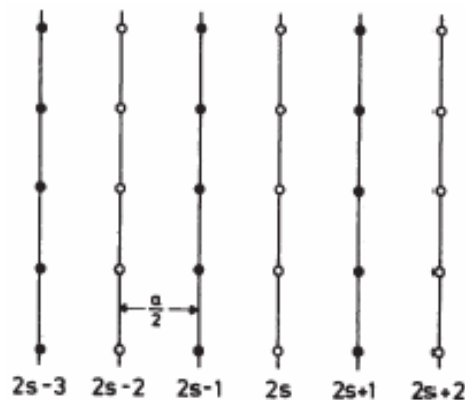


Übungen zur Vorlesung Oberflächenphysik 10

06. 05. 2008

1) Gitterschwingungen im Gitter mit zweiatomiger Basis:

Betrachten Sie Gitterschwingungen in einem Gitter mit zweiatomiger Basis. Die schwingenden Netzebenen seien bezeichnet wie in der Abbildung. Der Abstand benachbarter, also verschiedene Atome enthaltender Netzebenen sei $a/2$. Berücksichtigt werden soll nur die Wechselwirkung unmittelbar benachbarter Ebenen, und zwar durch eine Kopplungskonstante c . Es sollen ganze Netzebenen gegeneinander schwingen (Longitudinalwelle).



- Stellen Sie die Bewegungsgleichungen der Ebene $2s + 1$ mit der Masse M_1 und der Ebene $2s$ mit der Masse M_2 auf. Auslenkungen sind dabei mit u_{2s} usw. zu bezeichnen.
- Setzen Sie die Ansätze

$$u_{2s+1} = A e^{i(q \frac{2s+1}{2} - \omega t)}$$

$$u_{2s} = B e^{i(qsa - \omega t)}$$

in die Differentialgleichungen aus a) ein und zeigen Sie, dass für die Kreisfrequenz ω gilt:

$$\omega^2 = c \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm c \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2 \frac{qa}{2}}$$

- Diskutieren Sie das Ergebnis von b) und zeichnen Sie die beiden Zweige der Dispersionsrelation. Berechnen Sie dafür auch die Werte von ω im Zonenzentrum ($q = 0$) und am Rand der Brillouinzone ($q = \pm\pi/a$).
- Leiten Sie aus dem Amplitudenverhältnis A/B her, dass die verschiedenen Netzebenen in den beiden Zweigen im Zonenzentrum gegeneinander bzw. in die gleiche Richtung schwingen.
- Zeigen Sie entsprechend, dass am Zonenrand jeweils eines der beiden Untergitter in Ruhe bleibt.
- Vergleichen Sie die Dispersionsrelation aus b) mit derjenigen longitudinaler Gitterschwingungen in Gittern mit einer Atomsorte, also $M_1 = M_2$.

2) IR-Spektroskopie

- Begründen Sie die Symmetrie-Auswahlregel für IR-Aktivität!
- Welche Schwingungen von CCl_4 sind IR-aktiv?

Weiterführende Literatur:

- H. Lüth „Surfaces and Interfaces of Solids“, 2nd Edition, Springer-Verlag Berlin, 1993.
- H. Ibach, „Electron energy loss spectroscopy: the vibration spectroscopy of surfaces“
Surface Science 299/300 (1994) 116.
- L. Vattuone, M. Rocca, U. Valbusa, “On the equivalence of EELS and IRAS: the case of O-Ag(110)”, Surface Science 369 (1996) 336.
- V. Shklover, F.S. Tautz, R. Scholz, S. Sloboshanin, M. Sokolowski, J.A. Schaefer, E. Umbach, “Differences in vibronic and electronic excitations of PTCDA on Ag(111) and Ag(110)” Surface Science 454- 456 (2000) 60.