

**Aufgabe 7.1 Frenkel-Kontorowa-Modell**

Das Frenkel-Kontorowa-Modell ist ein einfaches eindimensionales Modell zur Beschreibung der Adsorption von Atomen auf einer periodischen Oberfläche. Die adsorbierten Atome werden dabei als harmonische Federkette (mit Gleichgewichtsabstand  $a$  und Federkonstanten  $K$ ), die Substratoberfläche als periodisches Potential  $V$  mit Periode  $b$  angesehen. Die potentielle Energie ist also:

$$U = \sum_n \left( \frac{1}{2} K (x_{n+1} - x_n - a)^2 + V(x_n) \right), \quad (1)$$

wobei  $x_n$  die Position des  $n$ -ten adsorbierten Atoms beschreibt. Einfachheitshalber nimmt man ein cosinusförmiges Potential  $V(x) = -V_0 \cos(2\pi x/b)$  an. Der Gleichgewichtszustand kann durch den mittleren Abstand  $\tilde{a}$  zwischen den adsorbierten Atomen charakterisiert werden, wobei  $\tilde{a} = \lim_{n \rightarrow \infty} (x_n - x_0)/n$ .

- a) Skizziere den Gleichgewichtszustand für verschiedene Verhältnisse  $\tilde{a}/b$  und  $Ka^2/V_0$ . Welche verschiedenen Arten von Zuständen (Phasen) sind möglich?

Betrachte nun den Fall, wo  $a$  und  $b$  sich um nur sehr wenig unterscheiden ( $a - b = \delta$  mit  $\delta/b \ll 1$ ) und  $V$  schwach ist. Führe dann die Amplitude  $\phi(n)$  ein, welche die Abweichung des  $n$ -ten Atoms von dessen Lage im periodischen (kommensurablen) Zustand beschreibt:

$$x_n = nb + \phi(n) \quad (2)$$

- b) Gehe zum kontinuierlichen Limes über und zeige, dass sich die Energie  $U$  wie folgt schreiben lässt:

$$U = \int dn \left\{ \frac{1}{2} K \left( \frac{d\phi}{dn} - \delta \right)^2 + V[\phi(n)] \right\} \quad (3)$$

Zeige, dass der kommensurable Zustand mit  $\phi \equiv 0$  für  $\delta > \delta_c$  instabil gegenüber einer inkommensurablen Phase mit  $\frac{d\phi}{dn} \sim \delta$  wird. Schätze dazu die Energien der beiden Zustände aus (3) ab.

- c) Schreibe nun die Energie als

$$\Delta U = U - U_{komm} = \int dn \left\{ \frac{1}{2} K \left( \frac{d\phi}{dn} \right)^2 + \tilde{V}[\phi(n)] \right\} - \delta \cdot K \int dn \frac{d\phi}{dn}, \quad (4)$$

relativ zur Energie des kommensurablen Zustandes  $U_{komm}$ , wobei  $\tilde{V} = V - V_{min} = 2V_0 \sin^2(\pi\phi/b)$ . Stelle dann die Euler-Lagrange-Gleichung auf und integriere einmal (ergibt eine Integrationskonstante  $\epsilon$ ). Durch was ist  $\epsilon$  bestimmt?

- d) Wie sehen die Lösungen für die inkommensurable Phase qualitativ aus?
- e) (*fakultativ*) Beschreibe die Wechselwirkung zwischen Diskommensurationen. Betrachte dazu die Abhängigkeit der normierten Energiedifferenz  $\Delta U/N\tilde{a}$  vom Abstand zwischen Diskommensurationen.