Kontinuumsmechanik
Serie 7

Aufgabe 7.1 Frenkel-Kontorowa-Modell

Das Frenkel-Kontorowa-Modell ist ein einfaches eindimensionales Modell zur Beschreibung der Adsorbtion 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:

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

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 $\tilde{a} = \lim_{n\to\infty}(x_n - x_0)/n$.

a) Skizziere den Gleichgewichtszustand für verschiedene Verhältnisse $\tilde{a}/b$ und Ka^2/V_0. Welche verschiedene 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:

$$x_n = nb + \phi(n) \tag{2}$$

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

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

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

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

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 ϵ). Durch was ist ϵ 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.