

## Übungen zur Computational Physics

### Aufgabe 3 — Volumen der Einheitszelle des reziproken Gitters

Gegeben sei ein Bravais-Gitter. Zeigen Sie, dass für das Volumen einer primitiven Einheitszelle  $V_{\text{pEZ}}$  und das Volumen einer primitiven Einheitszelle des reziproken Gitters  $V_{\text{rEZ}}$  gilt:

$$V_{\text{pEZ}} V_{\text{rEZ}} = (2\pi)^3 \quad !$$

### Aufgabe 4 — Orthogonalität und Vollständigkeit

Zeigen Sie, dass für den zu beliebigen reziproken Gittervektoren  $\mathbf{G}$  definierten Satz von Funktionen  $\{e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}\}$  die Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelationen

$$\frac{1}{V_{\text{pEZ}}} \int_{\text{pEZ}} d^3r e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}'\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$$

bzw.

$$\frac{1}{V_{\text{pEZ}}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}'} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

gelten!

Hinweis:

Benutzen Sie die diskrete Fourier-Zerlegung einer beliebigen gitterperiodischen Funktion  $f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i)$ :

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad \text{mit} \quad f_{\mathbf{G}} = \frac{1}{V_{\text{pEZ}}} \int_{\text{pEZ}} d^3r e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} f(\mathbf{r}).$$