Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Übung 3: Atomare Bindung (klassisch-phänomenologisch)

Aufgabe 5: Potentialtopf für Atome (qualitativ)

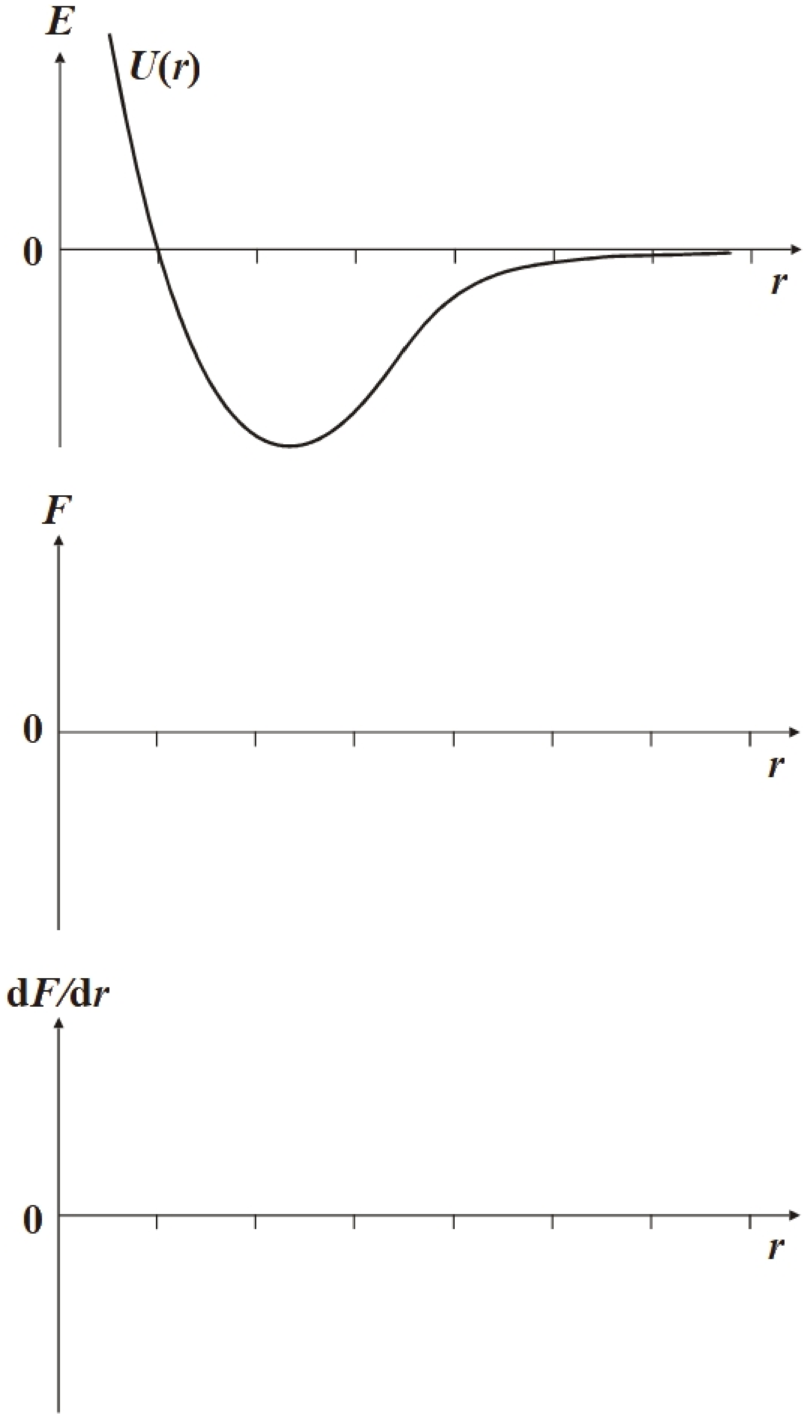

Abbildung 1: Modell für ein atomares Bindungspotential (Potentialtopf)

Wir betrachten das in **Abbildung 1 (oben)** gezeigte Modellpotential (sogenannter Potentialtopf), um die Bindung eines Atoms innerhalb eines Moleküls oder in einem Festkörper qualitativ zu beschreiben. Dieses Atom soll sich innerhalb des Potentialtopfes zunächst beim Gleichgewichtsabstand r_0 befinden.

a) Zeichnen Sie den Gleichgewichtsabstand r_0 in **Abb. 1 (oben)** ein.

Gewöhnlich wird der Gleichgewichtsabstand dadurch ermittelt, daß die wirkenden Kräfte betrachtet werden. Um diese wird es allerdings erst in **Abb. 1 (Mitte)** gehen, dagegen geht es in **Abb. 1 (oben)** nur um die potentielle Energie (das ist die korrekte Bezeichnung für U; es ist aber leider allgemein üblich, es nur Potential zu nennen).

b) * Begründen Sie Ihre Wahl für die Lage des Gleichgewichtsabstands r_0 allein anhand der potentiellen Energie, d. h. ohne Bezug auf wirkende Kräfte. (Hinweise: In dem Modellpotential stecken nur die Wechselwirkungen des betrachteten Atoms mit seinen Nachbarn; Einflüsse von außen sind nicht vorgesehen. Überlegen Sie sich, was es diesbezüglich für das Atom bedeutete, befände es sich nicht an der Gleichgewichtsposition bei r_0, sondern an einer „ausgelenkten“ Position. Relevant ist zudem, daß man unter einem Gleichgewicht denjenigen Zustand versteht, in das sich ein System spontan begibt, wenn man es sich selbst überläßt.)

c) Erläutern Sie, was man unter der Bindungsenergie U_0 des Atoms versteht.

d) Zeichnen Sie die Bindungsenergie in **Abb. 1 (oben)** ein. (Hinweis: $U_0 > 0$.)

e) Geben Sie eine Formel für Kraft $F(r)$ auf das Atom an, dessen potentielle Energie durch das Potential $U(r)$ gegeben ist, und zeichnen Sie $F(r)$ in **Abb. 1 (Mitte)** ein.

f) Wie müßte die Kraftkurve [d. h. $F(r)$] verlaufen, damit das Atom eine harmonische Schwingung um den Gleichgewichtsabstand ausführen kann (wie ein Massenpunkt an einer Feder)?

g) In welchem Bereich des in **Abb. 1** gezeigten Potentials kann eine solche harmonische Schwingung des Atoms auftreten?

h) Zeichnen Sie die Ableitung der Kraftkurve, d. h. $\frac{dF}{dr}$, in **Abb. 1 (unten)** ein. Was bedeutet diese Ableitung? [Hinweis: Betrachten Sie speziell den Fall von Aufgabenteil f).]

i) Was bedeutet der Nulldurchgang von $\frac{dF}{dr}$ für die Aufgabe, das Atom aus dem Bindungsverband herauszulösen?

Wir betrachten ein um ein bestimmtes Δr ausgelenktes Atom, das ungedämpft schwingt.

j) Welche Energie steckt in der Schwingung? Wie kann man das „Energieniveau“ einer Schwingung bei bekannter maximaler Auslenkung in der Potentialkurve anschaulich darstellen?

k) Wo befindet sich das schwingende Atom im Mittel? Wie kann man die mittlere Position ganz einfach im Potentialbild einzeichnen?

l) Wir wiederholen (gedanklich oder praktisch) das Einzeichnen der mittleren Position des Atoms für unterschiedlich starke maximale Auslenkungen. Was bedeutet die Verbindungslinie all dieser mittleren Positionen anschaulich; welche physikalische Größe steckt darin?

m) Nennen Sie weitere Materialparameter (an einer realen Substanz makroskopisch meßbar), die aus dem Potentialtopfmodell abgeleitet werden können. Geben Sie außerdem an, wie bzw. wo diese am Potentialtopf abgelesen bzw. ermittelt werden können.

Aufgabe 6: Schwingungsfrequenz der Bindung

Gegeben sei ein Bindungspotential der Form $U(r) = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$ (Lennard-Jones-Potential; vgl. Aufgabe 1, Übung 1). Wir betrachten ein Material, das sich mit diesem Potential beschreiben läßt (d. h., für das die Verwendung dieses Potentials sinnvolle Ergebnisse liefert), in einem Bereich, in dem es sich vollständig linear-elastisch verhält (konstanter Elastizitätsmodul). In diesem Fall ist es eine sinnvolle Näherung, das komplette Potential durch eine Taylor-Entwicklung bis zum quadratischen Term um das Minimum (bei r_0) zu ersetzen:

$$U(r) = -U_0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2U}{dr^2}(r_0) \cdot (r - r_0)^2 \quad \text{mit} \quad \frac{d^2U}{dr^2}(r_0) = U_0 \frac{nm}{r_0^2}$$

a) Zeigen Sie, daß das obige Ergebnis für die zweite Ableitung von U an der Stelle r_0 korrekt ist.

Die generelle Bewegungsgleichung mit der Lösung für die Resonanz- oder Eigenfrequenz einer harmonischen Schwingung lautet

$$m_\mathrm{A} \frac{d^2x}{dt^2} + k_\mathrm{Fed} x = 0$$

mit m_A = Masse des schwingenden Atoms und k_Fed = Federkonstante. Für die Eigenfrequenz (hier: Kreisfrequenz) ω der Schwingung gilt allgemein

$$\omega = \sqrt{\frac{k_\mathrm{Fed}}{m_\mathrm{A}}}$$

hier speziell

$$\omega = \frac{1}{r_0} \sqrt{\frac{U_0 \cdot n \cdot m}{m_\mathrm{A}}}$$

b) Leiten Sie die erste Gleichung für ω her und zeigen Sie dann, daß für die Federkonstante tatsächlich $k_\mathrm{Fed} = \frac{U_0 \cdot n \cdot m}{r_0^2}$ gilt. [Hinweis: Siehe dazu Aufgabe 5, Aufgabenteil h).]

Wenn wir uns jetzt noch an die bereits in der Vorlesung abgeleitete Beziehung für den Elastizitätsmodul erinnern, können wir ω auch wie folgt ausdrücken:

$$\omega = \sqrt{\frac{E \cdot r_0}{m_\mathrm{A}}}$$

c) Zeigen Sie, daß diese Gleichung stimmt.

d) Bestimmen Sie damit die Größenordnung von ω für ein einfaches Material wie z. B. Silizium. (Hinweis: Werte für den E-Modul findet man im Skript. Die Masse der Atome sollte auch leicht aufzufinden sein.)

e) Was für Konsequenzen könnten sich daraus für die Wechselwirkung von „sehr hochfrequentem Wechselstrom“ (d. h. in Form einer elektromagnetischen Welle) und dem Material ergeben, wenn die Frequenz des Wechselstroms (bzw. der Welle) ebenfalls in dieser Größenordnung liegt? Kennen Sie eine praktische Anwendung dafür?