Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Übung 1: Mathematische Grundlagen I

Aufgabe 1: Kurvendiskussion eines Bindungspotentials

Gegeben sei folgende Funktion (die unter dem Namen „Lennard-Jones-Potential“ bekannt ist und die in der Vorlesung eine wichtige Rolle spielen wird):

$$f(x) = -\frac{A}{x^n} + \frac{B}{x^m}$$

Hierbei sind $A > 0$ und $B > 0$ reellwertige empirische Parameter, n und m sind natürliche Zahlen (ebenfalls empirisch); physkalisch relevant sind nur die Fälle mit $m > n$ und $x > 0$. (Warum nur diese Fälle physikalisch relevant sind, wird in der Vorlesung behandelt.)

Diskutieren Sie diese Funktion für $n = 6$ und $m = 12$ [sog. Lennard-Jones-$(12, 6)$-Potential]:

a) Betrachten Sie das Verhalten für $x \to 0$ und $x \to \infty$.

b) Berechnen Sie Minima und Maxima der Funktion.

c) Bestimmen Sie die Wendestellen der Funktion.

d) Skizzieren Sie den Verlauf der Kurve für geeignet gewählte Werte von A und B.

Aufgabe 2: Fermi-Integral

Berechnen Sie das folgende Integral für $j = 0$ (Hinweis: Substitutionsregel anwenden); es hängt mit der Fermi-Verteilung der Thermodynamik zusammen (Näheres dazu später), $\beta > 0$ ist reellwertig und heißt „Temperaturparameter“, und $\Gamma(z)$ ist die Gammafunktion (bitte informieren Sie sich selber im Internet darüber):

$$\mathcal{F}_j(\eta) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{x^j}{e^{\beta(x-\eta)} + 1} \mathrm{d}x$$

Aufgabe 3: Logarithmische Auftragung

Zwischen den beiden Größen x und y bestehe der folgende allgemeine exponentielle Zusammenhang:

$$y = ae^{bx}$$

a) Bei welcher Wahl der Achsenauftragung erhalten Sie als graphische Darstellung dieses Zusammenhangs eine Gerade?

b) Wie können Sie aus dieser Geraden die Konstanten a und b bestimmen?

c) Rechnen Sie die ln-Achse in eine $\log_n$-Achse um und bestimmen Sie erneut die Konstanten a und b!

Ein Spezialfall dieses exponentiellen Zusammenhangs ist die Arrhenius-Gleichung:

$$y = ae^{-\frac{c}{x}}$$

Die nach Aufgabenteil a) aus dieser Gleichung resultierende Gerade wird dementsprechend Arrheniusdarstellung genannt, dabei wird für das n in Aufgabenteil c) typischerweise der Wert 10 gewählt. (Die Arrheniusdarstellung wird im weiteren Verlauf der Vorlesung verwendet.)

d) Wie kann man den Spezialfall der Arrhenius-Gleichung auf den oben behandelten allgemeinen Fall zurückführen? Geben Sie die jeweiligen Entsprechungen bzw. Substitutionen an.

Betrachten Sie zuletzt eine allgemeine Potenz als funktionalen Zusammenhang zwischen den beiden Größen x und y:

$$y = ax^b$$

e) Wie ist hierbei die Achsenauftragung zu wählen, so daß Sie eine Gerade erhalten?

f) In welcher Form können Sie aus dieser Geraden die Konstanten a und b bestimmen?