶液（如水溶液、有机溶液）的结构和成分的分析，现在随着高温实验技术的进步，已越来越多地应用于高温熔体的研究。其中，X 射线衍射和中子散射方法能获得液体的结构系数和径向分布函数等结构信息，从中可以得到粒子配位数等其他信息，而核磁共振、红外光谱和拉曼光谱是根据分子振动情况得到液体分子的构型。由实验得到的有关结构信息出发，理论上可以推算体系的热力学性质；同时，从分子理论和实验原理出发，也可以预测某些实验结果。这样，理论推导和实验研究相结合，可以达到相互验证，相互补充和相互促进与完善的目的。

1.2 冶金熔体计算机模拟研究的发展

计算机模拟方法用于冶金熔体的计算是从碱金属卤化物之类的简单离子熔体开始的，碱金属卤化物熔体是最简单的离子熔体，对它们的模拟工作开始得较早，研究报道甚多，Sangster 和 Dixon, Kawamura 和 Okada, Rovere 和 Tosi 分别在 1976 年，1978 年和 1986 年分别很好地评述了此类物质结构的计算机模拟计算工作，目前，人们对这一类离子熔体的离子间势和计算结果

都已有了较为统一的认识。在卤化物熔盐的研究领域中,当前主要的工作集中在稀土金属和其他过渡金属的卤化物结构上。

相比之下,氧化物体系由于其结构和分子内化学键和性质都比较复杂,在理论上相应难处理一些,模拟条件也要求高些,因而模拟工作开展得较晚。然而由于认识氧化物体系(包括晶态和非晶态固体与熔体)的结构和性质对冶金学、材料科学和地质学研究都有着极为重要的意义,目前,随着实验技术的进步和计算机性能的提高,对这类体系的研究已逐渐成为一个热点。在冶金学中,一般把氧化物体系(包括金属氧化物、硅酸盐等)称作渣系,并且为关联和预测体系的性质而建立起相当丰富的热力学模型,包括冶金学家们熟知的各种组成模型,以及一些结构相关模型等。然而这些理论都或多或少地建立在经验或半经验的基础之上,不少地方缺乏明确的物理意义,并且多采用使用宏观性质数据推测结构的方法,因而使用这些模型难以从根本上解释体系的宏观性质。近年来“计算冶金”学科逐渐兴起,其内容之一就是由研究冶金体系的微观结构出发,进而推演体系宏观性质。体系微观结构的研究便成为重要的基础工作。在这一工作中,量子化学从头计算、高温 X 射线衍射、中子散射、核磁共振、红外及拉曼光谱等实验技术以及计算机模拟计算是不可缺少的有力工具。

从现有资料来看,对于氧化物、硅酸盐、硼酸盐之类体系结构的研究,从实验结果和计算机模拟工作两方面都已取得了不小的进展,在本书中,作者将在已有势函数的基础上,进一步讨论国内外对此类体系开展 MD 模拟工作的情况,并结合各种已有的实验结果,主要是针对熔体结构进行讨论。

对于氧化物体系的 MD 模拟,目前存在的一个问题是势函数形式和参数的选择问题。伍德柯克(Woodcock)等人 1976 年的工作表明,硅酸盐等体系的势函数也可由离子型势函数来描述,实际上这一工作成为氧化物类体系 MD 模拟的开拓性工作,此后针对此类体系的模拟计算中,多采用离子型势函数,即把渣

类体系看作完全离子溶液。如柯费 (Kiffer) 和安杰尔 (Angell) 在 1989 年发表的论文中, 使用 BMH 型离子间势, 较好地描述了一系列硅酸盐体系熔体的结构和性质, 在此前和此后总共大约 20 年的时间内, 不同作者发表了不少类似的工作。最近的研究工作中, 为进一步准确得出有关性质的结果, 出现了较为复杂的两体势形式以及三体甚至四体势形式, 但简单离子型两体间势的使用仍是主流。BMH 之类的简单两体势模型对于体系的结构和扩散系数、黏度等性质的计算结果与相应实验结果相比一般有较好的吻合, 使人感到此类势函数还是比较适用的。尤其是对于熔体的计算, 在探讨结构问题时, 此类势函数更有着形式简单, 近似性良好的优点, 所以本工作主要使用 BMH 之类的离子型有效两体势计算熔体结构。

在硅酸盐熔体中, 基本的结构单元是硅氧四面体, 这一点已形成共识。如 Waseda 等人 1977 年发表的高温 X 射线衍射结果表明, 对碱金属硅酸盐熔体, 金属氧化物的参与对二氧化硅中的硅氧四面体结构单元的影响并不大, 但影响四面体的分布, 且熔体的 X 射线结果与相应玻璃态近似, 但玻璃态与熔体的拉曼光谱之间存在着峰的形状和位置的差别, 这由福库米 (Fukumi) 等人和伊古奇 (Iguchi) 等人的工作得到证实。因此, 对于熔体结构的探讨, 一般都参照流行的玻璃的无规网络理论, 由径向分布函数来阐述熔体中各粒子之间的配位形式。研究工作表明, 硅酸盐晶体、玻璃、熔体中硅—氧距离均在 0.16nm 左右, 硅与氧的配位数是 4, 而氧多与一或两个硅配位 (熔体中随温度升高, 还将有一些游离的氧离子存在); 同时, 体系内硅氧四面体形成三维网络结构, 而网络往往是不连续的, 其间存在一些空洞, 也就是说, 四面体内的氧有些是非桥氧 (只与一个硅原子配位)。这样, 硅氧四面体之间的连接形式, 即硅氧阴离子的分布问题就成为探讨结构变化中的重心问题。按照化学键理论, 在硅酸盐中, 硅和氧成键时, 硅原子的 sp^3 杂化轨道将与氧原子的一个 2p 轨道发生重叠而形成 σ 键, 同时硅原子空着的 3d 轨道也可与

氧原子的另一个 2p 轨道发生重叠而形成 π 键，由于 σ 键有最大的电子云重叠，它应是 Si—O 键的主要部分，因此硅氧的结合成四面体形式且结构稳定，O—Si—O 键角应在 109° 左右，而 Si—O—Si 键角则大约应在 140° 左右，而实际上的检测结果也正是如此。而键角和键长的波动极有可能是不同种类的金属离子在不同温度下对于 Si—O 间 π 键的影响造成的。对于硅氧四面体之间的连接形式，各有各的说法，在不同的计算之间，不同的实验之间，以及在计算和实验之间都颇有不一致之处。

2 计算机模拟原理和方法

2.1 引言

计算化学对实验观察的解释可分为三类：现象的（宏观的）；分子水平的和电子水平的，每类解释都同多元体的动力学问题相联系。任何物理化学现象的进一步研究都是涉及元素粒子，也就是说核和电子。最早开始模拟电子水平的计算是对核和电子解薛定谔（Schrödinger）波动方程的近似解，它仅能获得两个粒子体系的精确解，如对氦原子。但对多电子体系，只能作出定性的结果，且这些结果的精确性取决于体系的复杂性。随着计算机能力的增强，一些数值计算如量子化学从头计算可越来越精确地预测某些分子参数，且可用于含有大量电子的体系。在这种情况下计算的分子性质包括分子内能、极化动量、极化率以及两个或多个分子的分子间势。一旦某些分子参数已知，要计算溶液宏观性质如热力学函数或迁移系数等，必须应用表达分子参数和宏观性质关系的统计机理。

冶金熔体化学和技术大部分内容都是讨论宏观物理化学现象及其应用，宏观现象涉及大量分子（ $10^{23} \sim 10^{25}$ 个分子）的排列和运动。随着人们对物质微观结构的日益了解加深，不断从统计角度探讨宏观化学现象的基本规律。经典物理化学包括化学热力学、化学动力学和电化学，而现代化学已从量子力学和统计力学基础上研究宏观物理化学现象的微观基础和本质。化学统计力学的解析理论已取得了很大的进展。但由于许多常见的物理化学问题极其复杂，如粒子数目庞大、粒子种类繁多、复杂的粒子形式和内部运动形式以及复杂的粒子间相互作用等，因此，解析的化学统计力学往往只能计算和研究简化了的理想体系，如理想气体、理想溶液、完整晶体等，而对许多常见的物理化学体系却无

法作出定量的计算，甚至无法作严格的定性讨论。在大多数情况下，人们一般用理想体系的模型加上某些近似的假设来研究复杂的实际问题，但由于所用的假设根据不足或其本身的概念模糊，这样提出的理论或获得的结果即使与某些实验结果一致，也难免带有半经验性质。近年来随着大型电子计算机的推广应用，一种新的化学统计力学方法正在迅速发展，这就是用于研究物质体系的微观结构和热力学性质的计算机模拟技术。它包括一系列的模拟方法如蒙特卡洛法、布朗动力学法、分子动力学法，如图 2-1 所示。这一系列方法并不要求作某些概念方面的近似，只需输入一组粒子的质量和粒子间势，就可精确地计算其宏观性质。因此，宏观物理化学性质的计算机模拟计算可以看作粒子相互作用的数学模型的“实验”。

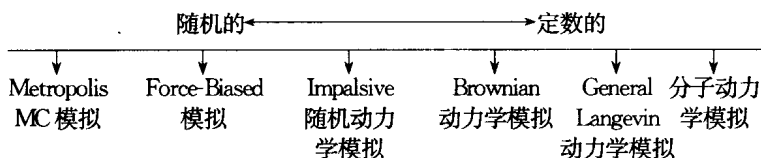


图 2-1 各种模拟方法的相对定数度

计算机模拟技术研究熔融盐的结构是对个别离子在离子熔体的静电场的瞬时运动能力和离子之间最邻近和次邻近的相互作用的计算，用统计方法获得某些热力学和动力学量。

2.2 离子间势

计算机模拟计算第一步也是最重要的工作是选取一个适合于体系计算的粒子间势 $U(r^N)$ 函数形式。理想气体分子间不存在相互作用，高温下的稀薄气体基本上只存在两体相互作用，固体、液体、熔融盐以及浓稠气体等许多分子相离子体系，粒子间的作用范围并不比粒子间的距离小，此时三体以上的相互作用是不能忽略的，体系的总势能可表示为

$$\begin{aligned}
 U &= \frac{1}{2!} \sum_{i \neq j} \sum u_{ij} + \frac{1}{3!} \sum_{i \neq j \neq k} \sum \sum u_{ijk} + L + \frac{1}{n!} \sum_{i \neq j \neq L \neq n} \sum L \sum u_{ijLn} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum \left[u_{ij} + \frac{2}{3!} \sum_k u_{ijk} + L + \frac{2}{n!} \sum_k L \sum_n u_{ijLn} \right] \quad (2-1)
 \end{aligned}$$

式中, u_{ij} ——两体相互作用, 通常称为粒子对 i 、 j 的对势;

u_{ijk} ——三体相互作用;

$u_{ij \dots n}$ —— n 体相互作用, 求和理解为角标除外。

在非极限的情况下, 三体以上的相互作用与两体相互作用相比总是很微弱的。因此, 式 2-1 可写为

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum u_{ij}^{eff} \quad (2-2)$$

$$u_{ij}^{eff} = u_{ij} \left[1 + \frac{2}{3!} \sum_k (u_{ijk}/u_{ij}) + L + \frac{2}{n!} \sum_k L \sum_n (u_{ijLn}/u_{ij}) \right]$$

u_{ij}^{eff} 是有效对势, 其物理意义是两粒子 i 、 j 运动在其他粒子占有平均位置时所产生的势场中的有效相互作用势能, 这个平均势场可用自洽场方法精确导出, 也可由简单物理模型近似得出。

采用两体有效势能近似后, 体系总势能可表示为粒子对有效对势之和, 这将使模拟计算大为简化。对简单的熔盐溶液, 作出一些基本假设如动力学可经典处理。粒子是球形的, 且具有化学惰性, 任意两个粒子间的力仅取决于它们间的距离, 在这种情况下, 总势能 U 是两个相互作用粒子势能的和。电中性原子的 $V(r)$ 形式也可导出, 即根据量子力学计算的第一原理推导, 但这样的计算非常复杂。

$$U = V(r_{12}) + V(r_{13}) + L + V(r_{23}) + L = \sum_{i < j=1}^N V(r_{ij}) \quad (2-3)$$

对冶金熔体离子体系, $V(r)$ 最重要的特征是在 r 减小时的强烈排斥, 而 r 增大时存在弱的吸引。在 r 小时的排斥是不相容原理的结果, 也就是说, 如果两个原子的电子云相重叠时,

一些电子必须获得动能以占据不同的量子状态，净的影响是电子间的排斥，即所谓的核心排斥。而当粒子间距离增大时，离子通过电荷的库仑作用力进行相互吸引。此外，每个离子在另一个离子的静电场中的极化作用也产生了一些吸引力，这种吸引力称为范德华（Van der Waals）力。不过除了在距离非常小的情况下，与库仑吸引力和排斥力比较起来，这种极化的作用力是可以忽略不计的。在计算机模拟技术中常采用以下几种势能形式。

2.2.1 林纳德—琼斯（Lennard-Jones）势

$$U_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{r}{\sigma} \right)^{-12} - \left(\frac{r}{\sigma} \right)^{-6} \right] \quad (2-4)$$

式中 ϵ 、 σ ——分别为林纳德—琼斯（Lennard-Jones）距离和能量参数；

r ——粒子间距离。

在图 2-2 中给出的是林纳德—琼斯势最常见的形式。不同离子之间的势仅由其电荷来区别。

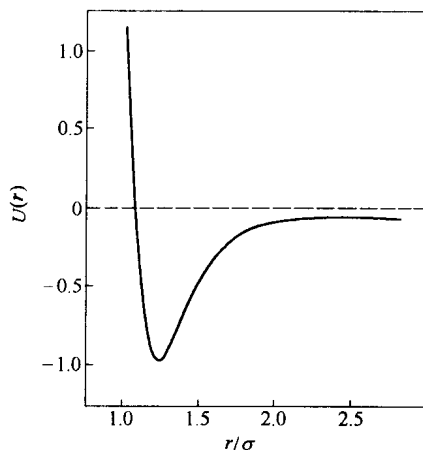


图 2-2 林纳德—琼斯势