

Das Morse Potenzial

Das Morse Potenzial ist neben den Potenzialen von Mie, Lennard-Jones und dem Buckingham-Potential eine in den Jahren 1925-1929 von Philip M. Morse vorgeschlagene und inzwischen häufig verwendete empirische Form, die das Potenzial, d.h. die potenzielle Energie von Atomen und daraus die Schwingungsfrequenzen von Atomen beschreibt sowie die analytische Lösung der Schrödingergleichung ermöglicht.

Die allgemeine Gleichung des Morse Potenzials lautet:

$$\varphi = D_e(1 - e^{-a(r-r_e)})^2 \quad (1)$$

Darin ist r der Kernabstand der beiden betrachteten Atome, r_e der Kernabstand bei der geringsten potentiellen Energie D_e . D_e ist auch spektroskopische Dissoziationsenergie genannt, a ist eine spezifische Stoffkonstante, abhängig von den betrachteten Atomen. Für viele Stoffe sind die Konstanten D_e , a und r_e durch spektroskopische Messung bekannt.

Die erste Ableitung dieser Funktion ergibt

$$\frac{d\varphi}{dr} = 2aD_e e^{-a(r-r_e)}(1 - e^{-a(r-r_e)})$$

Am Minimum gilt

$$\frac{d\varphi}{dr} = 0$$

Damit erhalten wir

$$(1 - e^{-a(r-r_e)}) = 0$$

so dass

$$-a(r - r_e) = 0$$

wird und wir erhalten für das Potenzialminimum

$$r = r_e$$

Setzt man dies in die Stammfunktion ein, wird der Exponent der e-Funktion = 0 und damit die e-Funktion = 1, so dass $D_e = 0$ wird. Andererseits wird bei $r = \infty$ die e-Funktion zu 0 und daher $\varphi = D_e$. Bei $r = 0$ wird der Exponent der e-Funktion = ar_e so dass die e-Funktion große, aber endliche positive Werte annimmt, jedoch nicht unendlich wird, wie man meinen könnte. Zwischen $r = 0$ und $r = r_e$ wird an der Stelle $r = r_0$ das Morse Potenzial φ erneut gleich D_e . Für die e-Funktion gilt an dieser Stelle $r = r_0$

$$e^{-a(r_0-r_e)} = 2$$

Daraus erhält man für r_0 mit $\varphi = D_e$

$$r_0 = \frac{\ln 2 + ar_e}{a}$$

Zwischen $r = 0$ und $r = r_0$ wird das Morse-Potenzial größer D_e .

Die folgende Grafik zeigt das Morse-Potenzial

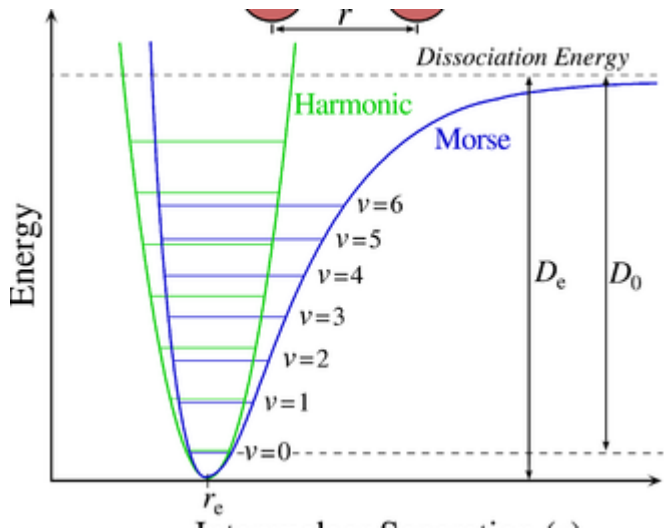


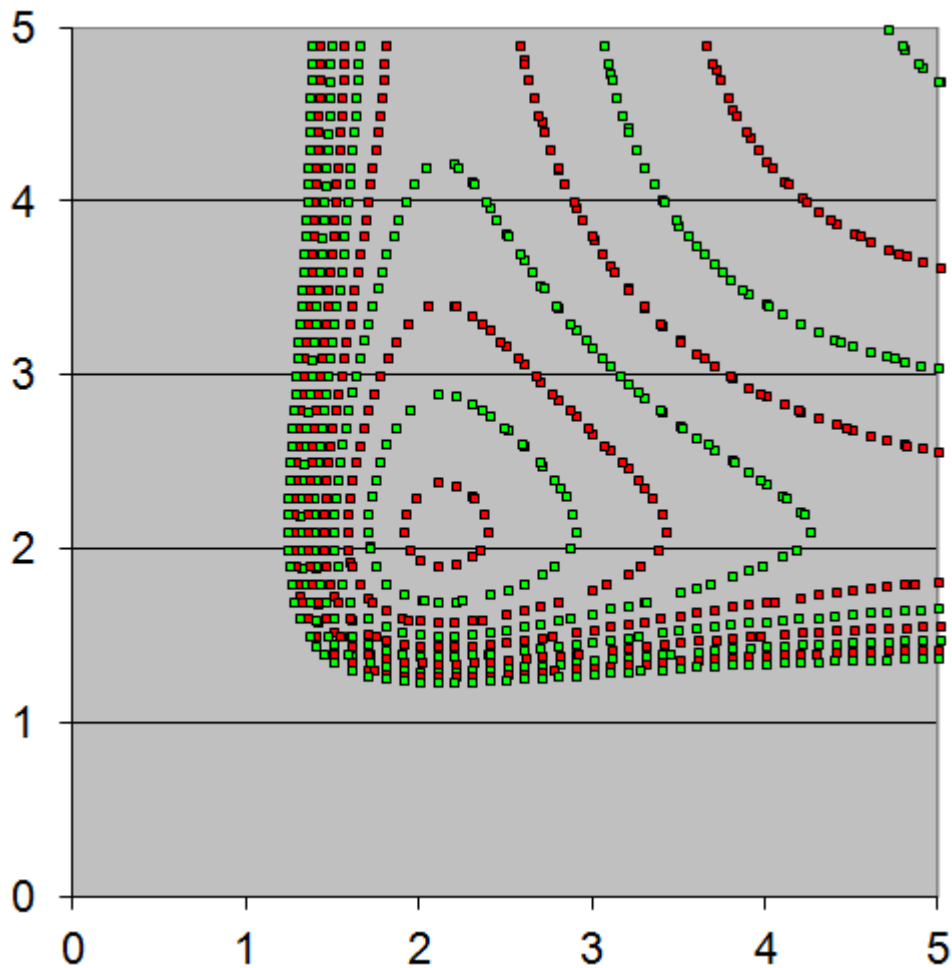
Abb. 1 Morse Potenzial Quelle: Wikipedia: <https://de.wikipedia.org/wiki/Morse-Potential> und https://en.wikipedia.org/wiki/Morse_potential

Die potenzielle Energie wird üblicherweise für $r = \infty$ als $\varphi = 0$ definiert, so dass man für das Morsepotenzial die Form erhält

$$\varphi = D_e \left(1 - e^{-a(r-r_e)} \right)^2 - D_e \quad (2)$$

Damit wird das Morse-Potenzial vergleichbar dem von Buckingham, Mie und Lennard-Jones.

Ebert und Ederer zeigen wie man mit dem Morse-Potenzial die Potentialfläche einer linearen H-C-H Verbindung darstellen kann.



Quelle: Ebert, Ederer [1.1]

Auf der Ordinate ist der H-C und auf der Abszisse der C-H Abstand aufgetragen. Der Gleichgewichtszustand befindet sich bei ca. 2,2. Hier findet man ein Energieminimum. Die Verbindung ist stabil. Bei sehr großen Abständen dissoziieren die Atome, bei sehr kleinen Abständen wird die Energiefläche sehr steil, die Atome stoßen sich ab. In dieser Berechnung wurden die folgenden Konstanten verwendet, s. Ebert, Ederer.

$$D_e = 0,1336 \text{ eV}$$

$$c = 1,03613$$

$$r_0 = 2,1163$$

Das gesamte Potential errechnet sich in diesem Beispiel zu

$$V(ABC) = V(AB) + V(BC) = V(r_{AB}) + V(r_{BC})$$

Für den Harmonischen Oszillator gilt:

$$E_v = hv_0 \left(v + \frac{1}{2} \right) - \frac{h^2 v_0^2}{4D_e} \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

Darin ist h das plancksche Wirkungsquantum = $6,62606957 \cdot 10^{-34}$ Js, v die Schwingungsquantenzahl und v_0 die Frequenz, welche sich wie folgt berechnen lässt.

$$v_0 = \frac{a}{2\pi} \sqrt{\frac{2D_e}{m}}$$

Darin ist m die Teilchenmasse. Damit lässt sich c aus spektroskopischen Messungen ermitteln.

Für HCl gelten die folgenden Werte (2.2)

$$D_e = 4,437 \text{ eV}$$

$$a = 0,0181181 \text{ pm}^{-1}$$

$$r_e = 127,5 \text{ pm}$$

Kurzweil) zeigt eine Anwendung für das HCl-Molekül

$$a = \sqrt{\frac{kN_A}{2D}}$$

$$F = -k(r - r_e)$$

mit $a = 1,9 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-1}$ und der Federkonstanten $k = 481 \text{ N/m}$ sowie $D = 434 \text{ kJ/mol}$ und der Avogadrozahl (Loschmidt) $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$. Dadurch ergibt sich für die Frequenz

$$f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Für die reduzierte Masse gilt

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

Darin ist m_1 die Masse H und m_2 die Masse Cl. Als Ergebnis erhalten wir $\mu = 1,61 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. Damit wird $f_0 = 8,7 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$. Daraus erhält man mit

$$\lambda = \frac{c}{f_0}$$

die Wellenlänge $\lambda = 3,46 \text{ }\mu\text{m}$ ($c = \text{Lichtgeschwindigkeit}$). Dies liegt im Infrarotbereich.

Literatur:

Ebert, Ederer: Computerberechnungen in der Chemie (1.1)

Moelwyn-Hughes: Physikalische Chemie (1.2)

P. Kurzweil, P. Scheipers: Chemie Grundlagen, Aufbauwissen, Anwendungen und Experimente, Vieweg, 2010 (1.3)

H. Preuss: Die Methoden der Molekülphysik und ihre Anwendungsbereiche, Fortschritte der Physik im Auftrag der Physikalischen Gesellschaft der DDR 1959 von Rudolf Ritschl und Robert Rompe. (1.4)

Wikipedia: <https://de.wikipedia.org/wiki/Morse-Potential> und
https://en.wikipedia.org/wiki/Morse_potential (2.1)

chemgapedia:

http://www.chemgapedia.de/vsengine/glossary/de/morse_00045potenzial.glos.html (2.2)

In Bearbeitung

W. Schmidt 2/2019

www.chemievt.de