

Berechnung der Bindungsenergie von Neon mittels Lennard-Jones-Potential

Zusammenfassung

Das LENNARD-JONES-POTENTIAL ist eine Näherung für die Wechselwirkung zwischen ungeladenen, nicht chemisch aneinander gebundenen Atomen und wird in der physikalischen Chemie sowie der Atom- und Molekülphysik verwendet. In dieser kurzen Betrachtung soll die Bindungsenergie von Neon in der bcc-Struktur in Abhängigkeit von ϵ und je Atom mit Hilfe des Lennard-Jones-Potentials berechnet werden.

Für die bcc-Struktur sind die Gittersummen

$$A_{12} = \sum_j p_{ij}^{-12} = 9,1142 \quad (1a)$$

und

$$A_6 = \sum_j p_{ij}^{-6} = 12,2533. \quad (1b)$$

Das Lennard-Jones-Potential ist gegeben über

$$U_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right]. \quad (2)$$

Für die Bindungsenergie in einem Kristall mit N Atomen ($N/2$ -Paare) erhält man dann

$$U_{tot} = \frac{N}{2} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right]. \quad (3)$$

Im Gleichgewicht muss gelten

$$\left. \frac{d}{dR} U_{tot} \right|_{R_0} = 0 = -2N\epsilon \left[12A_{12} \frac{\sigma^{12}}{R_0^{13}} - 6A_6 \frac{\sigma^6}{R_0^7} \right] \quad (4)$$

und auflösen nach R_0 liefert für den Gleichgewichtsabstand R_0 :

$$R_0 = \left(2 \frac{A_{12}}{A_6} \right)^{1/6} \sigma. \quad (5)$$

Einsetzen des Gleichgewichtsabstandes aus Gleichung (5) in Gleichung (3) liefert

$$\begin{aligned} U_{tot}(R_0) &= \frac{N}{2} 4\epsilon \left[A_{12} \left(\frac{A_6}{2A_{12}} \right)^2 - A_6 \left(\frac{A_6}{2A_{12}} \right) \right] \\ &= 2N\epsilon \frac{A_6^2 - 2A_6^2}{4A_{12}} \\ &= -\frac{1}{2} N\epsilon \frac{A_6^2}{A_{12}} \quad (6) \end{aligned}$$

und damit für die Bindungsenergie pro Atom:

$$U_{pA}(R_0) = \frac{U_{tot}(R_0)}{N} = -\frac{1}{2} \epsilon \frac{A_6^2}{A_{12}} \quad (7)$$

Mit den Werten (1) für die Gittersummen erhält man für Neon in der bcc-Struktur somit als Bindungsenergie pro Atom:

$$U_{pA}^{\text{Ne}}(R_0) \approx -8,237\epsilon$$