

**Aufgabe 3. Kristallstruktur von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$**  (8 Punkte)

$\text{La}_2\text{CuO}_4$  besitzt eine „tetragonal raumzentrierte“ Struktur mit einer quaderförmigen konventionellen Gitterzelle  $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{x} = \xi_1 \mathbf{a}_1 + \xi_2 \mathbf{a}_2 + \xi_3 \mathbf{a}_3, \boldsymbol{\xi} \equiv (\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in [0, 1]^3\}$  und  $\mathbf{a}_1 = a \hat{\mathbf{e}}_1, \mathbf{a}_2 = a \hat{\mathbf{e}}_2, \mathbf{a}_3 = c \hat{\mathbf{e}}_3$  ( $a \simeq 3,8 \text{ \AA}, c \simeq 13,2 \text{ \AA}$ ). In der konventionellen Zelle sind die Cu-, O- und La-Atome bei den folgenden  $\boldsymbol{\xi}$ -Werten angeordnet:

Cu bei  $(0, 0, 0)$  und  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

O bei  $(\frac{1}{2}, 0, 0), (0, \frac{1}{2}, 0), (0, 0, \frac{1}{6}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}), (1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}), (1, 1, \frac{5}{6})$

La bei  $(0, 0, \frac{1}{3}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{6}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{5}{6}), (1, 1, \frac{2}{3})$ .

- Skizzieren Sie diese Struktur durch Darstellung der Atomverteilung in einer (oder wenigen) konventionellen Gitterzelle(n).
- Wie viele Formeleinheiten hat man pro konventioneller Gitterzelle bzw. primitiver Elementarzelle?
- Überzeugen Sie sich davon, dass jedes Kupferion von einem (in  $c$ -Richtung leicht gestreckten) Oktaeder aus 6 Sauerstoffionen umgeben ist.
- Überzeugen Sie sich davon, dass sich im Abstand  $c/2$   $\text{CuO}_2$ -Schichten ausbilden und bestimmen Sie Gitter und Basis dieser zweidimensionalen Schichten.

**Aufgabe 4. Welche Struktur hat die niedrigste Energie?** (12 Punkte)

Betrachten Sie eine dreidimensionale periodische Anordnung von makroskopisch vielen Edelgas-Atomen, die mittels Lennard-Jones-Kräften miteinander wechselwirken. Das effektive Potential der Atome ist somit durch

$$V_f(\mathbf{y}) = \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} v_{\text{LJ}}(|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_l|) \quad , \quad v_{\text{LJ}}(y) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{y} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{y} \right)^6 \right]$$

gegeben. Hinsichtlich der Gleichgewichtslage des effektiven Potentials ( $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0$ ) nehmen wir an, dass eine Kristallstruktur mit einatomiger Basis und einem Bravais-Gitter

$$\Lambda = \left\{ \mathbf{m} \mid \mathbf{m} = \sum_{l=1}^3 \mu_l \mathbf{a}_l \quad , \quad \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{Z}^3 \right\}$$

der sc-, bcc- oder fcc-Form vorliegt. Die primitiven Vektoren  $\mathbf{a}_l$ , deren Länge durch die Gitterkonstante  $a$  festgelegt wird, sind aus der Vorlesung bekannt.

- Zeigen Sie für die Energie  $E_0$  pro Atom in den drei genannten Kristallstrukturen:

$$E_0(a) = 2\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{a} \right)^{12} K_{12} - \left( \frac{\sigma}{a} \right)^6 K_6 \right] \quad , \quad K_n \equiv \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{0}} (|\mathbf{m}|/a)^{-n} \quad .$$

- Bestimmen Sie den Wert  $a = a_0$ , für den  $E_0(a)$  minimal ist. Zeigen Sie:  $E_0(a_0) = -\frac{1}{2}\varepsilon(K_6)^2/K_{12}$ .
- Bestimmen Sie  $K_6, K_{12}$  und somit auch  $a_0$  und  $E_0(a_0)$  *numerisch* für das sc-, das bcc- und das fcc-Gitter. Für welche Gitterstruktur ist  $E_0(a_0)$  am niedrigsten? **Hinweis:** Erläutern Sie kurz das von Ihnen verwendete numerische Verfahren. Senden Sie das Computerprogramm per Email ein. **Alternative:** Schätzen Sie die genannten Größen analytisch ab.