

## Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

### Lösungen zur 1. Übung: Mathematische Grundlagen I

#### Aufgabe 1: Kurvendiskussion eines Bindungspotentials

[Zur Erläuterung des physikalischen Hintergrunds dieser Aufgabe: Das Lennard-Jones-Potential beschreibt die Bindung eines Atoms an seine(n) Nachbarn im Molekül bzw. Festkörper. Der Abstand zu dem/den Nachbarn ist positiv, daher gilt  $x > 0$ . Für kleine Abstände überwiegen die abstoßenden Kräfte. Da diese durch den  $B$ -Term ausgedrückt werden (der  $A$ -Term ist negativ und bewirkt daher die Anziehung = Absenkung der Gesamtenergie), ist dessen  $x$ -Exponent größer als der des  $A$ -Terms.]

a) Grenzwerte:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \left( -\frac{A}{x^6} + \frac{B}{x^{12}} \right) = \lim_{x \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{x^{12}} (B - Ax^6) \right] = \infty$$

Bei diesem Grenzwert ist wegen der hohen Potenz bei  $x$  im Nenner klar, daß der Term divergiert; es bleibt lediglich zu entscheiden, welches Vorzeichen er letztlich hat (also ob der Grenzwert plus oder minus unendlich ist). Man weiß nur, daß  $A > 0$  und  $B > 0$ , aber ob nun  $A > B$  oder umgekehrt, das weiß man nicht. Es ist aber egal, denn im Ausdruck  $B - Ax^6$  wird der  $A$ -Anteil durch den Faktor  $x^6$  im Limes beliebig klein, so daß am Ende das positive Vorzeichen von  $B$  den Ausschlag für das Ergebnis liefert. – Dagegen ist der folgende Fall direkt „durch Hinschauen“ zu lösen:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left( -\frac{A}{x^6} + \frac{B}{x^{12}} \right) = 0.$$

b) Zu Minima und Maxima:

$$\begin{aligned} f(x) &= -\frac{A}{x^6} + \frac{B}{x^{12}} = -Ax^{-6} + Bx^{-12} \\ f'(x) &= 6Ax^{-7} - 12Bx^{-13} \\ f''(x) &= -42Ax^{-8} + 156Bx^{-14} \end{aligned}$$

Notwendige Bedingung für Extrema:  $f' = 0$ ; hinreichende Bedingung:  $f' = 0 \wedge f'' \neq 0$ .

$$\begin{aligned} f'(x_E) = 0 &\Rightarrow 6Ax_E^{-7} = 12Bx_E^{-13} \\ &A = 2Bx_E^{-6} \\ &x_E^6 = \frac{2B}{A} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow x_E = \sqrt[6]{\frac{2B}{A}} > 0$$

Zur Untersuchung der Extrema (ob es Maxima oder Minima sind), benötigen wir die zweite Ableitung:

$$\begin{aligned}
 f''(x_E) &= -42A \left[ \sqrt[6]{\frac{2B}{A}} \right]^{-8} + 156B \left[ \sqrt[6]{\frac{2B}{A}} \right]^{-14} \\
 &= -42A \left( \frac{2B}{A} \right)^{-\frac{4}{3}} + 156B \left( \frac{2B}{A} \right)^{-\frac{7}{3}} \\
 &= \left( \frac{2B}{A} \right)^{-\frac{4}{3}} \left[ -42A + 156B \left( \frac{A}{2B} \right) \right] = 36A \left( \frac{2B}{A} \right)^{-\frac{4}{3}}
 \end{aligned}$$

Es ist  $36A \left( \frac{2B}{A} \right)^{-\frac{4}{3}} > 0$  für  $A, B > 0 \Rightarrow f'' > 0 \Rightarrow$  Bei  $x_E$  liegt ein Minimum vor.

c) Die notwendige Bedingung für eine Wendestelle ist  $f'' = 0$ .

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow 156Bx_W^{-14} &= 42Ax_W^{-8} \\
 \frac{156B}{42A} &= \frac{x_W^{14}}{x_W^8} = x_W^6 \\
 \Rightarrow x_W &= \sqrt[6]{\frac{26B}{7A}} > \sqrt[6]{\frac{2B}{A}}
 \end{aligned}$$

Die Wendestelle liegt rechts vom Minimum, weil  $\frac{26}{7} > 2$ .

d) Kurvenverlauf:

Weil es nur eine Wendestelle gibt, und wegen des Verhaltens im Unendlichen sowie der Positionen von Wendestelle und Minimum, kann das Minimum nur im Bereich negativer Werte liegen. Insgesamt ergibt sich also folgender Kurvenverlauf:

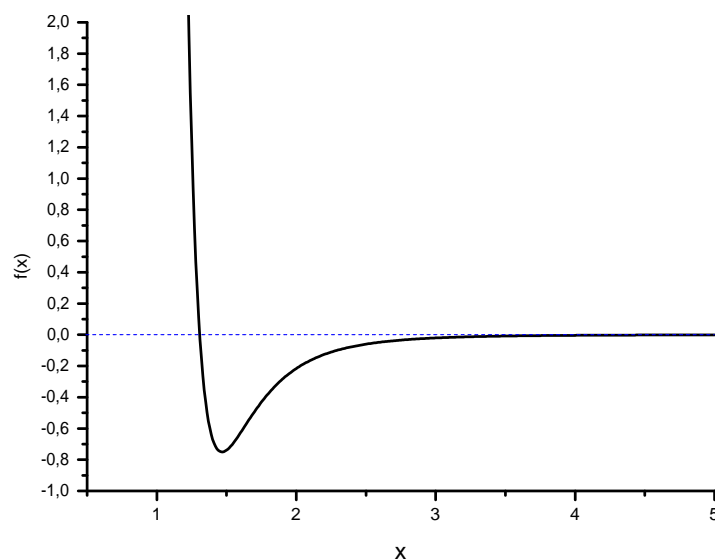


Abbildung 1: Lennard-Jones-(12, 6)-Potential mit  $A = 15$  und  $B = 75$

## Aufgabe 2: Fermi-Integral

Mit  $j = 0$  ist  $\Gamma(j + 1) = \Gamma(1) = 1$ . Im Integranden wird zuerst der Exponent vereinfacht, indem  $y = \beta(x - \eta)$  substituiert wird; die Integration geht dann über  $y$ , wobei sich die Grenzen entsprechend ändern (hier in „Physikerschreibweise“, d. h. mit „einzelnen Differentialen“; siehe dazu \* weiter unten):

$$\frac{dy}{dx} = \beta \Rightarrow dx = \frac{1}{\beta} dy;$$

$$\text{Untergrenze: } \beta(0 - \eta) = -\beta\eta, \text{ Obergrenze: } \beta(\infty - \eta) = \infty$$

Damit ergibt sich:

$$\mathcal{F}_0(\eta) = \frac{1}{\Gamma(1)} \int_0^\infty \frac{1}{e^{\beta(x-\eta)} + 1} dx = \frac{1}{\beta} \int_{-\beta\eta}^\infty \frac{1}{e^y + 1} dy$$

Zur Vermeidung von „e hoch unendlich“ im Nenner wird der Integrand umgeschrieben, indem er mit  $e^{-y}$  erweitert wird:

$$\mathcal{F}_0(\eta) = \frac{1}{\beta} \int_{-\beta\eta}^\infty \frac{1}{e^y + 1} dy = \frac{1}{\beta} \int_{-\beta\eta}^\infty \frac{e^{-y}}{1 + e^{-y}} dy$$

Jetzt wird  $z = e^{-y}$  substituiert (wieder in „Physikerschreibweise“), die Integration geht dann über  $z$ , und die Grenzen ändern sich erneut:

$$\frac{dz}{dy} = -e^{-y} = -z \Rightarrow dy = -\frac{1}{z} dz;$$

$$\text{Untergrenze: } e^{-(-\beta\eta)} = e^{\beta\eta}, \text{ Obergrenze: } e^{-\infty} = 0$$

Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_0(\eta) &= \frac{1}{\beta} \int_{-\beta\eta}^\infty \frac{e^{-y}}{1 + e^{-y}} dy = \frac{1}{\beta} \int_{e^{\beta\eta}}^0 \frac{z}{1 + z} \left(-\frac{1}{z}\right) dz = \frac{1}{\beta} \int_0^{e^{\beta\eta}} \frac{1}{1 + z} dz \\ \Rightarrow \mathcal{F}_0(\eta) &= \frac{1}{\beta} \left[ \ln |1 + z| \right]_0^{e^{\beta\eta}} = \frac{1}{\beta} \{ \ln |1 + e^{\beta\eta}| - \ln(1) \} = \frac{1}{\beta} \ln(1 + e^{\beta\eta}) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt konnten die Betragsstriche wieder weggelassen werden, weil  $\exp(\beta\eta) > 0$ .

\*) Zur Erinnerung: Die allgemeine Substitutionsregel ist die Umkehrung der Kettenregel der Differentiation; sie ist hier für  $y = g(x)$  notiert:

$$\int_a^b f(g(x)) g'(x) dx = \int_{g(a)}^{g(b)} f(y) dy \quad (1)$$

Diese mathematisch saubere Gleichung (auf die wir ganz am Ende zurückkommen werden) wird von den Physikern wie folgt interpretiert:

$$\Rightarrow g'(x) dx = dy \quad (2)$$

Dies geschieht erst mal nur rein formal, bzw. „durch Hingucken“, d. h. als textueller Vergleich der beiden Seiten der Gleichung; die Unterschiede beim Integranden und bei den Integralgrenzen

werden komplett ignoriert. Aber dann scherzen sich die Physiker nicht weiter darum, daß das bloß symbolisch gemeint sein kann, sondern rechnen munter drauflos: Sie tun so, als ob die „Differenziale“ (was auch immer das sein soll) eigenständige Variablen wären, mit denen man genauso rechnen könnte wie mit Variablen:

$$\Rightarrow dx = \frac{1}{g'(x)} dy \quad (3)$$

Mit dieser „Brechtstange“ wurde die obige Aufgabe gelöst. Mathematisch steckt folgendes dahinter: Zur Umkehrfunktion  $x = g^{-1}(y)$  gehört die Ableitung  $(g^{-1})'(y) = \frac{1}{g'(g^{-1}(y))}$ . Ersetzt man das  $x$  auf der rechten Seite von (3) durch die Umkehrfunktion, zeigt sich die Bedeutung der Physikerschreibweise für die Differenziale:

$$dx = \frac{1}{g'(x)} dy = \frac{1}{g'(g^{-1}(y))} dy = (g^{-1})'(y) dy \quad (4)$$

Genau das ergibt sich nun auch direkt aus der folgenden, mathematisch sauberen Berechnungsweise für den Fall, daß  $g'(x)$  noch nicht im Integranden vorhanden ist; das alles klappt natürlich nur, wenn im gesamten Integrationsintervall  $g'(x) \neq 0$  gilt (und darauf müssen die Physiker natürlich auch achten):

$$\begin{aligned} \int_a^b f(g(x)) dx &= \int_a^b \frac{f(g(x))}{g'(x)} g'(x) dx \\ &\stackrel{\text{mit (1)}}{=} \int_{g(a)}^{g(b)} \frac{f(y)}{g'(g^{-1}(y))} dy = \int_{g(a)}^{g(b)} f(y) (g^{-1})'(y) dy \end{aligned} \quad (5)$$

Bei der Anwendung von Gl. (1) im zweiten Schritt von (5) muß im Nenner auch das  $x$  im Argument von  $g'(x)$  ersetzt werden, und zwar mittels der Umkehrfunktion. Im Ergebnis von (5) steht genau das da, was in (4) als Bedeutung der Differentialschreibweise ermittelt wurde.

Fazit: Die Physikerschreibweise spart sich den ersten Schritt in (5), d. h. die Erweiterung mit der Ableitung; das wird gewissermaßen ausgelagert.

### Aufgabe 3: Logarithmische Auftragung

(Zur Erinnerung: „Der Logarithmus ist ein Exponent“ – wichtiger Merkspruch!)

- a) Im Exponenten von  $y = ae^{bx}$  befindet sich eine lineare Funktion, deren Darstellung ist eine Gerade. Daher liegt eine logarithmische Auftragung der  $y$ -Werte nahe; dafür ergibt sich die Beziehung

$$\ln(y) = \ln(ae^{bx}) = \ln(a) + \ln(e^{bx}) = \ln(a) + b \ln(e^x) = \ln(a) + bx$$

Ja: Trägt man  $\ln(y)$  gegen  $x$  auf, so erhält man eine Gerade.

- b) Die Konstante  $b$  ist die Steigung der Geraden, und die Konstante  $a$  erhält man aus dem Schnittpunkt mit der  $\ln(y)$ -Achse, d. h. für  $x = 0$ :

$$\ln(y) = \ln(a) + b \cdot 0 = \ln(a) \quad \Leftrightarrow \quad y = a$$

In der logarithmischen Auftragung bekommt man also  $a$  als „e hoch Achsenabschnitt“.

c) Es gilt:

$$y = n^{\log_n y} \Rightarrow \ln(y) = \ln\left(n^{\log_n y}\right) = \log_n(y) \ln(n) \Rightarrow \log_n(y) = \frac{\ln(y)}{\ln(n)}$$

Daraus folgt mit dem Ergebnis von a):

$$\begin{aligned} \log_n(y) &= \frac{\ln(a) + bx}{\ln(n)} = \frac{\ln(a)}{\ln(n)} + \frac{b}{\ln(n)}x \\ \Rightarrow \log_n(y) &= \log_n(a) + \frac{b}{\ln(n)}x \end{aligned}$$

Die Konstante  $a$  bestimmt sich wieder aus dem Schnittpunkt mit der  $\log_n(y)$ -Achse und  $b$  wieder aus der Steigung, die hier  $\frac{b}{\ln(n)}$  beträgt.

d) Mit  $b = -c$  und  $z = x^{-1}$  ist  $y = a \exp\left(-\frac{c}{x}\right) = a \exp(bz)$ , und das entspricht genau dem im Aufgabenteil a) behandelten Fall. Bei der Arrheniusdarstellung wird also  $\log_{10}(y)$  nicht gegen  $x$ , sondern gegen  $1/x$  aufgetragen. Nach Aufgabenteil b) ist der Betrag der negativen Steigung dieser Geraden gleich dem freien Parameter  $c$  geteilt durch  $\ln(10) \approx 2,3$ .

(Zur Erläuterung: Typischerweise werden Arrheniusdarstellungen bei bestimmten Formen exponentieller Temperaturabhängigkeit verwendet. Dabei ist dann  $x$  die Temperatur  $T$ , und der freie Parameter  $c$  enthält eine für das jeweils untersuchte Material charakteristische Größe; Sinn und Zweck der Arrheniusdarstellung ist typischerweise die Ermittlung speziell deren Wertes. Ein solcher Fall wird uns in einer späteren Übung noch begegnen.)

e) + f) Für  $y = ax^b$  ergibt sich durch Logarithmieren:

$$\ln(y) = \ln(ax^b) = \ln(a) + \ln(x^b) = \ln(a) + b \ln(x)$$

Mit einer doppellogarithmischen Auftragung, d. h.  $\ln(y)$  gegen  $\ln(x)$ , ergibt sich auch hier eine Gerade. Die Konstante  $b$  erhält man wieder aus der Steigung, dagegen ergibt sich  $a$  aus dem Funktionswert bei  $x = 1$ .