Animation

Potentiel de Morse

par Gilbert Gastebois

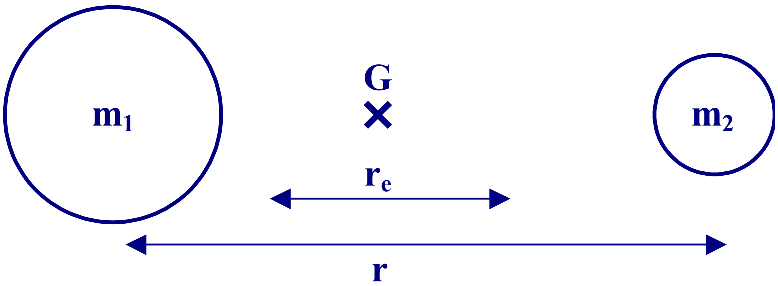
Animation

1. Description

Le potentiel de Morse est une fonction empirique qui décrit l'énergie potentielle de la liaison covalente dans une molécule diatomique.

Son intérêt particulier est qu'on peut en donner une version quantique explicite en l'intégrant dans l'équation de Schrödinger.

2. Expression de l'énergie potentielle V



G centre de masse de m_1 et m_2

r distance entre les deux atomes

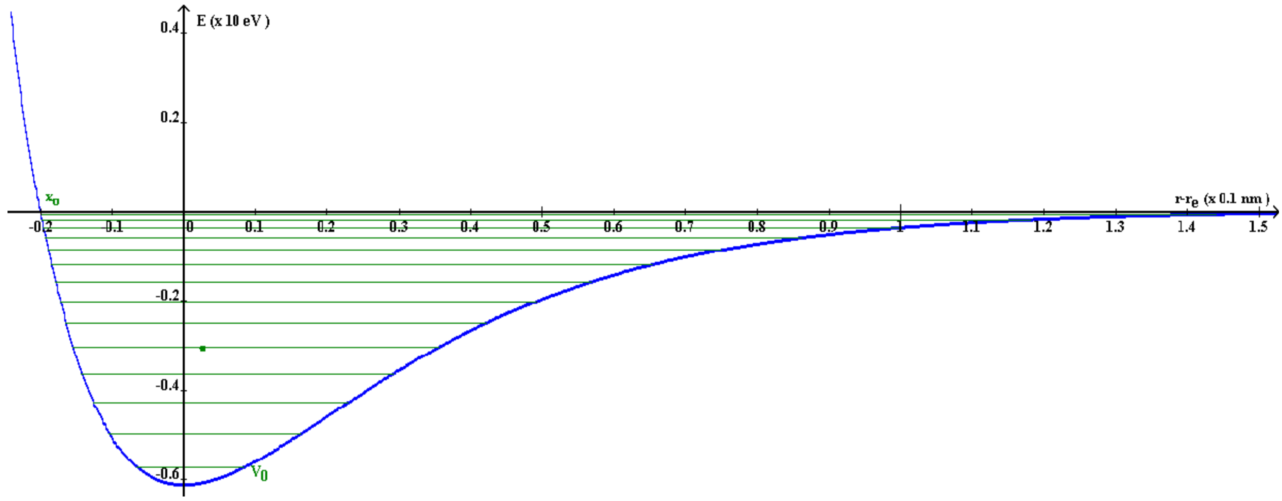
r_e distance à l'équilibre

$x = r - r_e$

On fait l'étude en coordonnées réduites : $\mu = m_1 m_2/(m_1+m_2)$ et $x = r - r_e$

$\mathbf{V = V_m((1 - e^{-x/a})^2 - 1)}$ **$-V_m$ potentiel à $x = 0$**

$a = x_o/\ln(2)$ $-x_o$ étant la valeur minimale de x pour V = 0



3. Force entre les deux atomes

3.1 Expression de F

$\mathbf{F = - dV/dx = - 2\, V_m/a \; e^{-x/a} (1 - e^{-x/a})}$

Pour x très petit on obtient : $F = - 2\, V_m/a^2 \; x$ de la forme $F = - k\, x$ caractéristique de la solution harmonique $x = x_m \sin(\omega_0 t + \phi)$ avec $\omega_0 = (k/\mu)^{1/2}$ et on a $V_m = ½\, k\, a^2$

3.2 Équation différentielle du mouvement

Loi de Newton :

$$\mu\, d^2x/dt^2 + 2\, V_m/a\ e^{-x/a}(1 - e^{-x/a}) = 0$$

L'équation n'a pas de solution algébrique.

On a deux possibilités selon la valeur de l'énergie mécanique E = du système.

- $E = ½\, mV^2 + V < 0$: On une oscillation asymétrique autour du centre de masse G.
  La période de l'oscillation augmente avec E
- $E >= 0$: Les deux atomes s'éloignent indéfiniment. La liaison est rompue.

3.3 Émission-absorption d'infra-rouges

La vibration des deux atomes n'est pas éternelle car, à cause de leur charge électrique, ils émettent une onde électromagnétique de pulsation ω égale à celle de la vibration. Cette émission fait diminuer leur énergie et l'amplitude de la vibration diminue. Cette diminution est équivalente à un freinage du type f = - h v. On peut donc écrire :

$$\mu\, d^2x/dt^2 + h\, dx/dt + 2\, V_m/a\ e^{-x/a}(1 - e^{-x/a}) = 0$$

Ce qui donne une vibration pseudo-périodique.

De même, si on éclaire la molécule avec une onde électromagnétique, on aura un phénomène de résonance si sa pulsation est proche de ω.

$$\mu\, d^2x/dt^2 + h\, dx/dt + 2\, V_m/a\ e^{-x/a}(1 - e^{-x/a}) = x_m \sin(\omega t + \phi)$$

On aura alors un phénomène d'absorption de lumière par la molécule. Ces ondes correspondent au domaine des infra-rouges.

4. Aspect quantique de l'interaction

Au niveau atomique, l'étude classique du mouvement des atomes ne rend pas très bien compte de la réalité. Les deux atomes étant enfermés dans un espace limité, leur énergie est quantifiée.

Il faut employer l'équation se Schrödinger :

$$\hbar^2/(2\mu)\ d^2\Psi/dx^2 + (E - V)\,\Psi = 0$$

L'équation possède une solution analytique qui est tout sauf évidente à trouver et qui indique que le système ne peut être lié que si l'énergie a certaines valeurs particulières données par :

$$\mathbf{E_n = -V_m + (n + ½)\, h\nu_0\, (1 - (n + ½)\, h\nu_0/(4V_m))} \qquad \textbf{n entier >= 0} \quad \textbf{et} \quad \mathbf{n < 4V_m/(h\nu_0) - 1/2}$$

$$\textbf{avec}\ \ \boldsymbol{\omega_0 = 2\pi\, \nu_0 = (2V_m/\mu)^{1/2}/a = (k/\mu)^{1/2}} \qquad h = 6{,}626\ 10^{-34}\ \text{Js}$$

ω_0 a la même valeur que celle donnée de la théorie classique pour les faibles amplitudes.

Pour n = 0 (état fondamental), $E_0 = - V_0 > -V_m$ donc les atomes ne peuvent pas s'immobiliser, il reste toujours un mouvement résiduel en lien avec le principe d'incertitude. On retrouve une caractéristique du mouvement harmonique quantique.

V_0 est l'énergie nécessaire pour rompre la liaison, V_0 est donc l'énergie de liaison de la molécule.

$$\mathbf{V_0 = V_m - ½\, h\nu_0\, (1 - h\nu_0/(8V_m))}$$

On a donc : $V_m = V_0 + A(A/4 + V_0^{1/2})$ avec $A = h(2/\mu)^{1/2}/(4\pi\, a)$

Remarque : Pour les faibles valeurs de n $(n + ½)\, h\nu_0/(4V_m) << 1$ et on retrouve la solution harmonique

$$E_n = -V_m + (n + ½)\, h\nu_0$$

Émission-absorption d'infra-rouges

La molécule peut absorber ou émettre des ondes électromagnétiques par transition entre deux niveaux si $h\nu = E_{n+1} - E_n$.

$E_{n+1} - E_n = h\nu_0 \, (1 - (n + 1)h\nu_0/(2V_m)) = h\nu$