

FYS-MENA3110/4110

Oppgavesett for innlevering nr. 2

- frist 24.10.2007 kl. 15.

Hver student leverer sin egen besvarelse (ingen fotokopiering), men det er greit å samarbeide under utarbeidelsen av besvarelsen.

Besvarelsene merkes tydelig med *navn + FYS-MENA3110/4110* og legges i *posthylla merket Geir Helgesen* på Ekspedisjonskontoret på Fysisk institutt.

Oppgave 1:

Bruk variasjonsprinsippet med en gaussisk prøvfunksjon $\psi(x) = Ae^{-bx^2}$ til å finne en øvre grense for grunntilstandsenergien i et lineært potensial $V(x) = C|x|$.

Oppgave 2:

Bevis følgende regel som er en konsekvens av variasjonsprinsippet: "Hvis $\langle \psi | \psi_{gs} \rangle = 0$, hvor ψ_{gs} er bølgefunksjonen for grunntilstanden, da er $\langle H \rangle \geq E_{fe}$ hvor E_{fe} er energien i første eksiterte tilstand."

(Hint: tilsvarende bevis som for grunntilstanden i Griffiths 7.1.)

Oppgave 3:

Grunntilstandsenergien for helium er $E_{gs} = -79.0$ eV. Beregn ioniseringsenergien, dvs. den energien som trengs for å fjerne ett elektron. (Hint: Beregn først grunntilstandsenergien for He^+ -ionet som har ett elektron i bane rundt kjernen.)

Oppgave 4:

Vi ser på et kvadratisk gitter i to dimensjoner med krystallpotensialet

$$U(x, y) = -4U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$$

Bruk ligningen

$$[\lambda(\mathbf{k}) - E]C(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{G}} U(\mathbf{G})C(\mathbf{k} - \mathbf{G}) = 0 \quad (1)$$

hvor $\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ for å finne en tilnærming for energigapet ved hjørnepunktet $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ til første Brillouin sone.

(Hint: Skriv først $U(x, y)$ som et produkt av komplekse eksponentialfunksjoner. Beregn deretter $U(\mathbf{G}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^2\mathbf{r}$ hvor $\mathbf{r} = (x, y)$ og $\mathbf{G} = (k_x, k_y)$ er en resiprok gittervektor. Relasjonen $\delta(x - a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-a)} dk$ kan være nyttig her.

Finn verdiene av $\lambda(\mathbf{k})$ ved hjørnepunktene. Etter å ha satt inn i ligning (1) over, vil du komme fram til en 4x4 determinant som kan omgjøres til 2x2 blokker ved ombytting på kolonner og rader.)