

## 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); physikalisch 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]:

- Berechnen Sie Minima und Maxima der Funktion.
- Bestimmen Sie die Wendestellen der Funktion.
- Betrachten Sie das Verhalten für  $x \rightarrow 0$  und  $x \rightarrow \infty$ .
- 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):

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