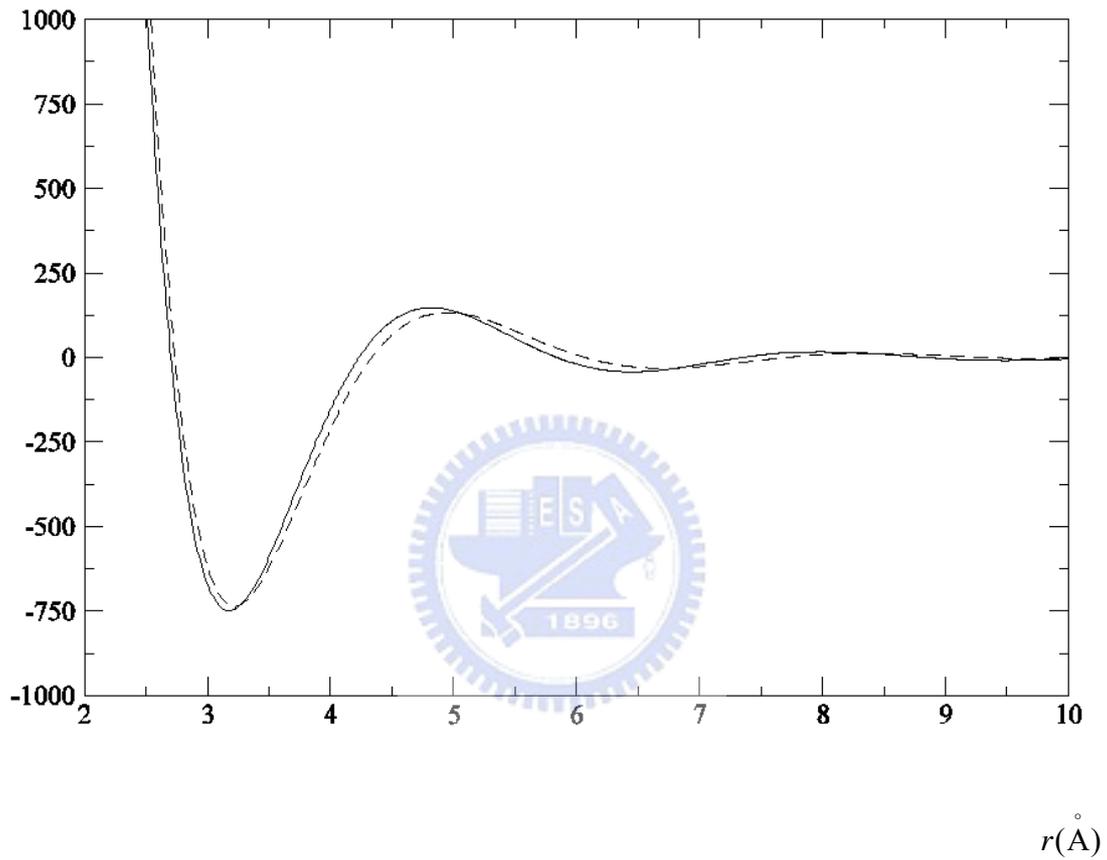
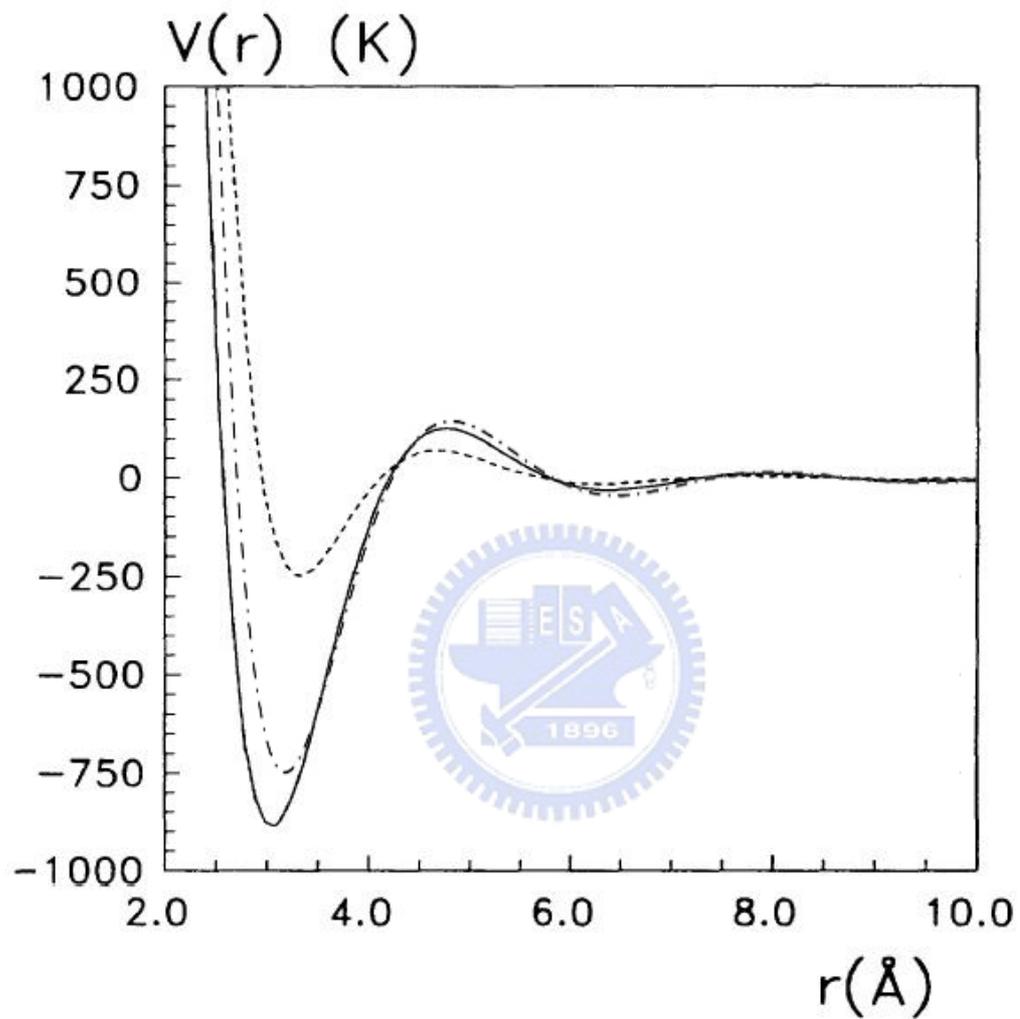


$V(r) (K)$



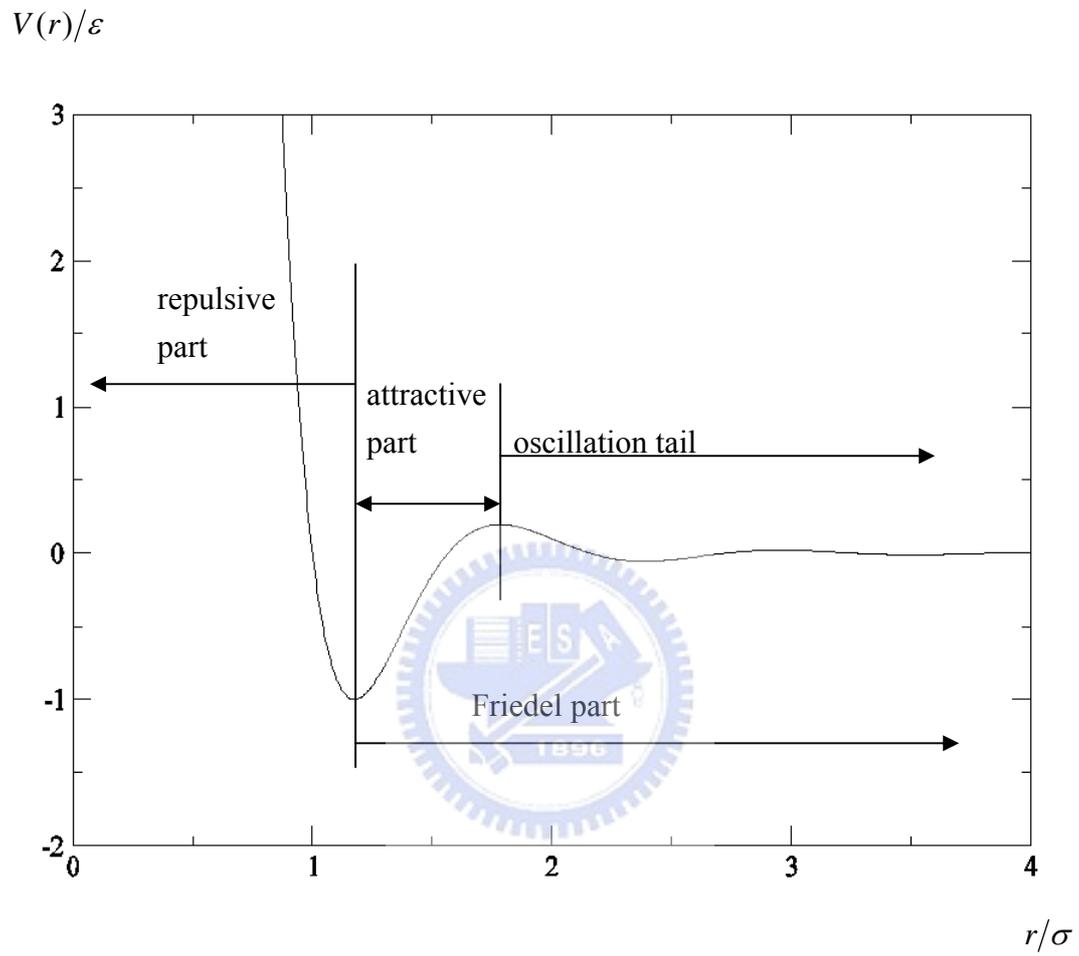
圖(一). 液態鋰在溫度 463 K 及 1073 K 下之假位能

實線為液態鋰在 463 K 下的假位能，虛線為 1073 K 下的假位能。



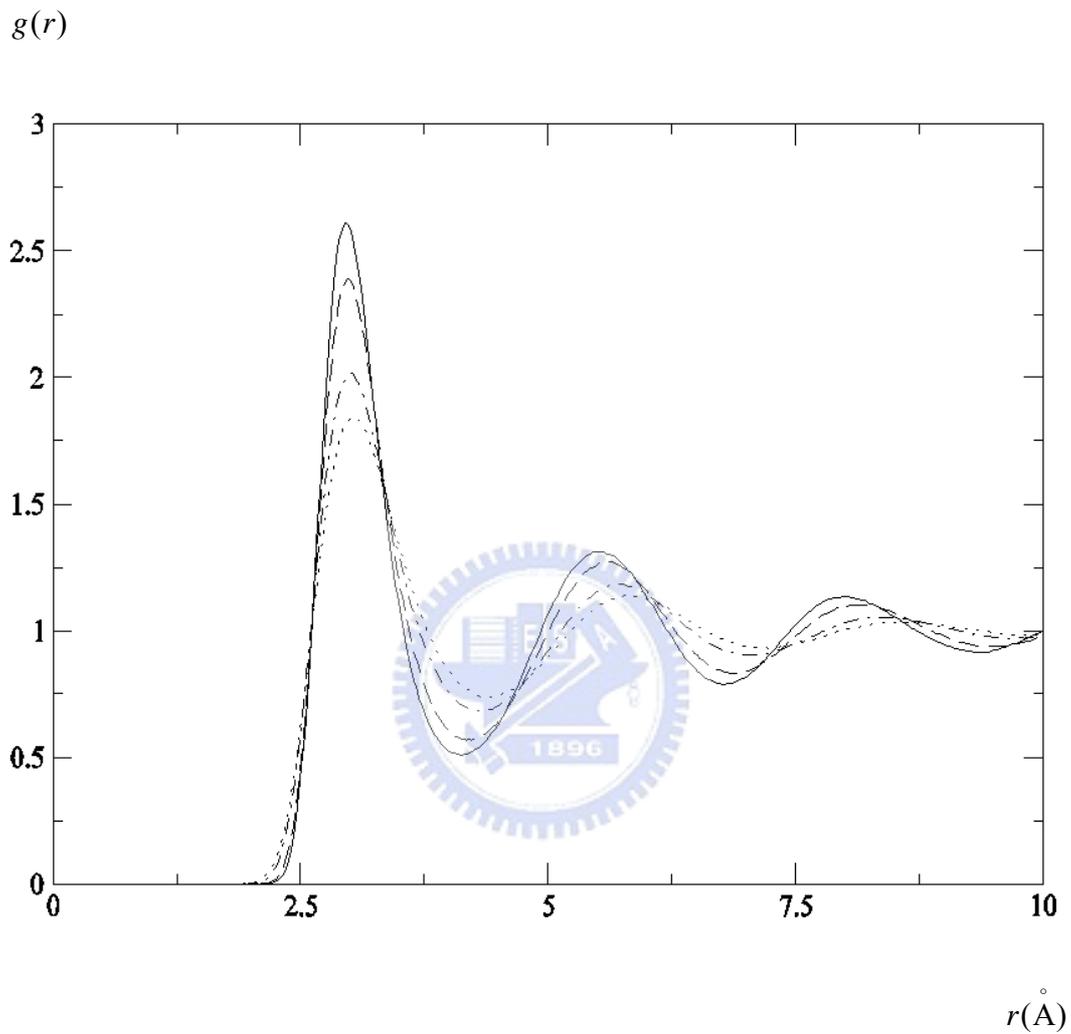
圖(二). 463 K 之假位能與參考文獻[11]中之假位能

(——)為溫度 470 K 下之 NPA 假位能，(---)則為 Ashcroft 假位能。(— · — ·)是本文在溫度 463 K 下所採用之 GEINMP 假位能。



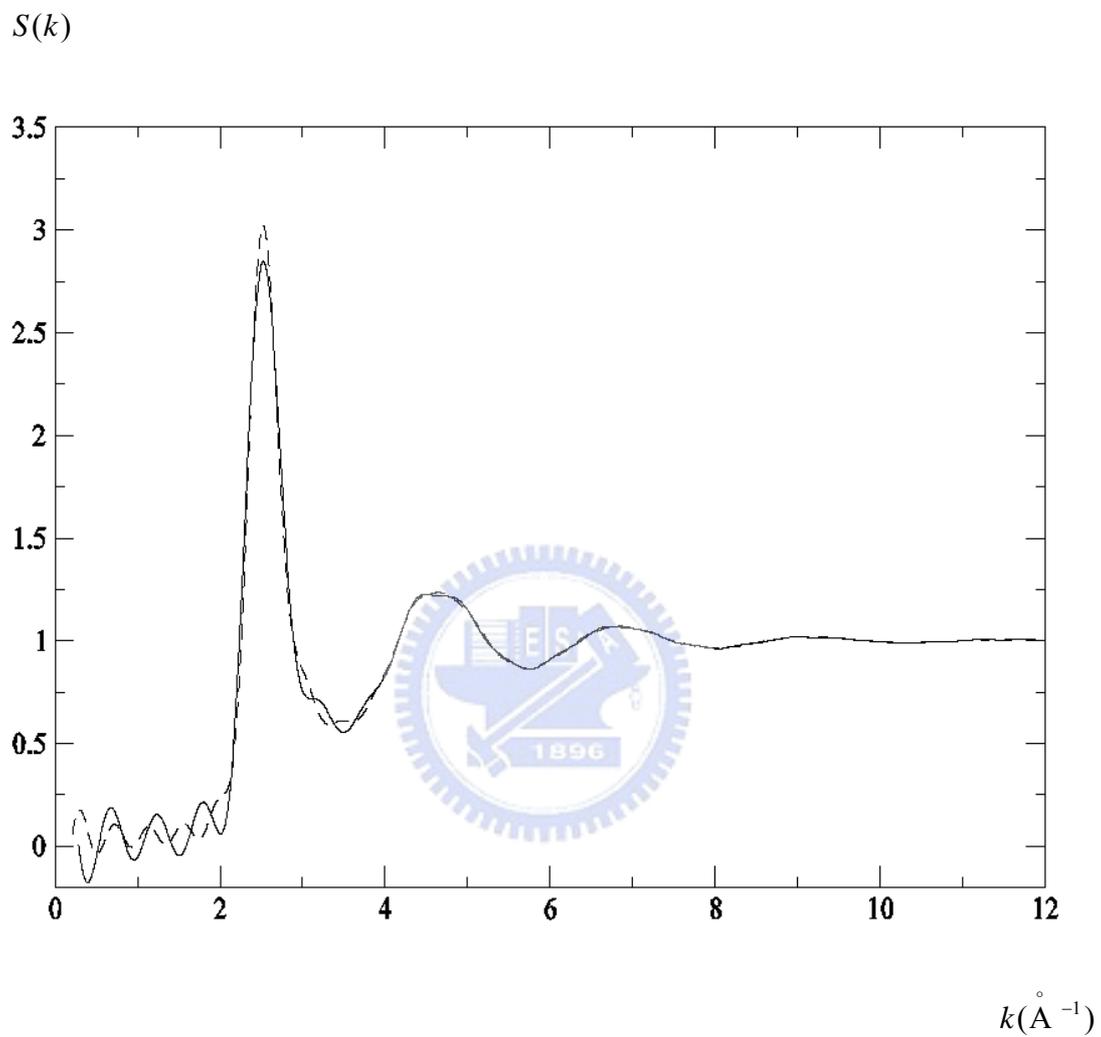
圖(三). 假位能的三個組成成分示意圖

圖中之橫軸與縱軸皆為化約單位。



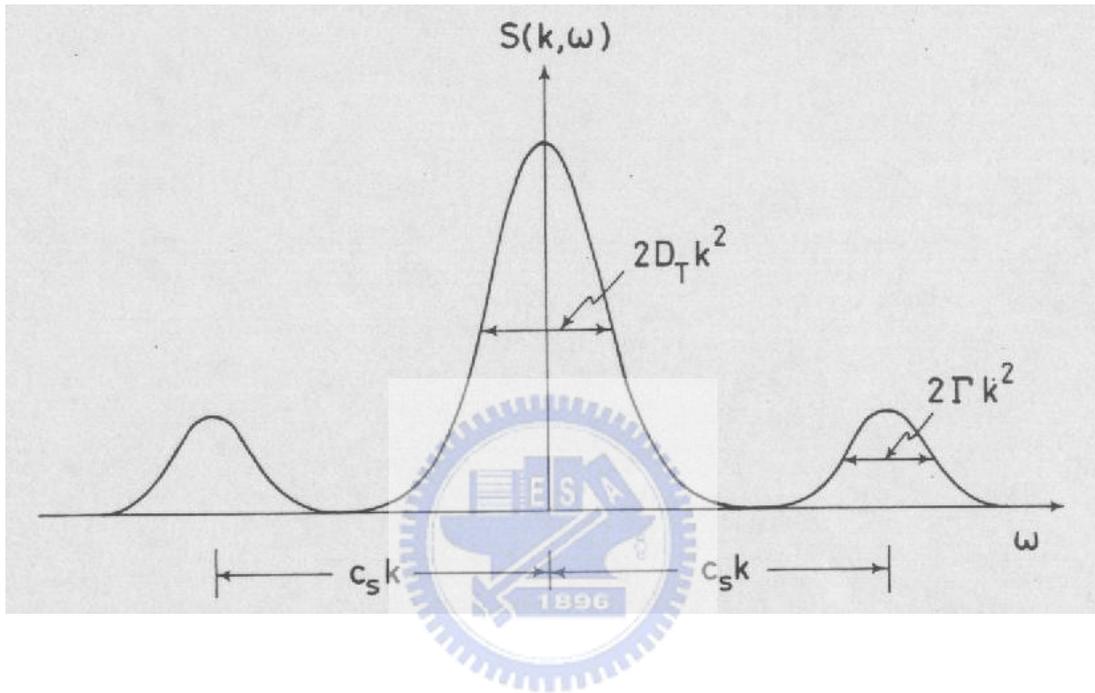
圖(四). 液態鋰在四個溫度下之徑向分佈函數

(——)是溫度 463 K 下，液態鋰之徑向分佈函數，(---) 是 573 K 下的徑向分佈函數，(-·-·)是 873 K 的徑向分佈函數，(·····)是 1073 K 的徑向分佈函數。



圖(五). 液態鋰在溫度 463 K 下之靜態結構因子

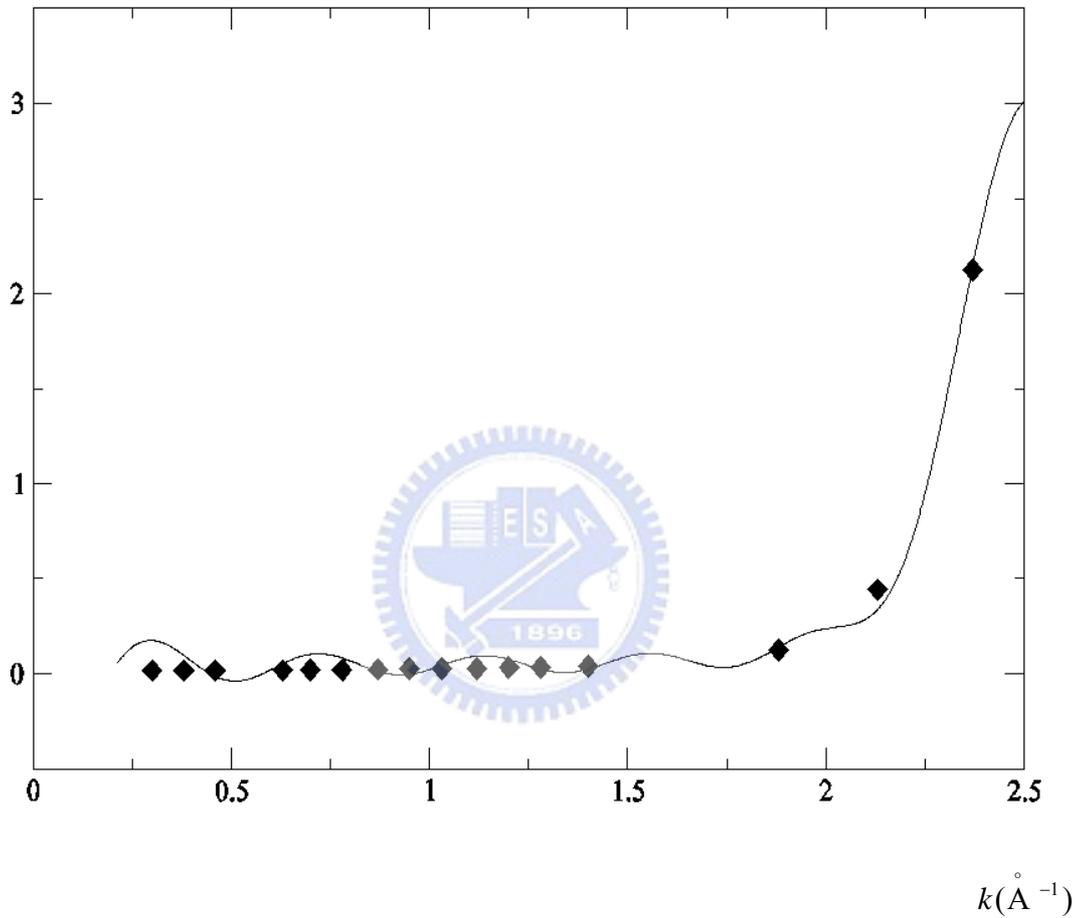
實線為 500 顆鋰原子之靜態結構因子，虛線則為 1214 顆鋰原子。



圖(六). 動態結構因子示意圖

中間的波峰為 Rayleigh 波峰，而左右成對的波峰則為 Brillouin 波峰。圖中亦展示著這三個波峰所對應寬度分別與熱擴散係數 D_T 以及聲音衰減係數 Γ 的關係。

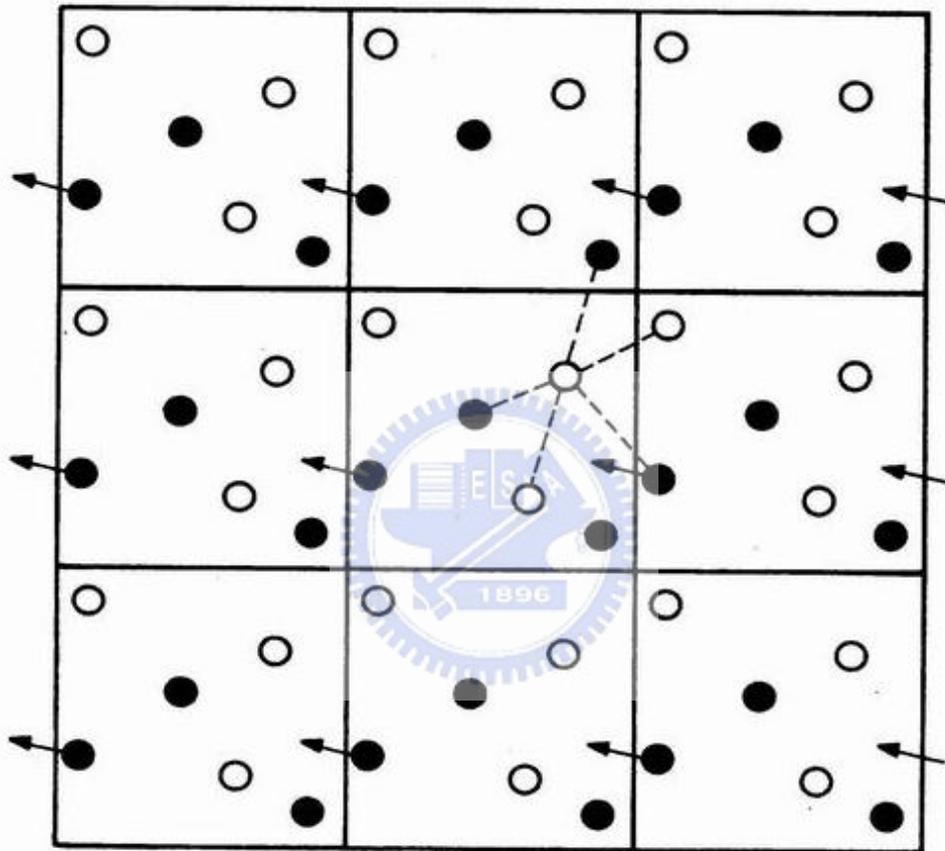
$S(k)$



圖(七). 463 K 下的靜態結構因子在低波向量區之比較

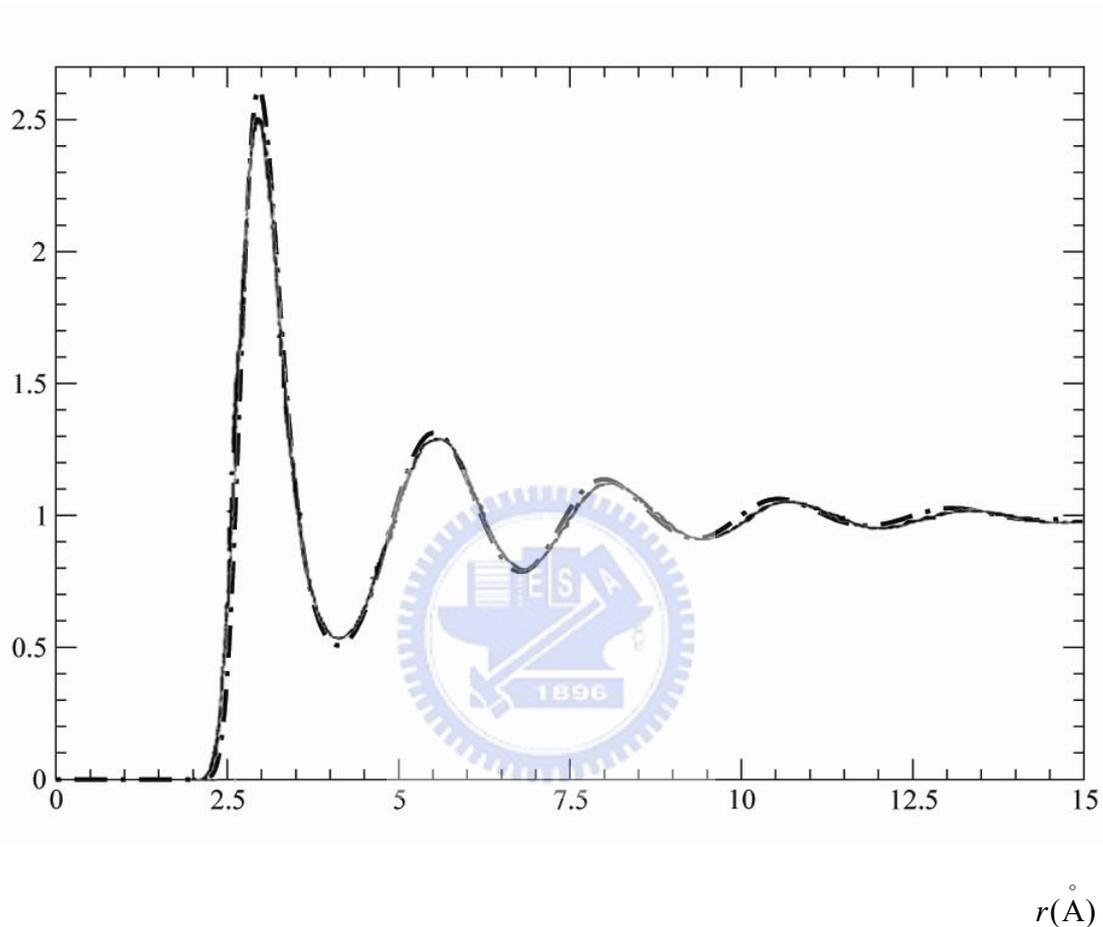
實線是直接將 1214 顆鋰原子的徑向分佈函數作傅氏轉換而得到的靜態結構因子。菱形的點，則是將我們模擬得到的 16 組動態結構因子，依據總和規則所計算得到的靜態結構因子。

METHODS OF COMPUTER SIMULATION



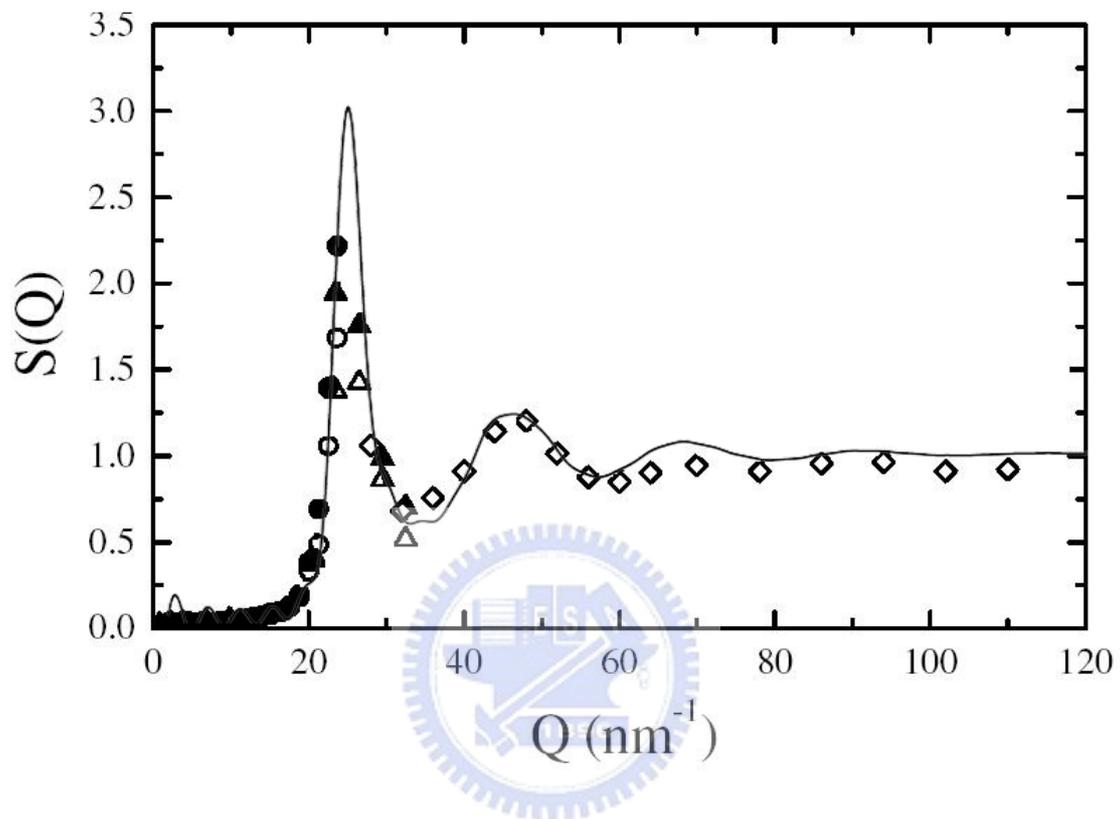
圖(八). 電腦模擬所採用的週期性邊界條件示意圖

$g(r)$



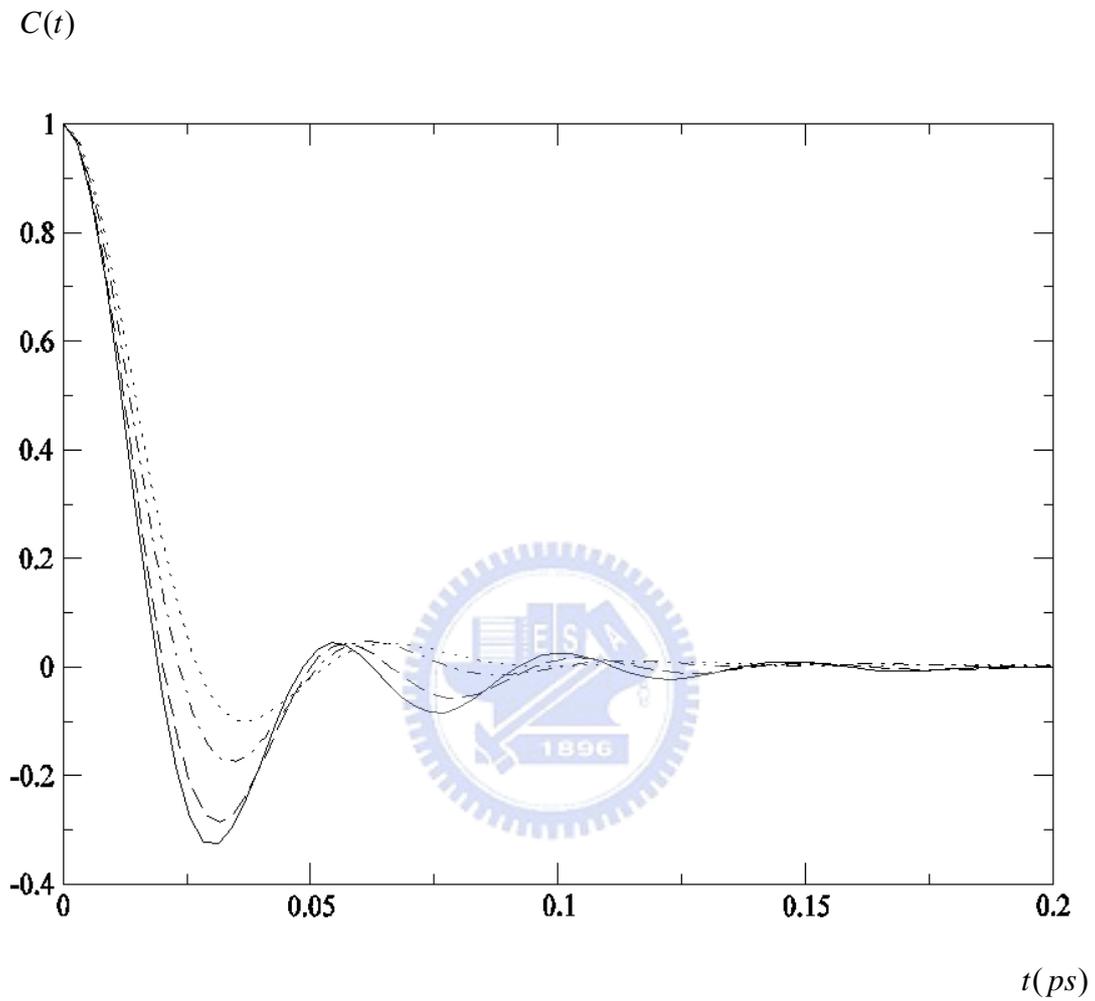
圖(九). 463 K 之徑向分佈函數與參考文獻[11]中之徑向分佈函數

(——)為溫度 470 K 下由 NPA 假位能所得之徑向分佈函數，(---)則為 Ashcroft 假位能所得之結果。(— · — ·)是本文在溫度 463 K、1214 顆鋰原子系統中所得之徑向分佈函數。NPA 與 Ashcroft 假位能所得之徑向分佈函數結果，是取自於參考文獻[11]。



圖(十). 463 K 之靜態結構因子與參考文獻[1]中之實驗結果

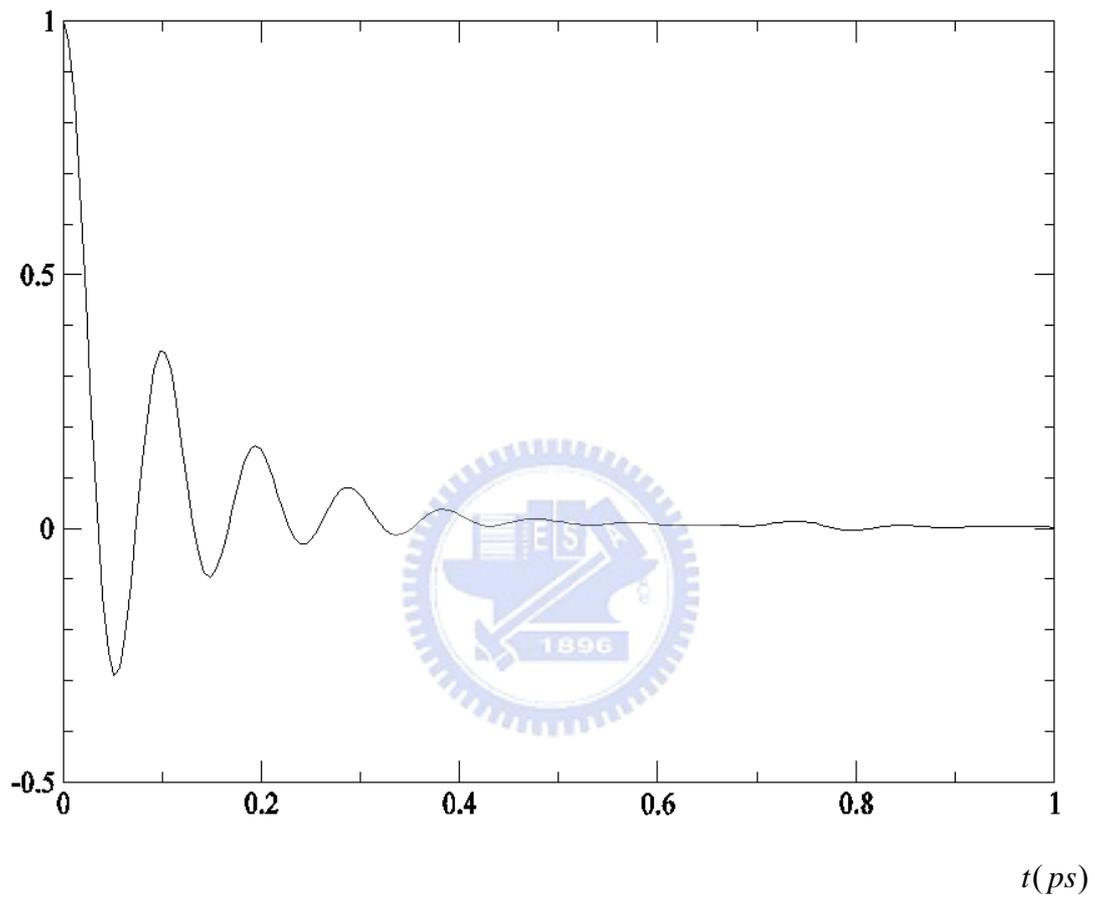
實線為溫度 463 K、1214 顆鋰原子系統中所得之靜態結構因子，其餘的菱形、實心、空心三角形、實心、空心圓形，皆為參考文獻[1]之實驗結果。



圖(十一). 液態鋰在四個溫度下之歸一化速度相干函數

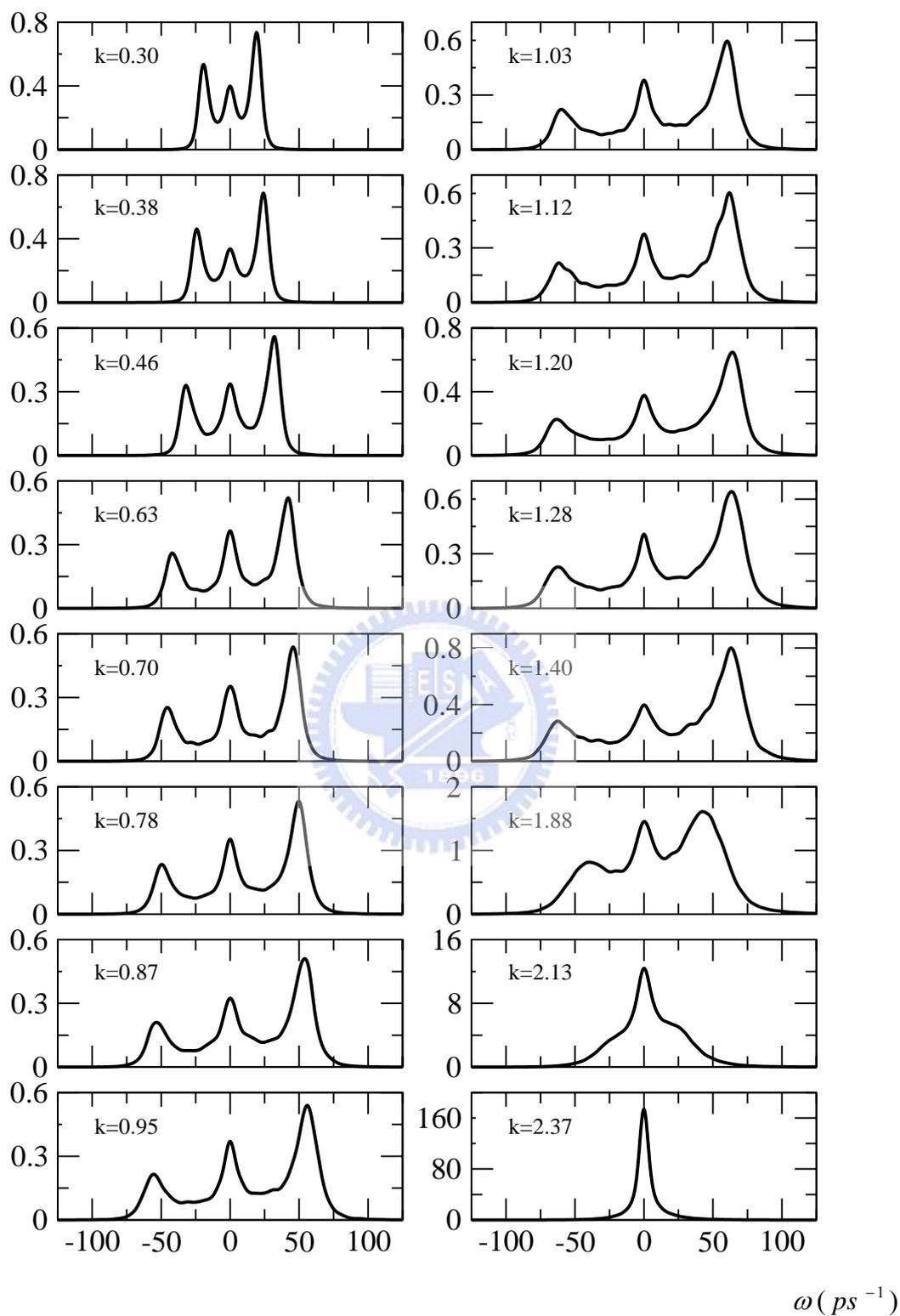
(——)是溫度 463 K 下，液態鋰之歸一化速度相干函數，(---) 是 573 K 下的歸一化速度相干函數，(- · - ·)是 873 K 的歸一化速度相干函數，(·····)是 1073 K 的歸一化速度相干函數。

$$F_N(k,t)$$



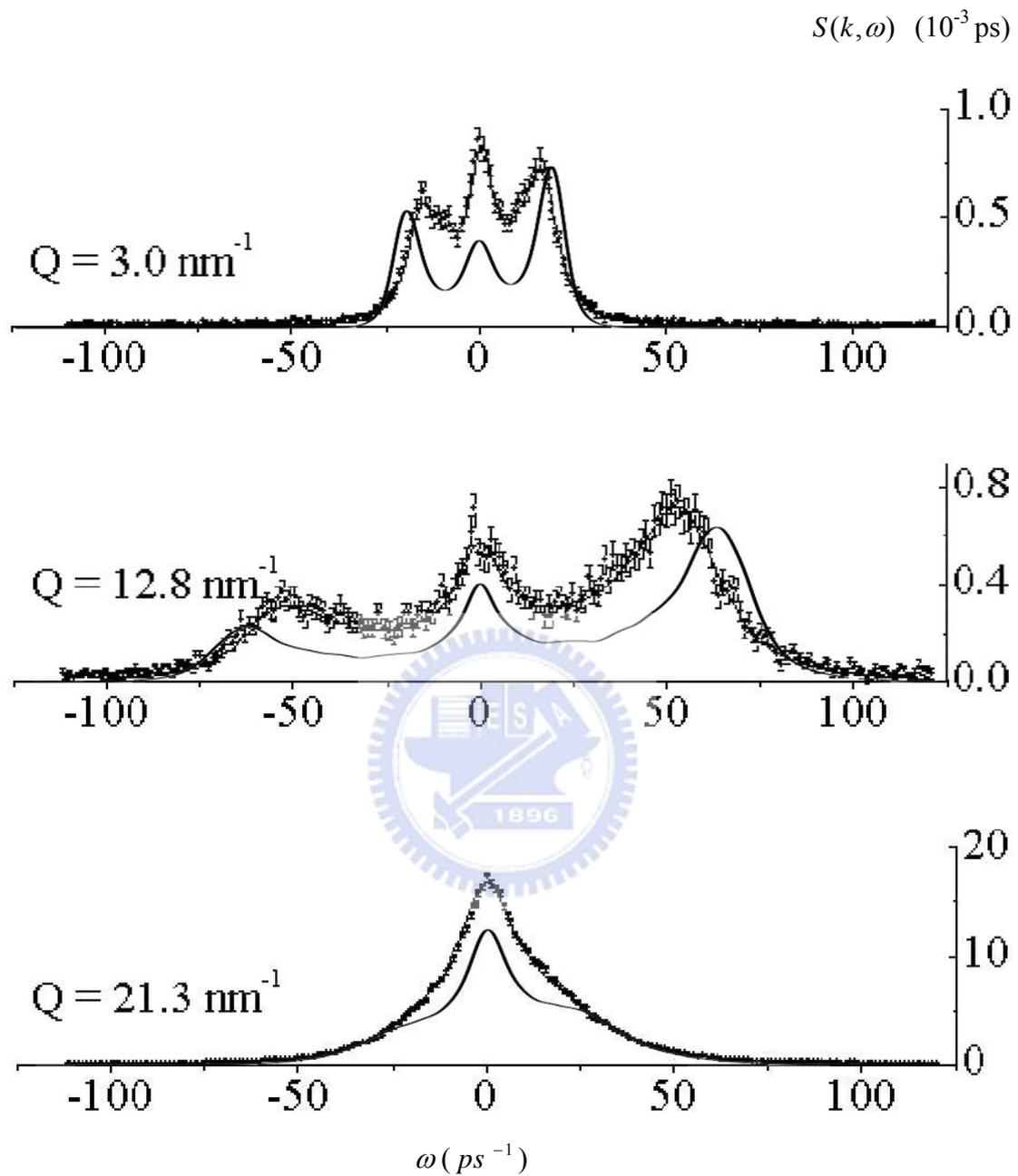
圖(十二). $k=1.2\text{\AA}^{-1}$ 之歸一化中間散射函數

$S(k, \omega)$ (10^{-3} ps)



圖(十三). 選取參考文獻[1]中之十六組波向量的動態結構因子計算結果

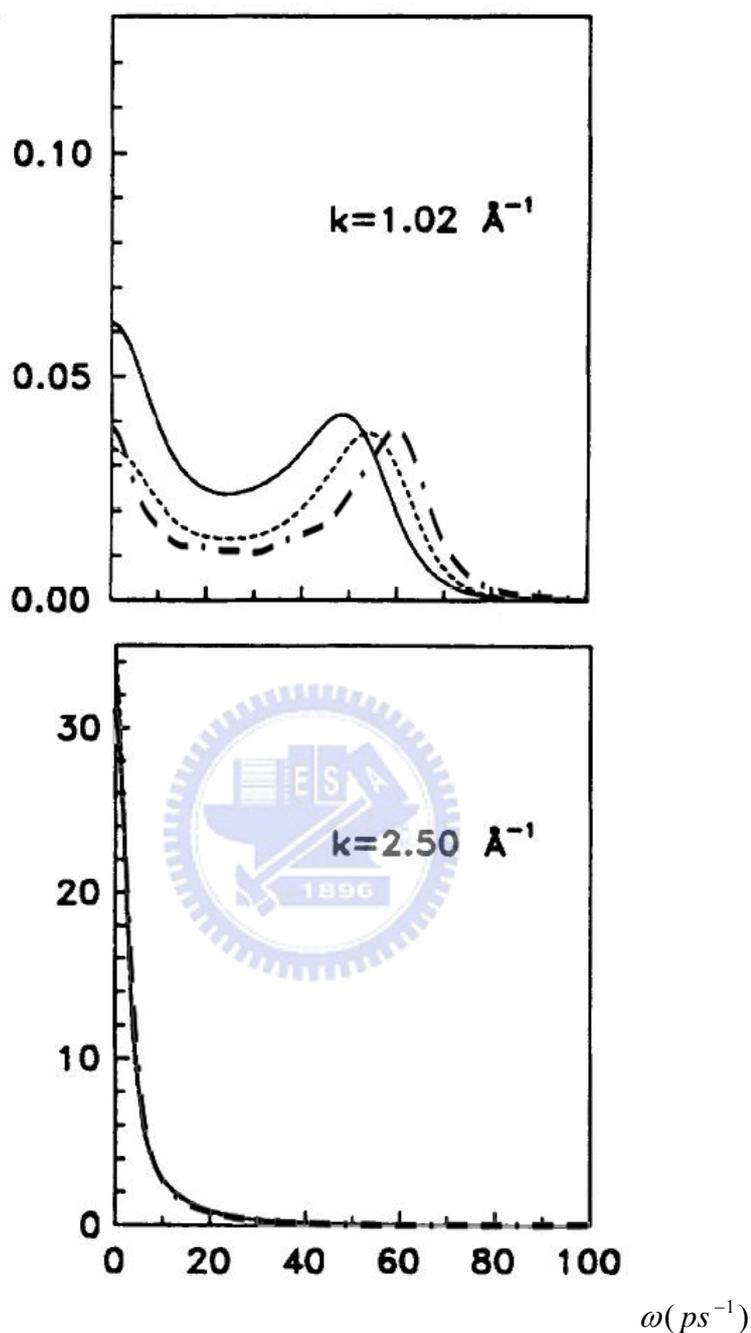
圖中之 k 值單位皆為 \AA^{-1} 。



圖(十四). 三組理論計算的動態結構因子與實驗結果[1]

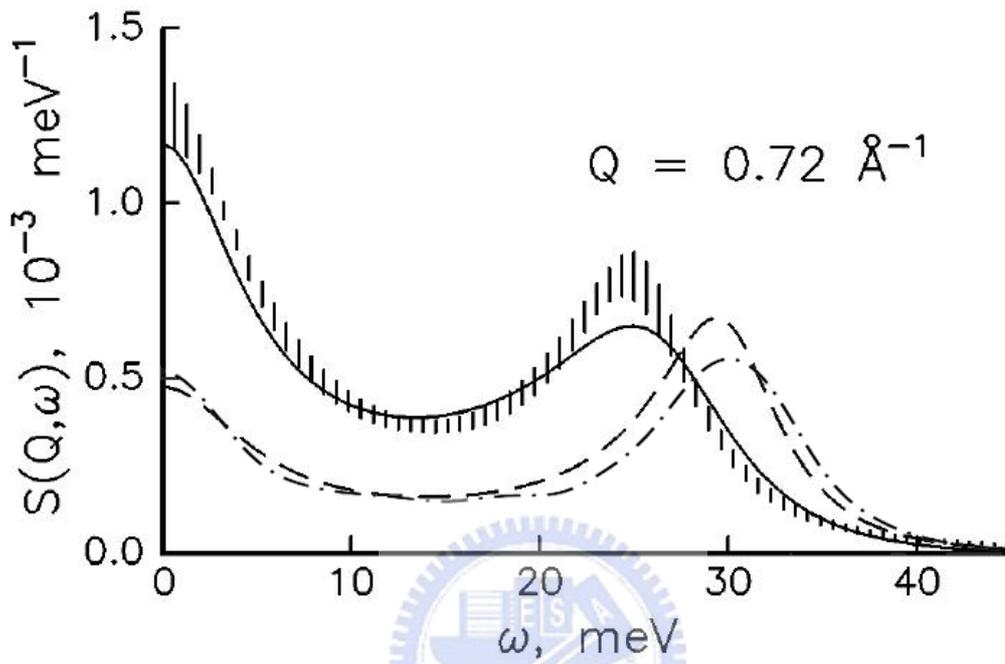
圖中實線為我們計算之結果，資料點則是參考文獻[1]之結果。

$S(k, \omega)$ (10^{-2} ps)



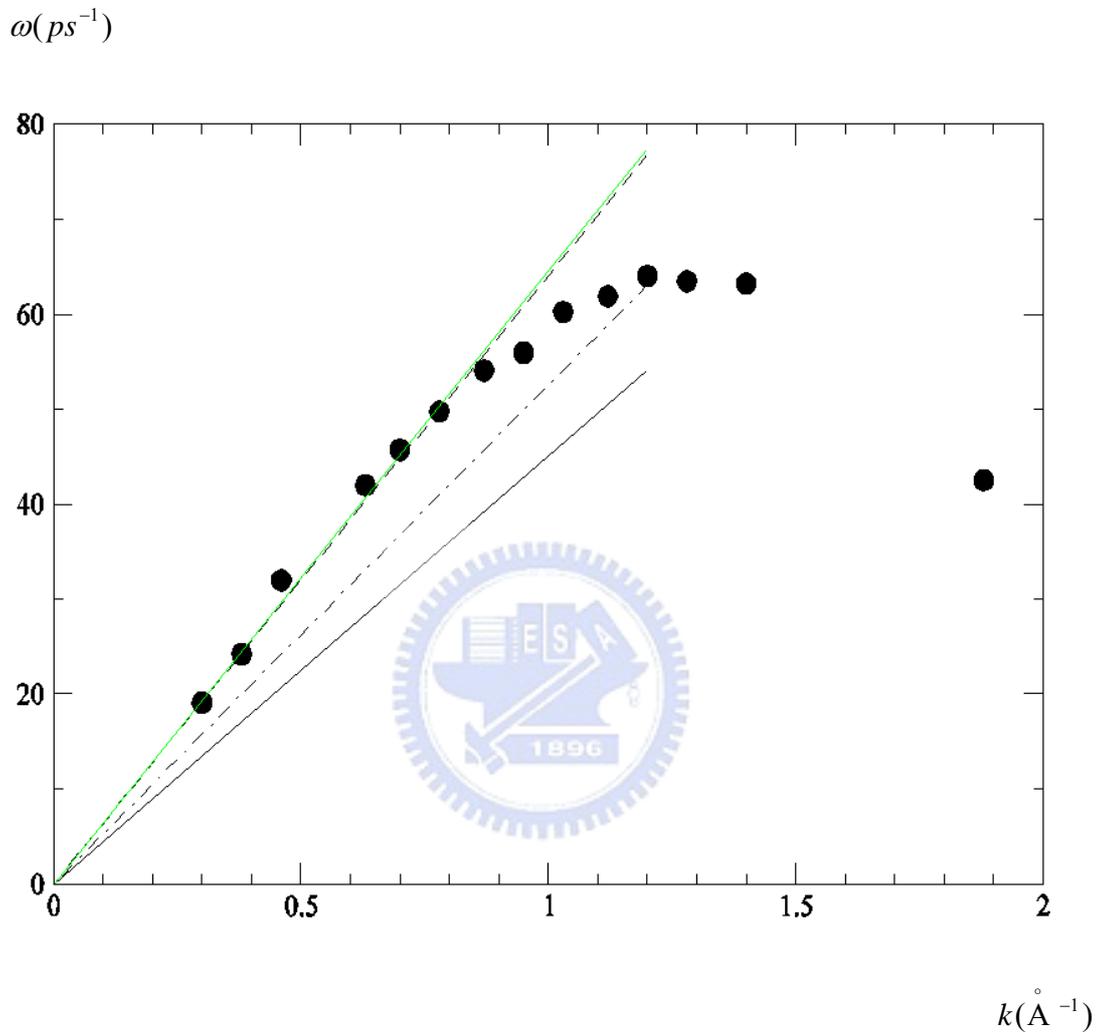
圖(十五). $k=1.02 \text{ \AA}^{-1}$ 與 2.5 \AA^{-1} 之動態結構因子與參考文獻[11]之結果

(——)為溫度 470 K 下由 NPA 假位能所得之動態結構因子，(---)則為 Ashcroft 假位能所得之結果。(·-·-·)是本文在溫度 463 K、1214 顆鋰原子系統中所得之動態結構因子。(——)與(---)的模擬結果皆取自於參考文獻[11]。



圖(十六). 動態結構因子的 IXS 實驗與模擬[19]以及我們計算結果

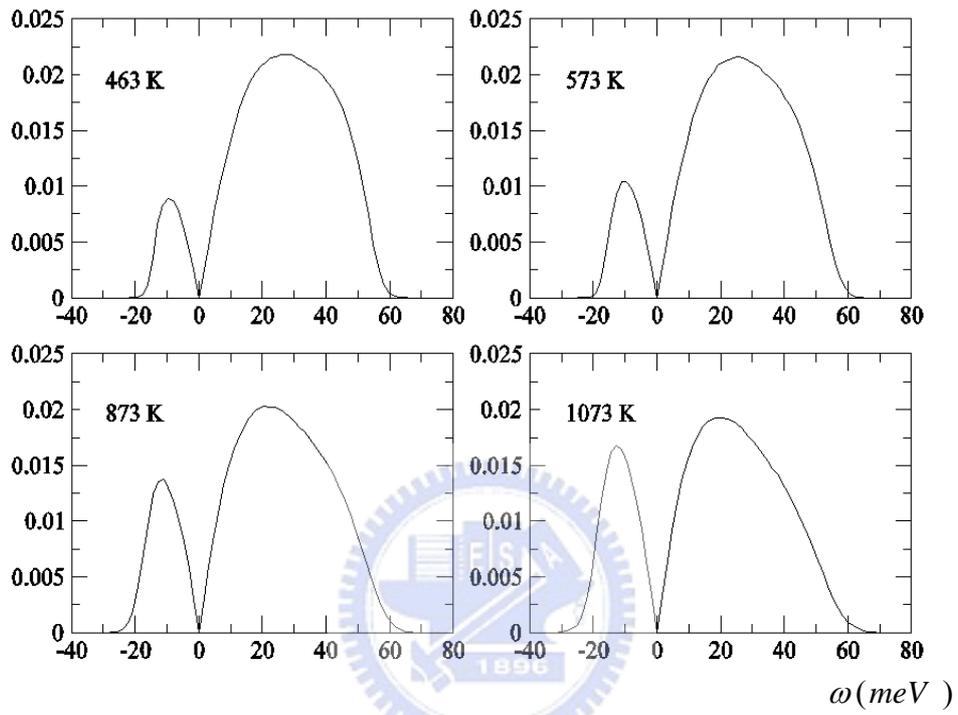
線條為 488 K 液態鋰的 IXS 實驗結果，(——)為溫度 488 K 下由 NPA 假位能所得之動態結構因子，(---)則為 Ashcroft 假位能所得之結果。(— · — ·)是本論文在溫度 463 K、1214 顆鋰原子系統中所得之動態結構因子。IXS 的實驗結果、(——)與(---)皆取自於參考文獻[19]。



圖(十七). 溫度 463 K 下之動態結構因子中的色散關係

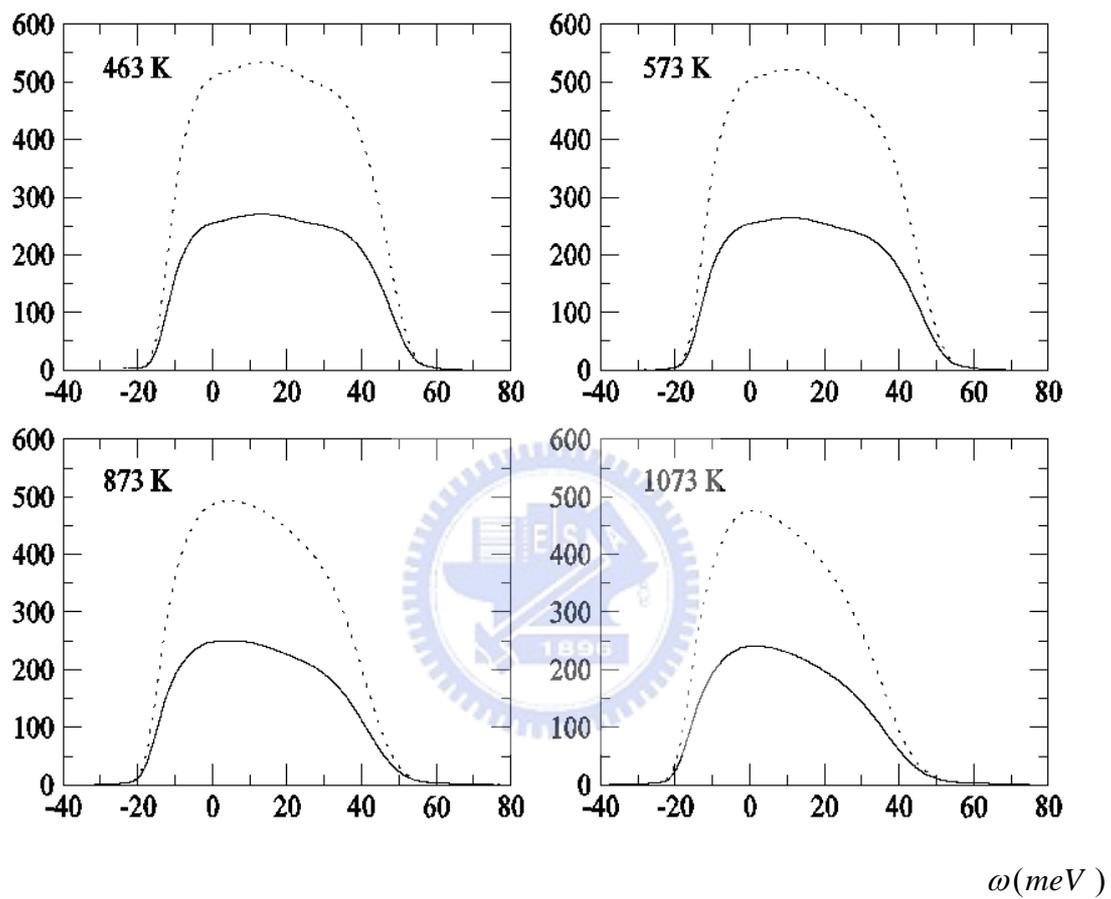
實心圓形為每組動態結構因子中所對應的 Brillouin 波峰位置，(——)是以實驗熱聲速 4500 ms^{-1} 為斜率的直線，(- · - ·) 是利用 NPA 假位能模擬結果中的熱聲速 5250 ms^{-1} 為斜率的直線，(- - -) 是利用 Ashcroft 假位能模擬結果中的熱聲速 6400 ms^{-1} 為斜率的直線，(——) 是我們模擬結果中的熱聲速 6448 ms^{-1} 為斜率的直線。

$D(\omega)$



圖(十八). 由 INM 分析所得到液態鋰在四個溫度下之態密度

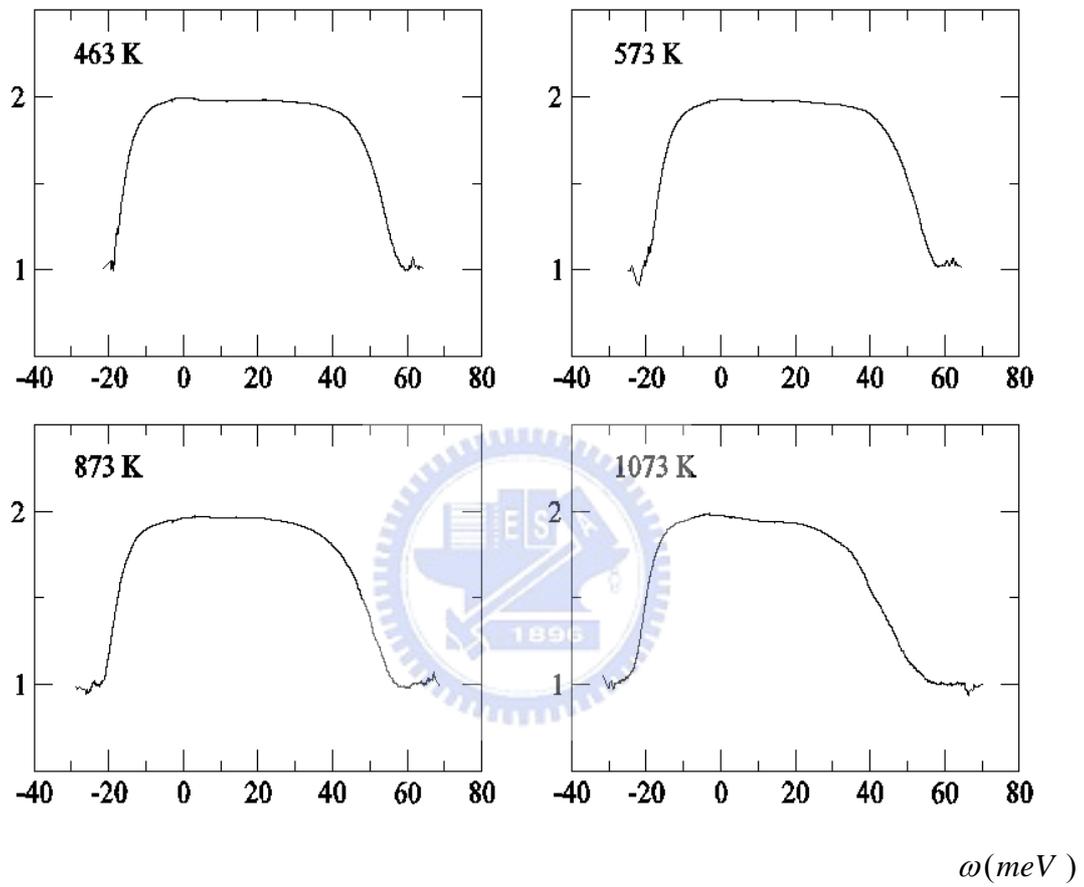
$$R_N(\omega)$$



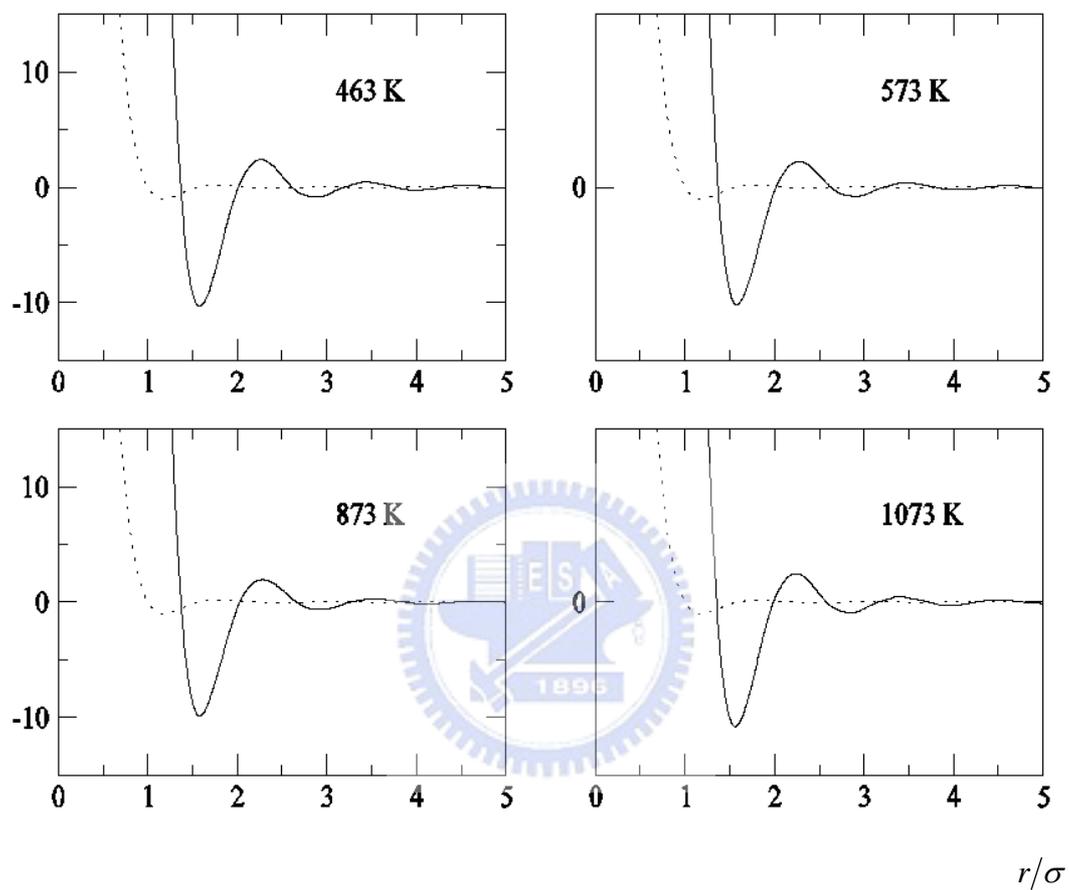
圖(十九). 液態鋰在四個溫度下，二組不同維度之參與數

點線為 1000 顆鋰原子的參與數結果，實線則為 500 顆之結果。

$$R_{1000}(\omega)/R_{500}(\omega)$$



圖(二十). 液態鋰在四個溫度下，二組參與數之比值



圖(二十一). 液態鋰在四個溫度下之假位能與其二階微分

點線為假位能、實線則為假位能之二階微分。圖中橫軸、縱軸之單位皆為化約單位。