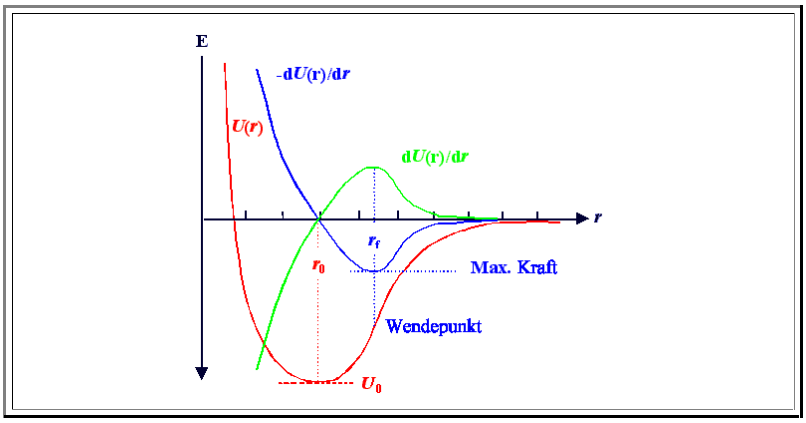
2.3 Das Konzept des Potentialtopfes

2.3.1 Potentialtöpfe für Atombindungen

Die Darstellung der Bindungsenergie - genauer der potentiellen Energie des Bezugsatoms - als Funktion des Abstands von Bindungspartnern - ist, in jeder Näherung, eine außerordentlich nützliche Graphik; im Unterkapitel 2.2.2 sind wir diesem Konzept schon begegnet. Jede solche Darstellung die ein Minimum der potentiellen Energie besitzt, nennen wir "**Potentialtopf**" Der Potentialtopf zeigt - zusammen mit seinen Ableitungen - sofort wesentliche Elemente der Bindung:



- Die **Bindungsenergie U_0**, gegeben durch die Tiefe des Potentialtopfes,
- Den **Gleichgewichtsabstand r_0**, definiert durch den Ort des Minimums.
- Die **Kraft F**, die auf das betrachtete Atom wirkt, wenn es einen beliebigen Abstand r vom Partner hat; sie ist per definitionem gegeben durch

$$F = -\frac{dU}{dr}$$

- Die Kraftkurve ist also die (negative) Ableitung der Potentialkurve. Bei r_0 geht sie durch Null - wie das sein muß.
- Die **maximale Kraft F_{max}** die man braucht um die Verbindung zu lösen; gegeben durch das Maximum der Kraftkurve, d.h. durch die Bedingung

$$\frac{dF}{dr} = 0 = -\frac{d^2U}{dr^2}$$

Dazu wollen wir eine kleine Übungsaufgabe machen

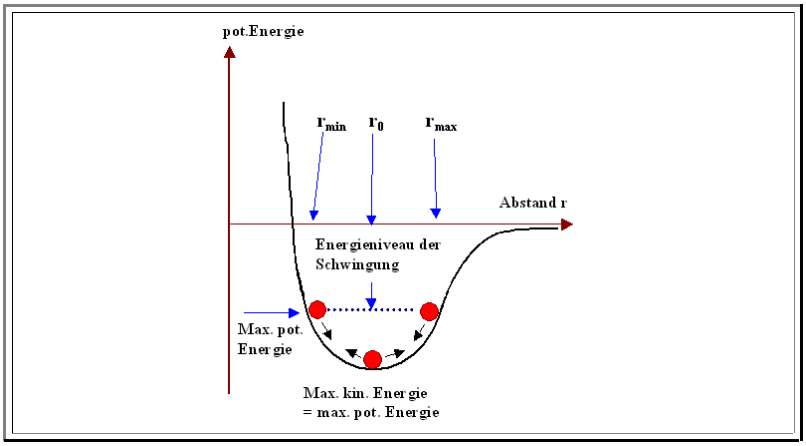
Übung 2.3-1

Potentialtopf und Kräfte

Hat man viele Atome, werden sie sich solange bewegen, bis alle im Minimum eines Potentialtopfs sitzen, d.h. (im Mittel) keine Kräfte von den Nachbaratomen mehr spüren

- Das kann man sich in einem "advanced" Modul mal per Simulation anschauen. Mit in bißchen Spielen kann man Kristalle bilden und wieder schmelzen!

Die Potentialtopfkurve kann aber noch mehr veranschaulichen. Wenn die Atome nicht vollständig ruhig beim Gleichgewichtsabstand r_0 sitzen, sondern um diese Gleichgewichtslage *vibrieren*; tun sie das im Potentialtopfbild, indem sie wie eine Kugel in einem wirklichen Topf mit der entsprechenden Gestalt, die Wände hoch- und runterlaufen



- Dabei kann - es gilt die Quantentheorie - nicht jede *beliebige* Schwingung auftreten, sondern nur solche die bestimmte, durch die Lösung der entsprechenden Schrödingergleichung gegebene Energien haben können. Die damit verbundenen Energien kann man als **Energieniveaus** (die bei Atomen wegen der großen Masse dicht benachbart sind) in den Potentialtopf einzeichnen und der Graphik folgende Informationen entnehmen:
  - Die **Frequenz** der Schwingung; einfach aus der Masse und der durch den Potentialtopf gegebenen Rückstellkraft.
  - Die *Amplitude* der Schwingung als Differenz der beiden Extremabstände r_{max} und r_{min}.
  - Die ungefähre **Schmelztemperatur** (oder Zersetzungstemperatur). Sie ist erreicht, wenn die thermische Energie, die ja nichts anderes ist als die in den Schwingungen sitzende Energie, ungefähr gleich der Bindungsenergie wird. Denn dann ist das Atom bei r_{max} schon so weit vom Partner weg, daß es kaum mehr eine Rückkehrkraft spürt.
  - Die Größenordnung der **thermischen Ausdehnung**. Durch die Asymmetrie des Potentials ist das Atom insbesondere bei großen Amplituden im Mittel weiter vom Partner entfernt als r_0 - der Bindungsabstand wird länger; das Material dehnt sich beim Erwärmen (= mehr Schwingungen mit hoher Energie) aus.
- Quantitative Beziehungen zu all diesen Größen werden in Kapitel 2.4 abgeleitet.

Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu 2.3