

# 目錄

中文摘要 .....	i
英文摘要 .....	ii
誌謝.....	iii
目錄 .....	iv
圖目錄 .....	v
表目錄 .....	viii
第一章、緒論 .....	1
第二章、理論 .....	3
作用位能的模型 .....	3
粒子徑向分佈函數 .....	5
壓力(P)和 Compression factor(Z) .....	5
Voronoi polyhedron .....	6
第三章、方法---分子動力學模擬.....	9
分子動力模擬 .....	9
g(r)數值計算 .....	10
Voronoi 分析.....	10
第四章、結果與討論.....	12
粒子徑向分佈函數 .....	12
VP 體積分佈&fitting .....	13
VP 體積分佈的 Skewness .....	14
Lognormal distribution fitting & Log-rescale .....	17
參考文獻.....	19

## 圖目錄

圖一	Lennard-Jones 2n-n 粒子作用位能函數圖 .....	28
圖二	Truncated Lennard-Jones 2n-n 粒子作用位能函數圖 .....	29
圖三	鎂假位能函數圖.....	30
圖四	鋰假位能函數圖 .....	31
圖五	鈉假位能函數圖.....	32
圖六	鉛假位能函數圖.....	33
圖七	粒子徑向分佈函數 $g(r)$ 和 $r$ 的關係圖 .....	34
圖八	在晶體中規畫出的 Voronoi polyhedron.....	35
圖九	在二維無序系統中規畫出的 Voronoi polyhedron .....	36
圖十	LJ12-6 的粒子徑向分佈函數.....	37
圖十一	LJ12-6 fluid 和 TLJ12-6 fluid 的粒子徑向分佈函數.....	38
圖十二	LJ24-12 fluid 和 TLJ24-12 fluid 的粒子徑向分佈函數.....	39
圖十三	LJ36-18 fluid 和 TLJ36-18 fluid 的粒子徑向分佈函數.....	40
圖十四	Hard Sphere fluid 的粒子徑向分佈函數 .....	41
圖十五	鎂的粒子徑向分佈函數 .....	42
圖十六	鋰的粒子徑向分佈函數 .....	43
圖十七	鈉的粒子徑向分佈函數 .....	44
圖十八	鉛的粒子徑向分佈函數 .....	45
圖十九	LJ12-6 fluid 的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數.....	46
圖二十	LJ12-6 fluid 和 TLJ12-6 fluid 的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數 .....	47
圖二十一	LJ24-12 fluid 和 TLJ24-12 fluid 的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數 .....	48
圖二十二	LJ36-18 fluid 和 TLJ36-18 fluid 的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數	

.....	49
圖二十三 Hard Sphere fluid 的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數 .....	50
圖二十四 鎂的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數 .....	51
圖二十五 鋰的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數 .....	52
圖二十六 鉛的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數.....	53
圖二十七 鈉的 Voronoi polyhedron 體積分佈函數.....	54
圖二十八 LJ12-6 fluid 的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	55
圖二十九 LJ24-12 fluid 的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	56
圖三十 LJ36-18 fluid 的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	57
圖三十一 TLJ12-6 fluid 的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	58
圖三十二 TLJ24-12 fluid 的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	59
圖三十三 TLJ36-18 fluid 的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	60
圖三十四 Hard Sphere fluid 的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	61
圖三十五 鎂的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	62
圖三十六 鋰的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	63
圖三十七 鉛的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	64
圖三十八 鈉的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	65
圖三十九 所有的液體的 rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	66
圖四十 Voronoi 體積分佈的 skewness 與 compression factor 關係圖.....	67
圖四十一 rescaling LJ2n-n Voronoi 體積分佈與 rescaling TLJ2n-n Voronoi 體積分佈的相差.....	68
圖四十二 LJ12-6 fluid 的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting .....	69
圖四十三 LJ24-12 fluid 的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting.....	70
圖四十四 LJ36-18 fluid 的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting .....	71
圖四十五 TLJ12-6 fluid 的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting .....	72
圖四十六 TLJ24-12 fluid 的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting .....	73

圖四十七	TLJ36-18 fluid 的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting.....	74
圖四十八	Hard Sphere fluid 的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting.....	75
圖四十九	鎂的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting .....	76
圖五十	鋰的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting.....	77
圖五十一	鈉的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting.....	78
圖五十二	鉛的 Voronoi 體積分佈&lognormal fitting.....	79
圖五十三	所有的液體的 Log-rescaling Voronoi polyhedron 體積分佈.....	80



## 表目錄

表一	各液體系統分子動力模擬之相關參數.....	20
表二	近似各液體 VP 體積分佈的參數.....	22
表三	各液體系統的 compression factor 與 VP 體積分佈 的 skewness .....	24
表四	Log-normal 分佈近似各液體 VP 體積分佈的參數.....	26

