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) 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: $f' = 0 \wedge f'' \neq 0$.

$$\begin{aligned} f'(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad 6Ax^{-7} &= 12Bx^{-13} \\ A &= 2Bx^{-6} \\ x^6 &= \frac{2B}{A} \\ \Rightarrow x &= \sqrt[6]{\frac{2B}{A}} > 0 \end{aligned}$$

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow \; 156Bx^{-14} &= 42Ax^{-8} \\ \frac{156}{42}\frac{B}{A} &= \frac{x^{14}}{x^8} = x^6 \\ \Rightarrow \; x &= \sqrt[6]{\frac{26}{7}\frac{B}{A}} > \sqrt[6]{\frac{2B}{A}} \end{aligned}$$

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

c) Grenzwerte:

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

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:

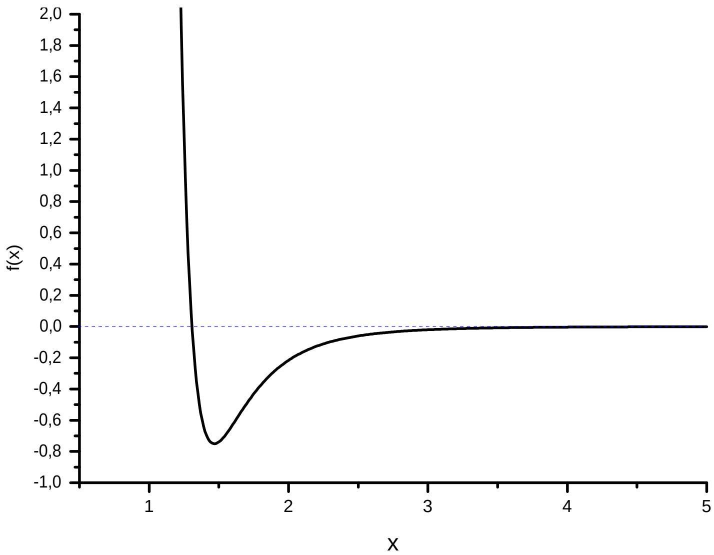

Abbildung 1: Lennard-Jones-(12, 6)-Potential mit $A = 15$ und $B = 75$

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):

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=\beta \;\;\Rightarrow\;\; \mathrm{d}x=\frac{1}{\beta}\mathrm{d}y;$$

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

Damit ergibt sich:

$$\mathscr{F}_0(\eta)=\frac{1}{\Gamma(1)}\int_0^\infty \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(x-\eta)}+1}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{\beta}\int_{-\beta\eta}^\infty \frac{1}{\mathrm{e}^y+1}\,\mathrm{d}y$$

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

$$\mathscr{F}_0(\eta) = \frac{1}{\beta}\int_{-\beta\eta}^{\infty} \frac{1}{\mathrm{e}^y + 1}\,\mathrm{d}y = \frac{1}{\beta}\int_{-\beta\eta}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-y}}{1+\mathrm{e}^{-y}}\,\mathrm{d}y$$

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

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}y} = -\mathrm{e}^{-y} = -z \;\Rightarrow\; \mathrm{d}y = -\frac{1}{z}\mathrm{d}z;$$

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

Damit ergibt sich:

$$\mathscr{F}_0(\eta) = \frac{1}{\beta}\int_{-\beta\eta}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-y}}{1+\mathrm{e}^{-y}}\,\mathrm{d}y = \frac{1}{\beta}\int_{\mathrm{e}^{\beta\eta}}^{0} \frac{z}{1+z}\left(-\frac{1}{z}\right)\mathrm{d}z = \frac{1}{\beta}\int_{0}^{\mathrm{e}^{\beta\eta}} \frac{1}{1+z}\,\mathrm{d}z$$

$$\Rightarrow\; \mathscr{F}_0(\eta) = \frac{1}{\beta}\Big[\ln|1+z|\Big]_0^{\mathrm{e}^{\beta\eta}} = \frac{1}{\beta}\Big\{\ln|1+\mathrm{e}^{\beta\eta}| - \ln(1)\Big\} = \frac{1}{\beta}\ln\big(1+\mathrm{e}^{\beta\eta}\big)$$

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:

$$\int_a^b f(g(x))\,g'(x)\,\mathrm{d}x = \int_{g(a)}^{g(b)} f(y)\,\mathrm{d}y \tag{1}$$

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

$$\Rightarrow\quad g'(x)\,\mathrm{d}x = \mathrm{d}y \tag{2}$$

Dies geschieht erst mal nur rein formal, einfach „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 scheren sich die Physiker nicht weiter darum, daß das bloß symbolisch gemeint sein kann, sondern rechnen munter drauflos: Sie tun so, als ob die „Differentiale“ (was auch immer das sein soll) eigenständige Variablen wären, mit denen man genauso rechnen könnte wie mit Variablen:

$$\Rightarrow\quad \mathrm{d}x = \frac{1}{g'(x)}\mathrm{d}y \tag{3}$$

Mit dieser „Brechstange“ 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 Differentiale:

$$\mathrm{d}x = \frac{1}{g'(x)}\mathrm{d}y = \frac{1}{g'(g^{-1}(y))}\mathrm{d}y = (g^{-1})'(y)\,\mathrm{d}y \tag{4}$$

Genau das ergibt sich aber 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:

$$\int_a^b f(g(x))\,\mathrm{d}x = \int_a^b \frac{f(g(x))}{g'(x)} g'(x)\,\mathrm{d}x \overset{\text{mit (1)}}{=} \int_{g(a)}^{g(b)} \frac{f(y)}{g'(g^{-1}(y))}\mathrm{d}y = \int_{g(a)}^{g(b)} f(y)\,(g^{-1})'(y)\,\mathrm{d}y \qquad (5)$$

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.