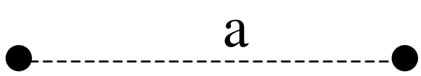
Das Lenard-Jones-Potential

Das Lenard-Jones-Potential (LJP) beschreibt die Wechselwirkungsenergie zweier Massenpunkte im Abstand x. Die potentielle Energie kann hergeleitet werden aus der Überlagerung zweier Kräfte – einem attraktiven und einem repulsiven Anteil. An der Stelle, wo sich beide Kräfte kompensieren, hat die potentielle Energie ein Minimum:

$$E_{min} = E_{pot}(x = a) = -E_0 \quad F(x = a) = 0$$



Allgemein wird das LJP durch folgende Beziehung angegeben:

$$E_{pot} = E_0 \left\{ \left(\frac{a}{x} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{x} \right)^{6} \right\}$$

Dem Potential entspricht eine Kraft zwischen den Massenpunkten (z.B. Kraft zwischen zwei Molekülen) von

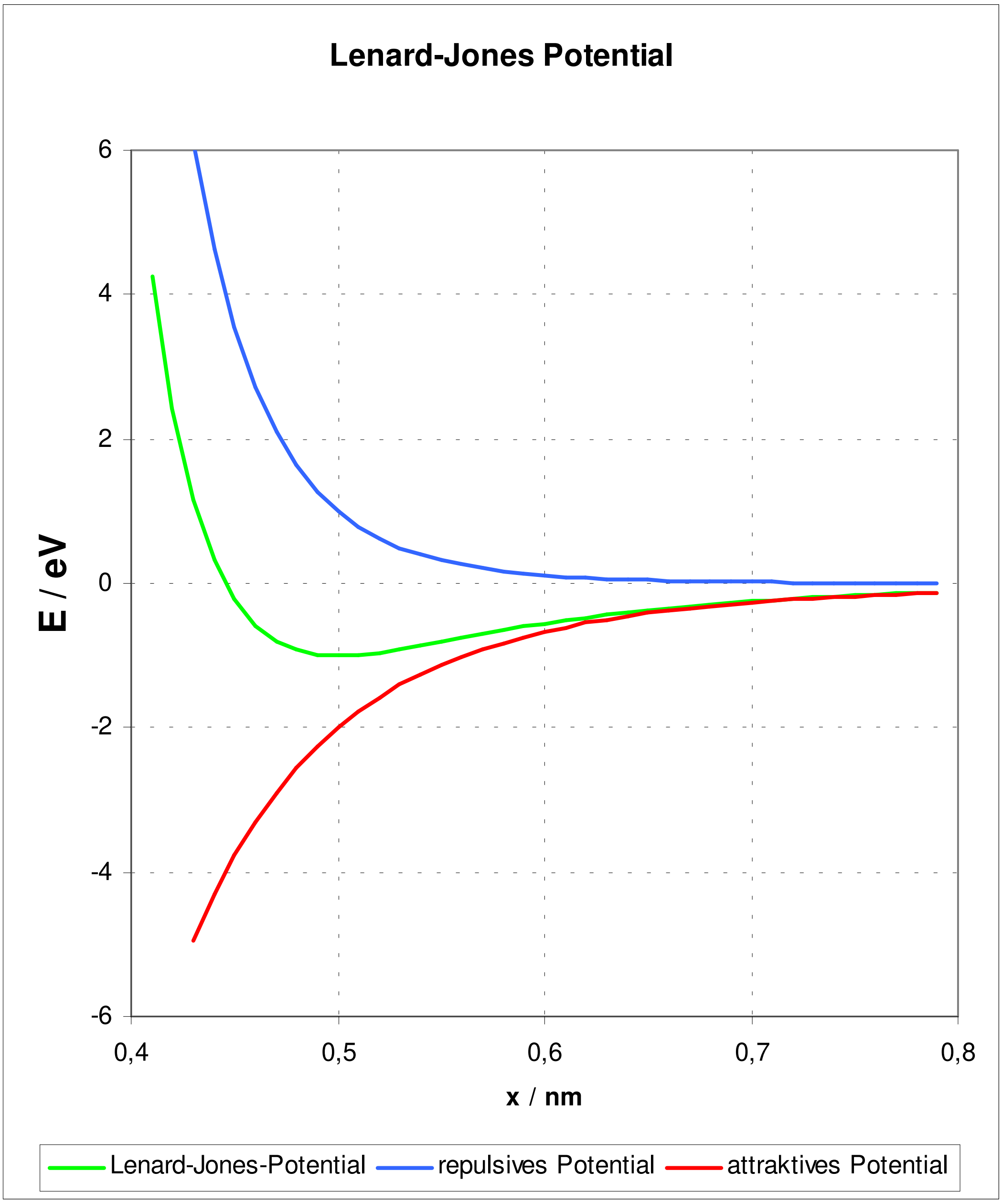
$$\vec{F} = -\text{grad} E_{pot} = -\frac{\partial E_{pot}(x)}{\partial x} \vec{i}$$

wobei $\vec{i}$ den Einheitsvektor in Richtung der Kraftwirkungslinie bezeichnet, hier die x-Richtung. Man erhält durch Differenzieren

$$\vec{F} = 12 E_0 \frac{a^6}{x^7} \left\{ 1 - \frac{a^6}{x^6} \right\}$$

In der Gleichgewichtslage x = a ist die Kraftwirkung gleich Null.

Der Verlauf des Potentials ist in der folgenden Abbildung für a = 0,5nm und E_0 = 1eV grafisch dargestellt:



Das Gesamtpotential (grüne Kurve) hat in der Gleichgewichtslage x = a ein Minimum bei E_{pot} = -1 eV. Der negative attraktive Teil des Potentials nimmt mit der sechsten Potenz des abnehmenden Abstandes zu (van-der-Waals Potential). Die abstoßenden Kräfte nehmen mit abnehmendem Abstand x stärker zu, als die anziehenden, so dass ein Minimum der Energie existiert, bei dem beide Kräfte gleich stark sind.

Für x < a stoßen sich die Teilchen (Moleküle) ab und
für x > a ziehen sie sich an.
Dies hat zur Folge, dass der Gleichgewichtsabstand $x \approx a$ eingenommen wird. Da die Teilchen kinetische Energie besitzen, führen sie Schwingungen um ihre Ruhelage aus. Wir untersuchen das Potential für kleine Abweichungen des Abstandes x von der Ruhelage a:

Man kann eine Funktion f(x) in der Nähe eines Punktes x = a in eine Taylorreihe entwickeln:

$$f(x) = f(a) + \frac{x-a}{1!} f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2!} f''(a) + \ldots\ldots + \frac{(x-a)^n}{n!} f^{(n)}(a)$$

Für das LJP erhält man dann

$$E_{pot}(x) = -E_0 + (x-a)E'_{pot}(a) + (x-a)^2 E''_{pot}(a) + \ldots.$$

Der ersten Ableitung der potentiellen Energie nach dem Ort entspricht die Kraft, welche an der Gleichgewichtslage den Betrag Null hat:

$$E'_{pot}(x = a) = -F(a) = 0$$

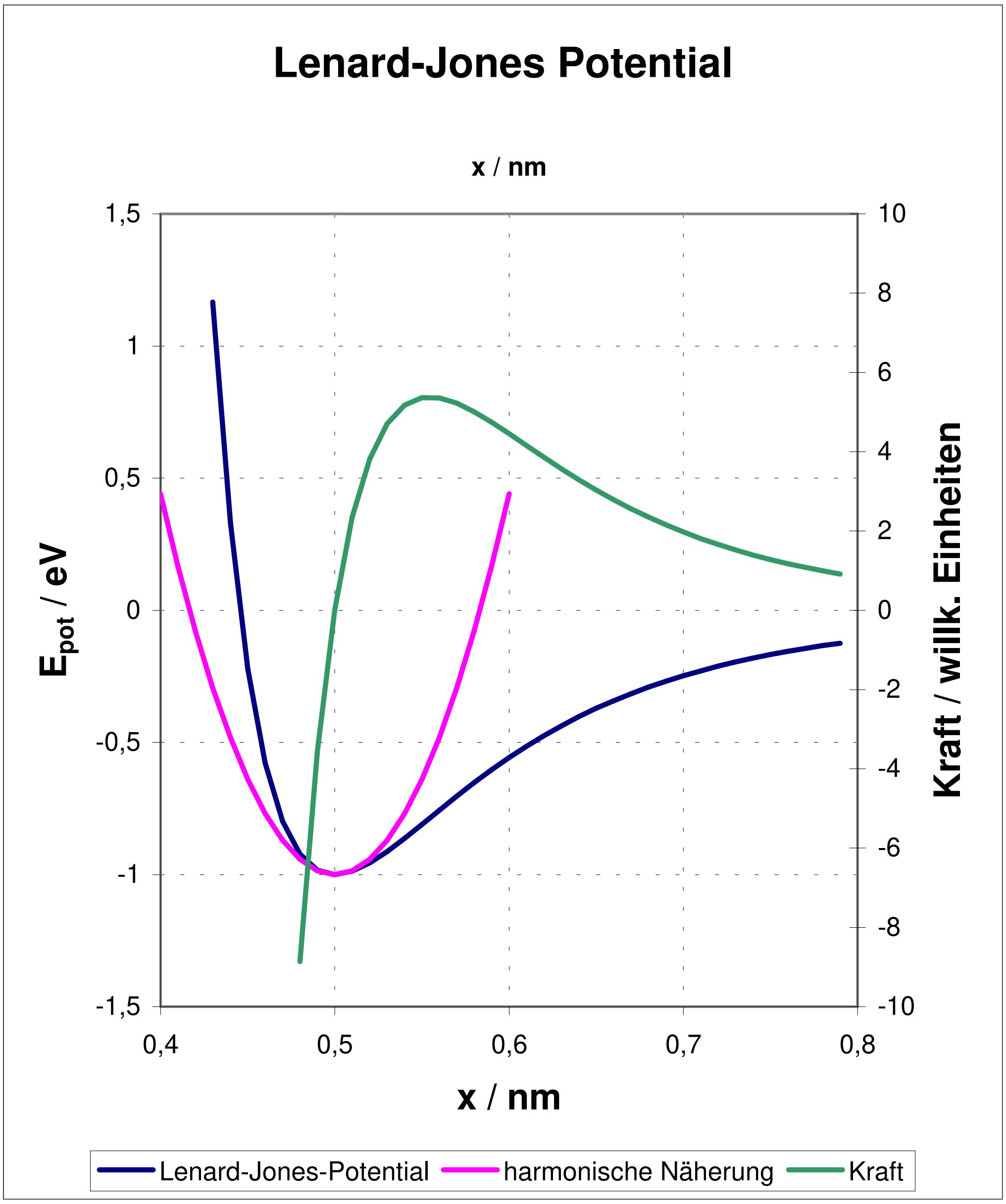
Mit Hilfe der zweiten Ableitung der potentiellen Energie nach dem Ort

$$E''_{pot}(x = a) = \frac{72}{a^2} E_0$$

erhält man in quadratischer (harmonischer Näherung für das Potential:

$$E_{pot} \cong E_0 \left\{ 36 \frac{(x-a)^2}{a^2} - 1 \right\}$$

In der folgenden Abbildung ist das Potential, die quadratische Näherung sowie die Kraft in Abhängigkeit vom Abstand der Teilchen grafisch dargestellt:



Die Minimalenergie $-E_0$ entspricht dem Energiebetrag, den man aufwenden muss, um die Bindung des Teilchenpaares aufzubrechen. Diese Grundzustandsenergie heißt auch Bindungsenergie oder Ionisierungsenergie. Die Kraft im Punkt $x = a$ ist Null. Für geringere Abstände wirken abstoßende, für höhere Beträge von a anziehende Kräfte. Die Ursache der Kräfte wurde hier nicht behandelt. Dies ist Gegenstand der Quantenmechanik. Auch die Grundzustandsenergie ergibt (bei gleichem Potential) einen anderen (höheren) von der Minimalenergie abweichenden Betrag.