

Bindungspotentiale

Advanced

Bindungspotentiale gibt es in verschiedenen mathematischen Näherungen. Die hier gewählte Form

$$U_{\text{Bindg}} = - \frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

ist nicht die einzig mögliche Darstellungsart. Für bestimmte Bindungstypen sind andere Formulierungen manchmal besser.

Das sogenannte **Lennard - Jones Potential** wird z.B. gerne für *van der Waals Bindungen* verwendet. Es ist nur eine Umschreibung der obigen Formel mit einem spezifischen Wert für m und lautet

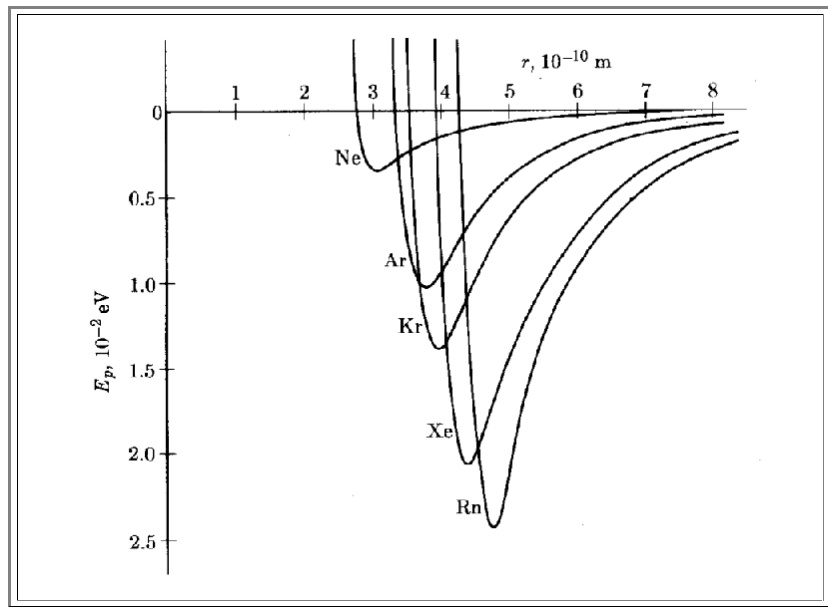
$$U_{\text{Bindg}}(r) = - 4\epsilon \cdot \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} + \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

Das Potential in dieser Form ist sehr asymmetrisch, es fällt vor dem Minimum steil ab und läuft danach recht flach aus

Einige Parameter dazu

Edelgas	r_0 (nm)	E_{Bind} (ev/Atom)	ϵ (10^{-16} erg)	σ (nm)
He	-	-	14	0,256
Ne	0,313	0,02	50	0,274
Ar	0,376	0,08	167	0,340
Kr	0,401	0,116	225	0,365
Xe	0,435	0,17	320	0,398

Die zugehörigen Kurven sehen so aus:



Ein anderer Ansatz nennt sich **Morse - Potential**. Es lautet

$$U_{\text{Bindg}}(r) = - \left(1 - \exp -[a (r - r_0)] \right)^2$$

Es enthält direkt die physikalisch sinnvollen Variablen Gleichgewichtsabstand r_0 und Bindungsenergie E_{Bind} sowie noch einen freien Parameter a .

- Damit kann man es prinzipiell nicht ganz so gut an die gemessenen Potentiale anpassen, wie die Näherungen mit **4** freien Parametern; es ist jedoch in vielen Fällen einfacher damit zu rechnen.