Lösungen zur Übung 2.4-1

Berechnung des E-Moduls aus dem Bindungspotential

Illustration

- Gegeben sei das Bindungspotential

$$U_{Bindg} = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

- **1.** Wie groß ist der Elastizitätsmodul ausgedrückt in U_{Bindg}? Für Hinweise zur Ableitung der Grundformel siehe den Hauptstrang
- **2.** Zeige, daß sich folgende Formel ergibt

$$E = \frac{n \cdot m \cdot U_0}{r_0^3}$$

Zum ersten Teil der Aufgabe

- Um den Abstand eines Atoms in irgendeiner Anordnung mit Bindungsabstand r_0 zu seinen Nachbarn zu ändern, muß eine Kraft F angreifen, die dann auf die für ein Atom spezifische Fläche $A = r_0^2$ wirkt.
  - Die auf ein Atom bezogene Spannung $\sigma = F/A$ ist damit

$$\sigma = \frac{F}{r_0^2}$$

  - Der Abstand zu den Nachbarn wird sich ändern, die zugehörige Dehnung ϵ ist

$$\epsilon(\sigma) = \frac{r(\sigma) - r_0}{r_0}$$

  - Die Kraft F um *gegen* das Bindungspotential das Atom zum Ort r zu bringen ist direkt durch die Ableitung des Potentials $U(r)$ gegeben, wir haben $F = +dU(r)/dr$.
  - Wir haben ein plus anstelle eines minus Zeichens, denn wir betrachten jetzt die Kraft die gegen die rücktreibende Kraft des Potentials "arbeitet".
- Der **E**-Modul E war definiert als

$$E = \frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{d[F/r_0^2]}{d\epsilon}$$

  - Setzt man alle Beziehungen von oben ein, berücksichtigt die Kettenregel ($d\sigma/d\epsilon = d\sigma/dr \cdot dr/d\epsilon$) mit $dr/\epsilon = r_0$, erhält man

$$E = \frac{1}{r_0^2} \cdot \frac{dF}{dr} \cdot \frac{dr}{d\epsilon} = \frac{1}{r_0^2} \cdot \frac{d^2U}{dr^2} \cdot \frac{dr}{d\epsilon}$$

$$E = \frac{1}{r_0} \cdot \frac{d^2U}{dr^2}$$

- Für kleine elastische Verformungen müssen wir die zweite Ableitung dann natürlich an der Stelle $r = r_0$ nehmen.
  - Soweit zum ersten Teil der Aufgabe. Der zweite ist rein mathematisch: Wir müssen die Bindungspotentialfunktion zweimal ableiten. Wir haben

$$U_{Bindg} = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

  - Außerdem noch die Definitionen

$$\left.\frac{dU}{dr}\right|_{r_0} = 0$$

$$U(r_0) = U_0$$

- Damit können wir die unbekannten Konstanten ***A*** und ***B*** eliminieren und ***E*** in den Variablen r_0, U_0, m und n ausdrücken.

Zum zweiten Teil der Aufgabe

- Zunächst ergibt sich durch einmal ableiten

$$\frac{dU}{dr} = n \cdot A \cdot r^{-(n+1)} - m \cdot B \cdot r^{-(m+1)}$$

  - Oder, etwas umgeschrieben

$$\frac{dU}{dr} = \frac{n}{r} \cdot A \cdot r^{-n} - \frac{m}{r} \cdot B \cdot r^{-m}$$

  - Für $r = r_0$ gilt $dU/dr = 0$ und deshalb

$$A \cdot r_0^{-n} = \frac{m}{n} \cdot B \cdot r_0^{-m}$$

- Eingesetzt in die Potentialgleichung erhalten wir für U_0

$$U_0 = -\frac{m}{n} \cdot B \cdot r_0^{-m} + B \cdot r_0^{-m} = \frac{n-m}{n} \cdot B \cdot r_0$$

$$\Rightarrow \quad B \cdot r_0^{-m} = U_0 \cdot \frac{n}{n-m}$$

- Weiter ergibt sich

$$A \cdot r_0^{-n} = -U_0 \cdot \frac{m}{m-n}$$

- Die beiden Parameter ***A*** und ***B*** können damit elimiert werden, wir haben

$$A = -U_0 \cdot r_0^{n} \cdot \frac{m}{m-n}$$

$$B = U_0 \cdot r_0^{m} \cdot \frac{n}{n-m} = -U_0 \cdot r_0^{m} \cdot \frac{n}{m-n}$$

- Zweimal ableiten führt jetzt auf den **E**-Modul.
  - Differentiation der ersten Ableitung von oben ergibt

$$\frac{d^2U}{dr^2} = -\frac{n \cdot (n+1)}{r^2} \cdot A \cdot r^{-n} + \frac{m \cdot (m+1)}{r^2} \cdot B \cdot r^{-m}$$

  - Für den E- Modul brauchen wir den Wert der **2.** Ableitung am Potentialminimum, d.h. bei $r = r_0$. Dabei können wir die obigen Ausdrücke für $A \cdot r_0^{-n}$ und $B \cdot r_0^{-m}$ verwenden und erhalten

$$\frac{d^2U}{dr_0^2} = \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{n \cdot m \cdot (n+1)}{m-n} - \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{n \cdot m \cdot (m+1)}{m-n}$$

$$\frac{d^2U}{dr_0^2} = \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{[-n \cdot (n+1)] + [n \cdot m \cdot (m+1)]}{n-m} = \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{-n^2 \cdot m - nm + nm^2 + nm}{m-n} = \frac{U_0}{r_0^2} \cdot \frac{-n^2 \cdot m + nm^2}{m-n} = \frac{n \cdot m \cdot U_0}{r_0^2}$$

- Mit der Formel für ***E*** von oben erhalten wir das Endergebnis

$$E = \frac{1}{r_0} \cdot \frac{d^2U}{dr^2} = -\frac{n \cdot m \cdot U_0}{r_0^3}$$

  - Das Minuszeichen ist notwendig, da U_0 in dieser Systematik eine negative Größe ist. Der **E**-Modul ist damit **-** wie es sein muss - eine positive Größe.
- Wow! Was für eine Rechnerei für ein einfaches Ergebnis! Das wird uns aber noch öfters begegnen - beim thermischen Ausdehnungskoeffizienten, zum Beispiel (da ist der mathematische Aufwand sogar noch erheblich größer!).

- Der eine oder die andere mag jetzt den Mut verlieren, weil er oder sie für so eine Rechnerei Stunden braucht und sich mehrmals verrechnet.
- Darauf kommt es aber nicht an. Ich brauche auch Stunden und verrechne mich grundsätzlich bei solchen Aufgaben. Entscheidend ist aber nicht wie lange an braucht sondern:

    - Dass man begriffen hat, was man im Prinzip ausrechnen kann (d.h erkennt, wie die Fragestellung in ein rein mathematisches Problem überführt wird).
    - Dass man sich dann die Rechnung oft sparen kann, weil andere das schon gemacht haben. Man muß aber verstehen, was genau die anderen gemacht haben, damit man damit was anfangen kann.