

# Hausaufgabe zur Computerphysik (physik441)

## SS 2023

### Hausaufgabe 1

19. April - 3. Mai 2023
-------------------------

Abgabe: Mittwoch, den 3. Mai 2023 bis 23:59 Uhr über eCampus

---

Beachten Sie, dass **zwei zusätzliche Punkte** für die Kommentierung und den Stil des Codes vergeben werden.

## Madelung-Energie des Natriumchlorid-Kristalls

Berechnen Sie mit einer relativen Genauigkeit von  $10^{-5}$  die elektromagnetische Energie eines einzelnen Gitterbausteins  $i$  im unendlich ausgedehnten, dreidimensionalen Natriumchlorid (NaCl) - Kristall durch Aufsummation der Einzelbeiträge:

$$V_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e_i e_j}{r_{ij}} \quad (1)$$
$$i = (i_1, i_2, i_3), \quad j = (j_1, j_2, j_3).$$

$e_{i,j} = \pm e$  bezeichnen die Ladungen an den entsprechenden Gitterplätzen  $i, j$  mit der Einheitsladung  $e$  und

$$r_{ij} = a \sqrt{(i_1 - j_1)^2 + (i_2 - j_2)^2 + (i_3 - j_3)^2} \quad (2)$$

mit dem Gitterabstand  $a$ .

1. (4 Punkte) Wählen und begründen Sie einen Algorithmus, um die numerische Berechnung auszuführen. Stellen Sie dabei sowohl eine Verbindung zum physikalischen Hintergrund (Kristallstruktur), als auch zum mathematischen (Konvergenz) her.  
(Hinweis: [1, 2].)
2. (10 Punkte) Implementieren Sie den Algorithmus. Verifizieren Sie Ihr Verfahren durch Vergleich mit dem Wert aus der Literatur.

## Flacher Kristall

3. (4 Punkte) Berechnen Sie die Energie auch für einen flachen NaCl-Kristall, aber immer noch in drei Dimensionen: Die Summation ist also mit der Zusatzbedingung  $j_3 = i_3$  durchzuführen.

## Literatur

- [1] H. M. Evjen, "On the stability of certain heteropolar crystals," *Phys. Rev.*, vol. 39, pp. 675–687, Feb 1932.

- [2] D. Borwein, J. M. Borwein, and K. F. Taylor, “Convergence of lattice sums and madelung’s constant,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 26, no. 11, pp. 2999–3009, 1985.