M11.8. Modèle diatomique et potentiel de Morse.

1. Force de rappel.
La relation entre l'énergie potentielle d'interaction et la force d'interaction entre les deux atomes est :

$$\vec{f} = -\overrightarrow{grad} E_p$$

Comme l'expression de l'énergie potentielle ne dépend que de la distance relative entre les deux atomes, l'équation précédente s'écrit en coordonnées polaires :

$$f_r(r) = -\frac{dE_p(r)}{dr} = -2Aa(1-\exp(-a(r-r_o)))\exp(-a(r-r_o))$$

2. Fréquence de vibration.
En posant $x = (r - r_o)$ qui représente l'écart par rapport à la position d'équilibre, l'expression devient :

$$f_r(x) = -2Aa\left(1-\exp\left(-ax\right)\right)\exp\left(-ax\right)$$

En appliquant la relation de la dynamique dans le référentiel barycentrique, on a :

$$f_r(x) = -2Aa\left(1-\exp\left(-ax\right)\right)\exp\left(-ax\right) = \mu\ddot{x}$$

$$\ddot{x} + 2\frac{Aa}{\mu}\left(1-\exp\left(-ax\right)\right)\exp\left(-ax\right) = 0$$

Comme $ax << 1$ on opère un développement limité de exp($-ax$) en ne conservant que les termes du premier ordre en x :

$$\ddot{x} + 2\frac{Aa}{\mu}\left(1-(1-ax)\right)(1-ax) = 0$$

$$\ddot{x} + 2\frac{Aa^2}{\mu}x = 0$$

On pose :

$$\omega = \sqrt{2\frac{Aa^2}{\mu}} = 2\pi f$$

$$f = \frac{a}{\mu}\sqrt{\frac{A}{2\mu}}$$