Aufgabenblatt 5
Donnerstag $15^{15} - 16^{45}$

Sascha Reinhardt

21. November 1999

1 Aufgabe 5.1

Die Bindungsenergie des inneren Atoms erhält man, wenn man alle Potentiale aufaddiert. Es wird ein Koordinatensystem in die Mitte des aufgespannten Rechtecks gesetzt und alle Koordinaten werden darauf bezogen (s. 1). Aus der Abbildung 1

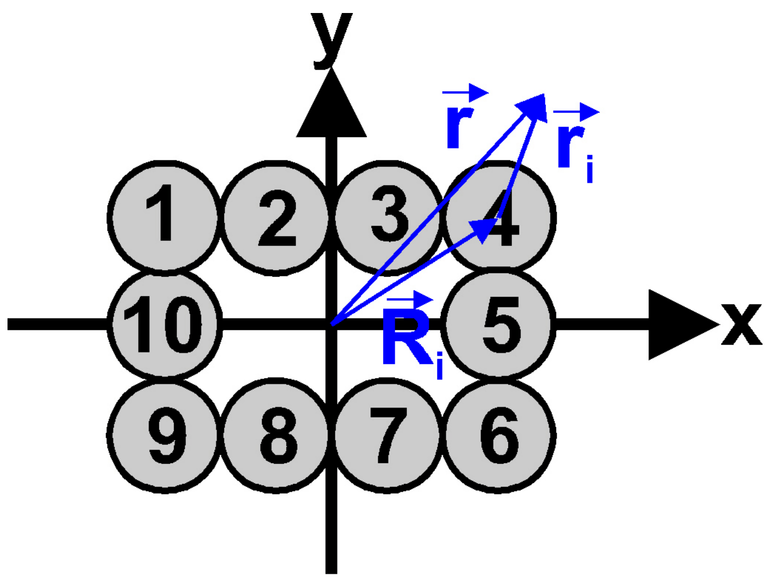

Abbildung 1: Lage der Atome im Koordinatensystem

entnimmt man

$$\vec{r}_i = \vec{r} - \vec{R}_i.$$

Sei der Radius r der Kugeln gleich 1. Man erhält dann das Potential an der Stelle $\vec{r}$ durch

$$\phi(\vec{r}) = -B \sum_{i=1}^{10} \frac{1}{(|\vec{r} - \vec{R}_i|)^6} \tag{1}$$

$$= -B \sum_{i=1}^{10} \frac{1}{\left(\sqrt{(r_x - R_{xi})^2 + (r_y - R_{y_i})^2}\right)^6} \tag{2}$$

Die Positionen der Atome, die das Rechteck aufspannen, sind:

$$R_1 = (-3, 2); R_2 = (-1, 2); R_3 = (1, 2); R_4 = (3, 2); R_5 = (3, 0);$$

$$R_6 = (3, -2); R_7 = (1, -2); R_8 = (-1, -2); R_9 = (-3, -2); R_{10} = (-3, 0)$$

Die drei Positionen des Probeatom von links nach rechts:

$$r_a = (-1, 0); r_b = (0, 0); r_c = (0, 2 - \sqrt{3})$$

Nach Einsetzen der Werte in Gleichung 2 erhält man:

$$\begin{aligned}
\phi(r_a) &= -B \cdot 0,055 \\
\phi(r_b) &= -B \cdot 0.037 \\
\phi(r_c) &= -B \cdot 0.044
\end{aligned}$$

Der Diffusionsweg, der im rechtem Bild abgebildet ist, ist der Weg mit der niedrigeren Barriere. Die Potentialdifferenz ist dann nämlich nur $0,011B$ statt den $0,018B$, die beim anderem Weg zu überwinden wäre.

2 Aufgabe 5.2

Mit Verwendung der Lösungen für das Aufgabenblatt Nr. 3 erhält man für den Wellenvektor $|\mathbf{q}_{max}|$ folgende Werte:

Ebene (hkl)	Abstand d	Gittervektor G [hkl]	$\lvert\mathbf{q}_{max}\rvert$ $\frac{G}{2}$
(100)	a	$\frac{2\pi}{a}$	$\frac{\pi}{a}$
(110)	$a/\sqrt{2}$	$\frac{2\pi\sqrt{2}}{a}$	$\frac{\pi\sqrt{2}}{a}$
(111)	$a/\sqrt{3}$	$\frac{2\pi\sqrt{3}}{a}$	$\frac{\pi\sqrt{3}}{a}$

3 Aufgabe 5.3

Für jede Achse im Gitter wird vorerst einmal eine Bewegungsgleichung aufgestellt:

$$
\begin{aligned}
M\ddot{u}_{s,r} &= -C(u_{s,r-1} - u_{s,r}) - C(u_{s,r+1} - u_{s,r}) && (3)\\
&= -C(u_{s,r-1} + u_{r,r+1}) + 2Cu_{s,r} && (4)\\
&= -C(u_{s,r}\exp(-q_x a) + u_{s,r}\exp(q_x a)) + 2Cu_{s,r} && (5)\\
&= 2Cu_{s,r}(1 - \cos(q_x a)) && (6)
\end{aligned}
$$

Für die andere Achse ganz analog:

$$
\begin{aligned}
M\ddot{u}_{s,r} &= -C(u_{s-1,r} - u_{s,r}) - C(u_{s+1,r} - u_{s,r}) && (7)\\
&= 2Cu_{s,r}(1 - \cos(q_y a)) && (8)
\end{aligned}
$$

Für die $[1,0]$- Richtung erhält man dann:

$$
\begin{aligned}
M\omega^2 &= 2C(1 - \cos(q_x a)) && (9)\\
\omega(q) &= 2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\left(\frac{q_x a}{2}\right)\right| && (10)
\end{aligned}
$$

Diese Ergebnis ist identisch mit einer linearen Kette. Die $[1,1]$- Richtung erhält man durch Addition der beiden Bewegungsgleichungen:

$$
\begin{aligned}
\ddot{u}_{s,r}M\sqrt{2} &= \sqrt{(2Cu_{s,r}(1 - \cos(q_y a))^2 + (2Cu_{s,r}(1 - \cos(q_x a))^2} && (11)\\
M\omega^2\sqrt{2} &= 2C\sqrt{(1 - \cos(q_y a))^2 + (1 - \cos(q_x a))^2} && (12)\\
\omega &= \sqrt{\frac{\sqrt{2}C}{M}\sqrt{(1 - \cos(q_y a))^2 + (1 - \cos(q_x a))^2}} && (13)
\end{aligned}
$$

Die Phasengeschwindigkeit ist definiert als

$$v = \frac{\omega}{q}$$

Für den langwelligen Grenzfall geht q gegen Null, man entwickelt also die Dispersionsrelationen um Null. Bei der $[1,0]$- Richtung erhält man

$$
\begin{aligned}
v &= \frac{2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\sin\left(\frac{q_x a}{2}\right)\right|}{q_x} && (14)\\
&\approx \frac{2\sqrt{\frac{C}{M}}\left|\frac{q_x a}{2}\right|}{q_x} && (15)\\
&= \sqrt{\frac{C}{M}}a && (16)
\end{aligned}
$$

Für die $[1,1]$- Richtung wird zuerst die Geschwindigkeit entlang den Achsen berechnet und dann addiert, man erhält (analog zu $[1,0]$):

$$
\begin{aligned}
v_x &= \sqrt{\frac{C}{M}}a && (17)\\
v_y &= \sqrt{\frac{C}{M}}a && (18)\\
v &= \sqrt{v_x^2+v_y^2} && (19)\\
&= \sqrt{\frac{2C}{M}}a && (20)
\end{aligned}
$$