Übungsaufgaben zur Vorlesung
„Einführung in die Theorie der Kondensierten Materie“
Prof. Dr. Nils Blümer
KOMET 337, Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität

Aufgabenblatt 01, Abgabe: 04. 11. 2010

Aufgabe 1. Das zentrierte Rechteckgitter (6 Punkte)

Das zentrierte Rechteckgitter ist ein zweidimensionales, durch die „primitiven“ Vektoren $\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{e}}_1$ und $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{e}}_1 + \lambda\hat{\mathbf{e}}_2)$ mit $0 < \lambda \neq 1$ definiertes Bravais-Gitter. Hierbei gilt wie üblich $\hat{\mathbf{e}}_1 = \binom{1}{0}$ und $\hat{\mathbf{e}}_2 = \binom{0}{1}$ und ist $a > 0$ eine Gitterkonstante.

(a) Zeichnen Sie das zentrierte Rechteckgitter.

(b) Bestimmen Sie sein reziprokes Gitter. Welchem Bravais-Gitter entspricht dieses reziproke Gitter?

(c) Zeichnen Sie die erste Brillouin-Zone des zentrierten Rechteckgitters.

Aufgabe 2. Born-Oppenheimer-Näherung (14 Punkte)

Gegeben sei der folgende Hamilton-Operator für das Problem zweier gekoppelter eindimensionaler harmonischer Oszillatoren:

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{\mathrm{p}}_1^2}{2M} + \frac{\hat{\mathrm{p}}_2^2}{2m} + \tfrac{1}{2}Kx_1^2 + \tfrac{1}{2}k(x_1 - x_2)^2 \quad , \quad \hat{\mathrm{p}}_j = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j} \quad (j = 1, 2) \quad .$$

(a) Bestimmen Sie die exakten Eigenwerte von $\hat{\mathrm{H}}$.

Wir nehmen nun an, dass $m \ll M$ gilt, so dass die Born-Oppenheimer-Näherung anwendbar wird.

(b) Lösen Sie das Eigenwertproblem von $\hat{\mathrm{H}}$ in Born-Oppenheimer-Näherung, indem Sie $\hat{\mathrm{H}}_1 \equiv \hat{\mathrm{p}}_1^2/2M$ als „atomare“ kinetische Energie auffassen, zunächst vernachlässigen und das „elektronische“ Problem für $\hat{\mathrm{H}}_0 \equiv \hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}_1$ für einen festen Parameter x_1 lösen [d. h. die Eigenwerte $E_{n_2}(x_1)$ von $\hat{\mathrm{H}}_0$ bestimmen, $n_2 \in \mathbb{N}$] und anschließend das Eigenwertproblem für den Hamilton-Operator $\hat{\mathrm{H}}_{\mathrm{BO}} \equiv \hat{\mathrm{H}}_1 + E_{n_2}(x_1)$ lösen.

(c) Vergleichen Sie die Näherungslösung aus (b) mit der exakten Lösung aus (a): (Inwiefern) ist die Born-Oppenheimer-Näherung vernünftig?