**Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“**

# Lösungen zur 3. Übung: Atomare Bindung (klassisch-phänomenologisch)

## Aufgabe 5: Potential einer Feder

a) Die Federkonstante ist definiert über das Hooke'sche Gesetz, daß die Längenänderung und die einwirkende Kraft zueinander proportional sind: $\Delta x \sim F$. Daraus kann man auf zwei Weisen eine Proportionalitätskonstante als Quotienten aus diesen beiden Größen definieren (als $\Delta x/F$ oder als $F/\Delta x$). Das angegebene Verhalten, bei doppelter Federkonstante die halbe Auslenkung zu haben, resultiert nur aus der Definition als

$$k_{\text{Fed}} := \frac{F}{\Delta x}.$$

Die Federkonstante beschreibt die Kraft, welche pro Längenänderung erforderlich ist; je größer die Federkonstante, desto mehr Kraft ist für die gleiche Auslenkung erforderlich. Man kann es auch so formulieren: Die Federkonstante gibt an, wie stark sich die Feder dagegen „wehrt“, langgezogen zu werden: $\Delta x = \frac{1}{k_{\text{Fed}}}F$; je größer die Federkonstante, desto geringer die Auslenkung bei gleicher einwirkender Kraft.

b) Die Rückstellkraft $F_\text{R}$ der Feder ist null, wenn sich das Federende an der Position $\bar{x}_0$ befindet, und sie steigt linear mit der Abweichung $\Delta x$ von dieser Position (entsprechend dem Hooke'schen Gesetz). Bei einer Auslenkung der Feder nach unten (was als positiv zählt) wirkt die Rückstellkraft nach oben, und weil das der Richtung der $x$-Achse entgegengesetzt ist, bedeutet es, daß die Rückstellkraft negativ ist. Insgesamt hat man also:

$$F_\text{R}(x) = -k_{\text{Fed}}\Delta x = -k_{\text{Fed}}(x - \bar{x}_0).$$

Die Gewichtskraft der Masse $m$ führt zu einer Dehnung der Feder, die an der neuen Gleichgewichtsposition $x_0$ durch die Rückstellkraft kompensiert wird. Man kann auch sagen, daß durch das Zusammenwirken von Gewichts- und Rückstellkraft nun eine Gesamtkraft $F_{\text{ges}}(x) = F_\text{G} + F_\text{R}(x)$ wirkt und daß diese an der neuen Gleichgewichtsposition null ist: $F_{\text{ges}}(x_0) = 0 = F_\text{G} + F_\text{R}(x_0) = mg - k_{\text{Fed}}(x_0 - \bar{x}_0)$, also gilt

$$k_{\text{Fed}}(x_0 - \bar{x}_0) = mg.$$

Daraus folgt die neue Gleichgewichtsposition als $x_0 = \bar{x}_0 + mg/k_{\text{Fed}}$.

c) Das Bindungspotential der Masse $m$ ist als Arbeit gegen die Gesamtkraft $F_{\text{ges}}$ zu berechnen, die auf die Masse wirkt; symbolisch hat man $U = -\int F_{\text{ges}}\,\mathrm{d}s$ (das „gegen“ wird durch das Minuszeichen berücksichtigt, das Argument von $U$ und die Integralgrenzen werden weiter unten besprochen). Mit dem Ergebnis von Frage b) läßt sich die Gesamtkraft schreiben als

$$F_{\text{ges}}(x) = mg - k_{\text{Fed}}(x - \bar{x}_0) = k_{\text{Fed}}(x_0 - \bar{x}_0) - k_{\text{Fed}}(x - \bar{x}_0) = -k_{\text{Fed}}(x - x_0).$$

Wegen $-\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x} = F_{\text{ges}}$ und $F_{\text{ges}}(x_0) = 0$ liegt das Minimum des Bindungspotentials ebenfalls bei $x_0$. Für die Berechnung des Potentials wird daher zweckmäßigerweise von $x_0$ bis $x$ integriert:

$$U(x) = -\int_{x_0}^{x} F_{\text{ges}}(s)\,\mathrm{d}s = \int_{x_0}^{x} k_{\text{Fed}}(s - x_0)\,\mathrm{d}s = k_{\text{Fed}}\int_0^{x-x_0} s'\,\mathrm{d}s' = \frac{1}{2}k_{\text{Fed}}(x - x_0)^2.$$

Man erhält also eine Parabel mit dem Minimum bei $x_0$ (siehe Abb. 1); die Form der Parabel ist durch die Federkonstante $k_{\text{Fed}}$ bestimmt. (Der Wert des Potentials im Minimum ist hier null; das gilt nicht allgemein, siehe z. B. Aufgabe 6.)

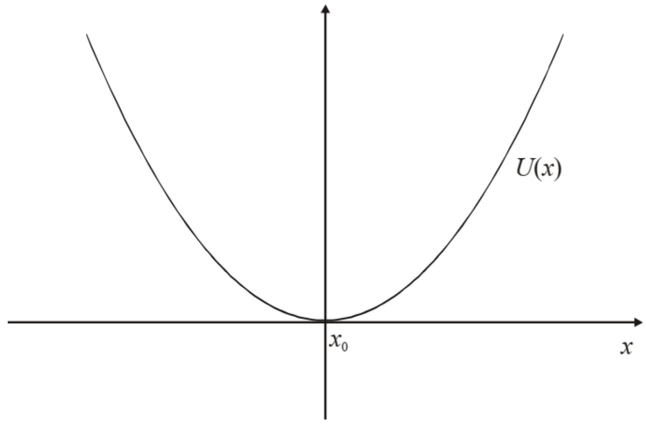


**Abbildung 1:** Potentielle Energie = Bindungspotential der an der Feder befestigten Masse

d) Vollkommene Elastizität bedeutet für die Feder, daß $F \sim \Delta x$ für beliebige Auslenkungen gilt und daß alles vollkommen reversibel ist – insbesondere, daß sich die Feder nicht plastisch verformt. Das bedeutet, daß die durch eine äußere Kraft verursachte Längenänderung $\Delta x$ wieder auf null zurückgeht, sobald die äußere Kraft nicht mehr anliegt.

e) Die Kraft $F_{\text{ges}}(x)$ ergibt sich aus der negativen Ableitung des Potentials $U(x)$ nach $x$ (negativ, weil das Potential zunimmt, wenn man gegen die Kraft arbeitet). Folglich kann man anhand der Steigung des Potentials $U$ an der Stelle $x$ die Kraft $F$ an derselben Stelle $x$ zeichnen:

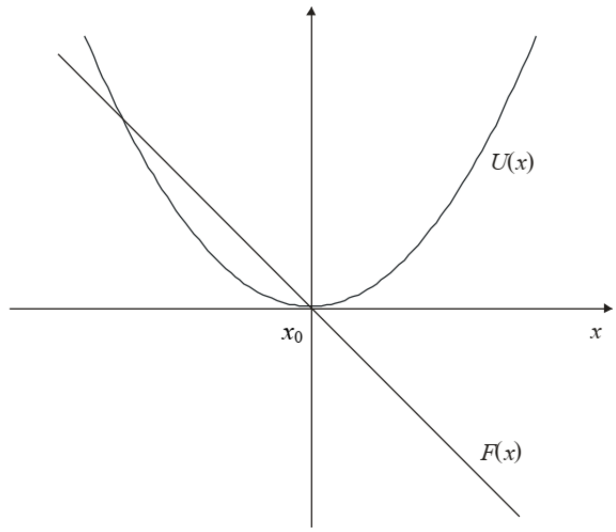


**Abbildung 2:** Bindungspotential der an der Feder befestigten Masse und die darauf wirkende Kraft $F(x) = -\mathrm{d}U/\mathrm{d}x$

f) In der Schwingung steckt die Summe aus der in der Feder gespeicherten potentiellen Energie und der kinetischen Energie der Masse; diese Summe ist konstant (Energieerhaltung):

$$E_{\text{ges}} = \text{const} = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}k_{\text{Fed}}(\Delta x)^2 + \frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 = U(x) + \frac{1}{2}mv^2.$$

In der Potentialkurve kann die Gesamtenergie $E_{\text{ges}}$ als ein Energieniveau mittels einer symbolischen Linie parallel zur $x$-Achse zwischen den beiden Stellen mit maximaler Auslenkung [bei denen $U(x) = E_{\text{ges}}$ ist] eingezeichnet werden. Diese Linie bezeichnet man als Äquipotentiallinie:

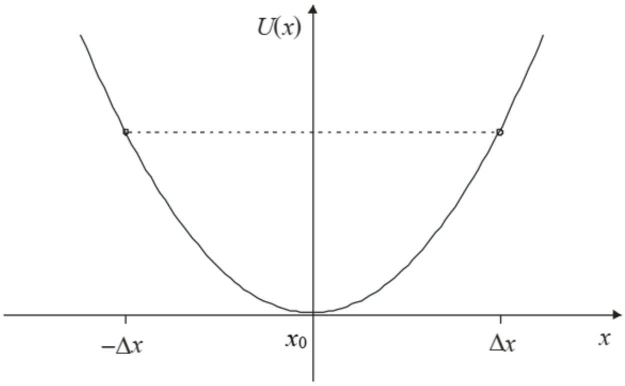


**Abbildung 3:** Bindungspotential der an der Feder befestigten Masse mit Äquipotentiallinie der Maximalauslenkung um $\pm\Delta x$

Die Differenz zwischen $U(x)$ und der Äquipotentiallinie ist die kinetische Energie.

g) Man zeichnet die Äquipotentiallinie ein [siehe f)]. Die mittlere Lage der Masse ist genau auf halber Distanz zwischen den Schnittpunkten der Äquipotentiallinie mit der Potentialkurve.

h) Eine steifere Feder hat eine steilere Kraftkurve, und das Potential ist entsprechend steiler:

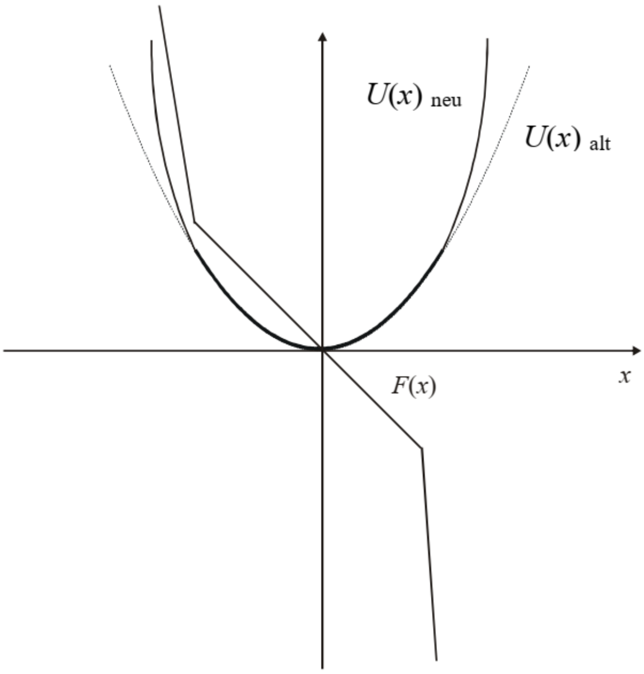


**Abbildung 4:** Bindungspotential der steifer werdenden Feder mit zugehöriger Kraftkurve (schematisch)

i) Statt steiler zu werden, wird das Potential bei dieser Feder flacher, wenn $x$ immer größer wird; wegen $k_{\text{Fed}} \to 0$ nimmt die potentielle Energie im Unendlichen nicht mehr zu:

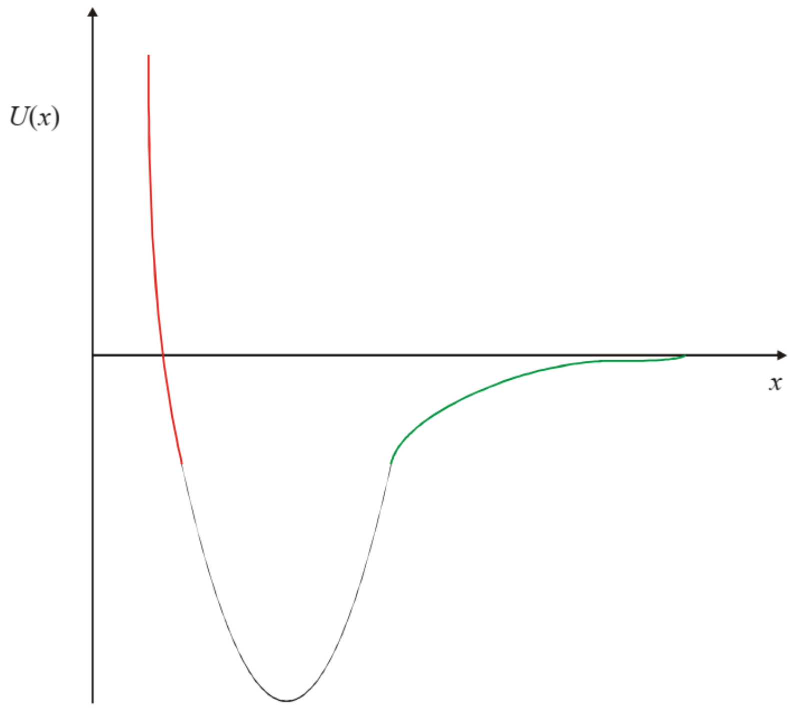


**Abbildung 5:** Bindungspotential der asymmetrischen Feder (schematisch)

j) Die Asymmetrie des Potentialtopfes ist für die im Oszillator steckende Energie belanglos; das Prinzip der Energieerhaltung gilt unabhängig von der Form des Potentialtopfs.

k) Auch hier ist die mittlere Lage der Masse auf halber Distanz zwischen den Schnittpunkten der Äquipotentiallinie mit der Potentialkurve.

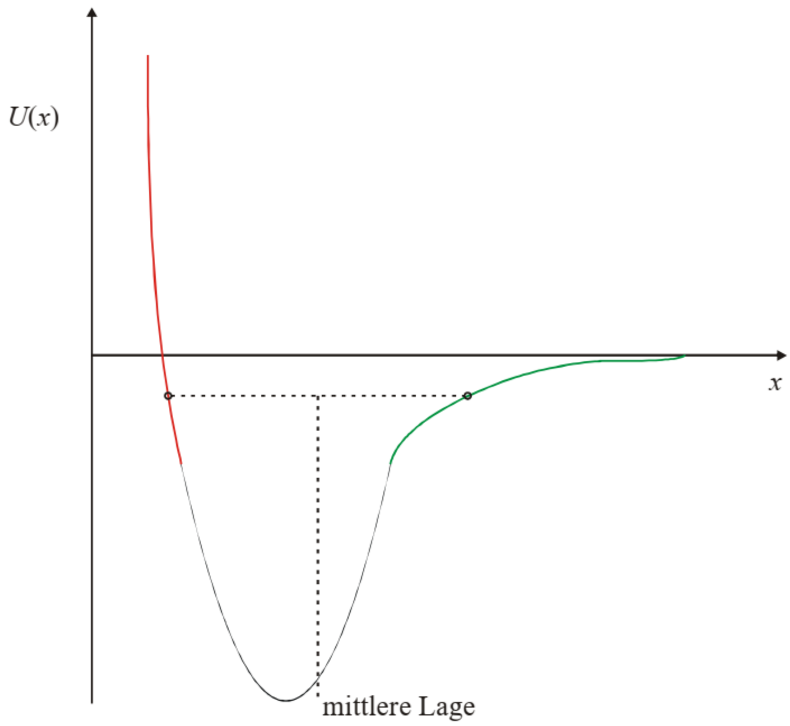


**Abbildung 6:** Bindungspotential der asymmetrischen Feder (schematisch)

l) Ein einzelnes Atom entspricht der angehängten Masse $m$, die Bindungs- und die Abstoßungskräfte, die auf dieses Atom wirken, entsprechen der Feder, und die Nachbaratome, an die das betrachtete Atom gebunden ist, entsprechen der Decke. An der Bewegung des einzelnen betrachteten Atoms ändert sich nichts gegenüber den zuvor betrachteten Fällen – sofern das Bindungspotential den tatsächlichen interatomaren Verhältnissen entspricht.

m) Ein Atom, das sich in einem asymmetrischen Potential bewegt – das kennen wir schon, denn das ist genau unser Lenard-Jones-Potential aus der Vorlesung (und aus Aufgabe 1 vom 1. Übungsblatt). Unterschiedlich starke maximale Auslenkungen kommen bei Atomen durch thermische Anregung zustande, d. h. die Maximalauslenkung steigt mit zunehmender Temperatur.[1] Die Verbindungslinie all dieser mittleren Positionen ergibt damit die thermische Ausdehnung (und also letztlich den Koeffizienten der thermischen Ausdehnung).

## Aufgabe 6: Schwingungsfrequenz der Bindung

a) Berechnung der zweiten Ableitung von $U(r) = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$ an der Stelle $r_0$, wobei $\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r}(r_0) = 0$ und $U(r_0) = -U_0$:

1. Ableitung: $\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r}(r) = nAr^{-n-1} - mBr^{-m-1}$; mit $\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r}(r_0) = 0$ folgt $Ar_0^{-n} = \frac{m}{n}Br_0^{-m}$, und also ist $U(r_0) = \left(-\frac{m}{n} + 1\right) Br_0^{-m} = -U_0$. Damit haben wir $Br_0^{-m} = U_0\frac{n}{m-n}$ und $Ar_0^{-n} = U_0\frac{m}{m-n}$.

2. Ableitung (allgemein): $\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}r^2}(r) = -\frac{n(n+1)}{r^2}Ar^{-n} + \frac{m(m+1)}{r^2}Br^{-m}$; damit haben wir für die 2. Ableitung bei $r_0$: $\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}r^2}(r_0) = -\frac{n(n+1)}{r_0^2}U_0\frac{m}{m-n} + \frac{m(m+1)}{r_0^2}U_0\frac{n}{m-n} = U_0\frac{mn}{r_0^2} \cdot \frac{-n-1+m+1}{m-n} = U_0\frac{mn}{r_0^2}$.

b) Der Standardansatz zur Lösung dieser Differentialgleichung ist $x(t) = x_0 \sin(\omega t)$. Es folgen: $x'(t) = \omega x_0 \cos(\omega t)$, $x''(t) = -\omega^2 x_0 \sin(\omega t)$. Einsetzen der Funktion in die Differentialgleichung $m_\mathrm{A}\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} + k_\mathrm{Fed}x = 0$ ergibt:

$$m_\mathrm{A}(-\omega^2)\, x_0 \sin(\omega t) + k_\mathrm{Fed}\, x_0 \sin(\omega t) = 0$$
$$\left[m_\mathrm{A}(-\omega^2) + k_\mathrm{Fed}\right] x_0 \sin(\omega t) = 0$$

Diese Gleichung ist erfüllt für $m_\mathrm{A}(-\omega^2) + k_\mathrm{Fed} = 0 \;\Rightarrow\; k_\mathrm{Fed} = m_\mathrm{A}\omega^2 \;\Rightarrow\; \omega = \sqrt{\frac{k_\mathrm{Fed}}{m_\mathrm{A}}}$.

Aus $F = -\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r} = -k_\mathrm{Fed}(r - r_0)$ folgt $k_\mathrm{Fed} = \frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}r^2}(r_0) = U_0\frac{mn}{r_0^2} \;\Rightarrow\; \omega = \sqrt{\frac{U_0mn}{r_0^2m_\mathrm{A}}} = \frac{1}{r_0}\sqrt{\frac{U_0mn}{m_\mathrm{A}}}$.

c) Der Elastizitätsmodul ist allgemein als $E = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\varepsilon}$ definiert (mit der mechanischen Spannung $\sigma = \frac{F}{A}$ und der Dehnung $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0}$); im Bereich des linearen Zusammenhangs zwischen $\sigma$ und $\varepsilon$ gilt einfach $\sigma = E\varepsilon$ (der E-Modul ist sozusagen die Federkonstante des Materials).

Falls sich die Kraft $F$ aus einem Bindungspotential $U$ ergibt, kann der Elastizitätsmodul als $E = \frac{1}{r_0}\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}r^2}(r_0)$ geschrieben werden (siehe Vorlesung, Abschnitt 2.1.2). Mit dem Befund von Aufgabe b) zur Bedeutung der zweiten Ableitung von $U$ folgt sofort $E = \frac{1}{r_0}k_\mathrm{Fed}$. Ersetzt man $k_\mathrm{Fed}$ durch $E$ in der ersten Formel für $\omega$, ergibt sich $\omega = \sqrt{\frac{Er_0}{m_\mathrm{A}}}$.

[1] Wie stark genau die Auslenkung zunimmt, werden wir im Zusammenhang mit der Leitfähigkeit noch näher untersuchen!

d) Beispiel Silizium (Si):

- Wegen der Kristallstruktur von Silizium kommt es auf die Richtung an, in der man zieht, denn $E$ ist richtungsabhängig! Anschauliche Begründung: Der Zusammenhang $\varepsilon = \frac{1}{E}\sigma$ zeigt, daß der E-Modul angibt, wie stark sich ein Material dagegen „wehrt“, langgezogen zu werden. Silizium ist kovalent gebunden, es hat gerichtete Bindungen, und das begründet die Richtungsabhängigkeit seiner mechanischen Eigenschaften.

  Der Einfachheit halber nehmen wir zur Abschätzung der Größenordnung den Mittelwert der bekannten Daten, d. h. $E \approx 160$ GPa (vgl. `https://de.wikipedia.org/wiki/Silicium#Mechanische_Eigenschaften`).[2]
- $r_0 = 2{,}4 \cdot 10^{-10}$ m (ein Viertel der Raumdiagonale des Würfels mit $a = 5{,}43 \cdot 10^{-10}$ m).
- $m_\mathrm{A} = 28\,u = 28 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27}$ kg.

Es ergibt sich folgende Schwingungsfrequenz: $f = \frac{\omega}{2\pi} \approx \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{160\,\mathrm{GPa}\cdot 2{,}4\cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}}{28\cdot 1{,}66\cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg}}} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{384\cdot 10^{26}\,\mathrm{N/m}}{46{,}48\,\mathrm{kg}}}$. Zu den Einheiten: 1 N = 1 kg m/s$^2$, damit weiter: $f \approx \frac{1}{2\pi}\sqrt{384/46{,}48} \cdot 10^{13}$ Hz $\approx 4{,}6$ THz. (Zum Vergleich: Die mit Raman-Spektroskopie gemessene Schwingungsfrequenz von Silizium beträgt 15 THz.)

e) Die elektromagnetische Welle könnte ein Resonanzphänomen erzwingen, d. h. die Atome zum Schwingen anregen. Dafür würde man eine elektromagnetische Welle benötigen, deren Frequenz im THz-Bereich liegt.

Das ist auch tatsächlich der Fall: Terahertzstrahlung (spektral gesehen zwischen Infrarotstrahlung und Mikrowellen zu finden) wird zum Beispiel bei den am Flughafen zur Sicherheitskontrolle dienenden Körperscannern (eine Zeitlang als „Nacktscanner“ verschrieen) verwendet.

[2] Der auf der Seite `https://web.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/mw1_ge/kap_7/illustr/t7_1_2.html` angegebene Wert von 107 GPa ist viel zu klein; seine Herkunft ist unklar.