INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Technische Universität Braunschweig

Prof. Dr. W. Brenig
M.Sc. Boris Celan

Physikalische Rechenmethoden I — WiSe 2016/17

3. Übungsblatt — Abgabe: Do, 09.11.2016 bis 11.30 Uhr, Kasten neben A316

Übungsblätter gibt es unter `https://www.tu-bs.de/theophys/edu/wise-1617/rm1617`.

7. **Ionische Bindung im Festkörper, bedingt konvergente Reihen und Riemannscher Umordnungssatz (8 Punkte)**
Die Coulombwechselwirkung ($E_{\text{Coulomb}} \propto \frac{q_1 q_2}{r}$) zwischen geladenen Atomen bzw. Molekülen ist eine mögliche Ursache, welche zur Bildung von festen Körpern führen kann.
Diese ist insbesondere bei den Salzen wie dem Natrumchlorid NaCl (gewöhnliches Kochsalz) wichtig. Dabei sind die Natriumatome positiv (Na^+, $q_1 = +1$) und die Chloratome negativ (Cl^-, $q_2 = -1$) geladen.
Wir betrachten eine unendliche lineare Kette von NaCl und definieren die Summe aller elektrostatischen Wechselwirkungen eines Ausgangsatoms im Ursprung mit seinen Nachbarn als α (bekannt als Madelung Konstante)

$$\alpha = {\sum_{r=-\infty}^{\infty}}' \frac{(-1)^r}{|r|} . \tag{1}$$

Wobei r der (positive) Abstand zwischen dem Ausgangsatom und seinem r-ten Nachbarn ist (Abstand zwischen nächsten Nachbarn soll 1 sein). Der Strich bei der Summe $\sum'$ zeigt an, dass der Term mit $r = 0$ nicht in der Summe enthalten ist (das Ausgangsatom wechselwirkt nicht mit sich selbst).

   (a) Zeigen Sie, dass bei der unendlichen linearen Kette von NaCl, α sich darstellen lässt als

   $$\alpha = -2\left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} \pm \dots\right) .$$

   Visualisieren Sie dazu die einzelnen Reihenglieder anhand einer Skizze der linearen Kette.

   (b) Zeigen Sie, dass der Grenzwerte der Reihe in (1) gegeben ist durch

   $$\alpha = -2 \ln 2$$

   Der negative Wert von α zeigt an, dass Kochsalz tatsächlich stabil ist als Festkörper (dies kann man einfacher durch einen Blick in die Küche rausfinden!).

   (c) Wir sortieren etwas um und schreiben die Reihe für α in Gleichung (1) als

   $$\begin{aligned} -\frac{\alpha}{2} &= \left(1 - \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4} + \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{6}\right) - \frac{1}{8} + \left(\frac{1}{5} - \frac{1}{10}\right) - \frac{1}{12} \pm \dots \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{4} + \frac{1}{6} - \frac{1}{8} + \frac{1}{10} - \frac{1}{12} \pm \dots \end{aligned}$$

   Geben Sie den Wert für α mit der neu umsortierten Reihe an.
   Dies ist nicht der gleiche Wert wie zuvor!

Bitte wenden! →

(d) Allgemein lässt sich zeigen, dass der Grenzwert von (1) umgeordnet werden kann zu

$$\alpha = -2 \left\{ \ln(2) + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{p}{q}\right) \right\} .$$

Wobei p die Zahl der positiv aufeinanderfolgenden Glieder ist und q die Anzahl der negativen aufeinanderfolgenden Glieder in der Umordnung.
Warum sollte dies einem als Physiker im wahrsten Sinne des Wortes den Appetit verderben? (Wo liegt das Problem? Welche Eigenschaft der Reihe ermöglicht dies?)

(e) Festkörper sind idR nicht geladen. Ausgehend davon überlegen Sie sich eine Reihendarstellung, so dass die einzelnen Reihenglieder neutral sind (bislang waren sie es nicht). Die Reihe sollte folgende Form haben

$$\alpha = -1 - 2\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{12} + \frac{1}{20} - \frac{1}{30} \pm \cdots\right) .$$

i. Skizzieren Sie in der linearen Kette die einzelnen Reihenglieder.
ii. Geben Sie α in einer geschlossenen Form an.
iii. Zeigen Sie, dass die auftretende Reihe absolut konvergiert.
Hinweis: Sie können das Ergebnis von Übungszettel 1, Aufgabe 2(a) benutzen.

8. **Vollständige Induktion und Restglied (7 Punkte)**

(a) Gegeben Sei die geometrische Reihe mit $|x| < 1$

$$\sum_{n=0}^{N} x^n = \frac{1 - x^{N+1}}{1 - x} .$$

Beweisen Sie diese Gleichung mithilfe der vollständigen Induktion.
Gehen Sie dabei wie folgt vor:

i. Zeigen Sie, dass die Gleichung für einen Startwert N_0 gilt
(hier $N_0 = 1$, Induktionsanfang).
ii. Zeigen Sie, dass sofern die Gleichung für ein festes N gilt, Sie auch für das drauffolgende $N + 1$ gilt ($N \to N + 1$, Induktionsschritt).

(b) Das Restglied $|R_n(x)| = \frac{1}{(n+1)!} \left| \frac{\mathrm{d}^{n+1} f(\xi)}{\mathrm{d}x^{n+1}} \right| \left| (x - x_0)^{n+1} \right|$ mit $\xi \in]x_0, x[$ einer Funktion $f(x)$ mit dem dazugehörigen Taylorpolynom $T_n(x)$ um x_0 kennen Sie aus der Vorlesung. Gegeben sei eine Integraldarstellung des Restgliedes

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N} \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n + \int_{x_0}^{x} \frac{1}{n!} (x - t)^n f^{(n+1)}(t)\, \mathrm{d}t .$$

i. Zeigen Sie, dass die Darstellungen äquivalent sind.
ii. Entwickeln Sie die Exponentialfunktion $f(x) = e^x$ als Taylorpolynom um $x_0 = 0$ einmal bis zum linearen Term in x und einmal bis zum quadratischen Term in x.
iii. Geben Sie gerundet die Abweichung der Taylorpolynome von den Funktionswerten für $x = 0, x = 0.1, x = 1$ und $x = 10$ an.

Bitte wenden! →

iv. Berechnen Sie für das lineare Taylorpolynom das Restglied.
Geben Sie für $x = 0, x = 0.1, x = 1$ und $x = 10$ gerundet die Werte des Restgliedes an.
Hinweis: Für das entstehende Integral können Sie aus der Produktregel die partielle Integration herleiten und benutzen

$$\Big[u(x)v(x)\Big]_{x_0}^{x_1} = \int_{x_0}^{x_1} u'(x)v(x)\,\mathrm{d}x + \int_{x_0}^{x_1} u(x)v'(x)\,\mathrm{d}x\,.$$

9. **Riemannsumme (5 Punkte)**
Gegeben Sei das Integral

$$\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x\,.$$

(a) Approximieren Sie das Integral mit zwei Riemannsummen einer Ober- und einer Untersumme. Zerlegen Sie das Integral dazu in vier gleich große Abschnitte. Geben Sie gerundete Werte für das Ergebnis an.

(b) Bestimmen Sie mithilfe einer Riemannsumme den exakten Wert des Integrals.
Hinweis: Für die auftretende Summe dürfte folgende Identität nützlich sein - benutzen Sie vollständige Induktion um sie zu beweisen

$$\sum_{n=1}^{N} n^2 = \frac{1}{3}N^3 + \frac{1}{2}N^2 + \frac{1}{6}N\,.$$