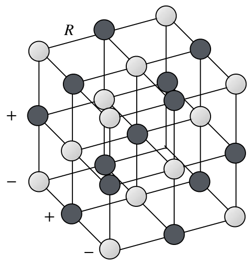
# Blatt 01: Einführung

Ausgabe: Montag, 27.04.20; Besprechung: Montag, 04.05.20

**Aufgabe 1** Ionische Kristalle

Betrachten Sie einen flächenzentrierten kubischen NaCl Kristall, bestehend aus $Na^+$ (dunkelgraue Gitterpunkte) und $Cl^-$ Ionen (hellgraue Gitterpunkte in der Skizze der Einheitszelle).




(1.a) Zeigen Sie, dass die Coulomb-Wechselwirkung eines Ions mit allen anderen zur Energie

$$E_{\mathrm{Coul}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{a_{\mathrm{M}}}{R} \tag{1}$$

führt. Dabei ist $R$ der Abstand zwischen zwei Ionen und $a_{\mathrm{M}}$ die Madelung Konstante. Finden Sie einen formalen Ausdruck für $a_{\mathrm{M}}$ und zeigen Sie dabei, dass $a_{\mathrm{M}}$ nur von der Gitterstruktur abhängig ist.

Die Berechnung der Madelung Konstante $a_{\mathrm{M}}$ ist im Allgemeinen nicht trivial.

(1.b) Bei der sogenannten Evjen-Methode berücksichtigt man die Atome auf den Grenzflächen eines Würfels (mit beliebieger Kantenlänge $nR$, $n = 2, 3, \ldots$) mit einem Korrekturfaktor $1/2$, die Atome auf den Kanten mit einem Faktor $1/4$ und die Atome an den Ecken mit einem Faktor $1/8$. Berechnen Sie damit $a_{\mathrm{M}}$ für einen würfelförmigen Kristall der Kantenlänge $4R$. Für die Rechner-Affinen: Finden Sie computergestützte Lösungen für größere Kantenlängen? (Hinweis: für den unendlich ausgedehnten Würfel ist $a_{\mathrm{M}} = 1.748$).

**Aufgabe 2** Wechselwirkungsenergie: Bulk versus Grenzfläche

Betrachten Sie ein homogenes System im Volumen $V = L^3$, in dem Wechselwirkungen auf einer Längenskala $\xi \ll L$ (effektiv) abgeschirmt werden. Argumentieren Sie, dass die Wechselwirkungsenergie im Bulk wie $L^3\xi^3$ skaliert, während die Wechselwirkungsenergie an der Grenzfläche des Volumens wie $L^2\xi^4$ skaliert.

**Aufgabe 3** Bewegungsumkehr

Betrachten Sie ein klassisches $N$-Teilchensystem mit Hamiltonian $H$, Koordinaten $\mathbf{Q}(t)$ und Impulsen $\mathbf{P}(t)$.

(3.a) Zeigen Sie: Falls eine Trajektorie $\{\mathbf{Q}(t), \mathbf{P}(t)\}$ unter $H$ für $t \in [0, \tau]$ existiert, dann gibt es auch $\{\mathbf{Q}(t), \mathbf{P}(t)\}$ für $t \in [\tau, 2\tau]$ mit $\mathbf{Q}(t) = \mathbf{Q}(2\tau - t)$ und $\mathbf{P}(t) = -\mathbf{P}(2\tau - t)$.

Betrachten Sie nun ein quantenmechanisches $N$-Teilchensystem mit Hamiltonian $H$ und Wellenfunktion $|\psi(t)\rangle$.

(3.b) Welche Operation führt hierbei zu einer „Rückwärtsbewegung“?

**Aufgabe 4** Kontinuitätsgleichung

Betrachten Sie ein Kontinuum von Teilchen das sich im Raum bewegt und leiten Sie die Kontinuitätsgleichung für den Massetransport (Gleichung (1.3) im Vorlesungsskript)

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0 \tag{2}$$

her. Welche Form besitzt die Kontinuitätsgleichung für den Energietransport und den Impulstransport (hier ist ein qualitatives Argument ausreichend)?