Krešimir Kumerički, Horvatić Davor

Formule iz kvantne mehanike

(za vježbe iz kolegija Kvantna mehanika i struktura materije)

1 Prve primjene kvantne mehanike

1.1 Zračenje crnog tijela

Gustoća energije $u(\nu, T)$ zračenja idealnog crnog tijela temperature T po intervalu frekvencije $(\nu, \nu + d\nu)$ dana je *Planckovim zakonom*:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \ . \tag{1}$$

Za male frekvencije zračenja,

$$\nu \ll \frac{k_B T}{h} \ , \tag{2}$$

ovo prelazi u klasični *Rayleigh-Jeansov zakon*:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T \ . \tag{3}$$

Posljedice Planckovog zakona su

- *Wienov zakon*: Gustoća energije zračenja idealnog crnog tijela temperature T je maksimalna na valnoj duljini λ_{max} danoj formulom

$$\lambda_{max} T = 2.899 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{m\ K} \ . \tag{4}$$

- *Stefan-Boltzmanov zakon*: Ukupna snaga zračenja po jedinici površine idealnog crnog tijela temperature T je

$$P = \sigma_{SB} T^4 \ , \quad \sigma_{SB} = \frac{\pi^2 k_B^2}{60 c^2 h^3} = 5.57 \cdot 10^{-8} W m^{-2} K^{-4} \ . \tag{5}$$

1.2 Comptonovo raspršenje

Kada se foton valne duljine λ rasprši na elektronu pod kutem θ tada je valna duljina raspršenog fotona

$$\lambda' = \lambda + \lambda_c (1 - \cos\theta) \ , \quad \lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 2.43 \cdot 10^{-12}\,\mathrm{m} \ . \tag{6}$$

1.3 Einstein–de-Broglieve relacije

Usljed dualne valno-čestične prirode materije, čestica energije E i impulsa p ima frekvenciju danu *Einsteinovom relacijom*

$$\nu = \frac{E}{h} \ , \tag{7}$$

odnosno valnu duljinu danu *de-Broglievom relacijom*

$$\lambda = \frac{h}{p} \ . \tag{8}$$

1.4 Bohrov model atoma

Energijski nivoi vodikovog atoma su u Bohrovu kvantnomehaničkom modelu dani formulom

$$E_n = -\frac{R}{n^2} \ , \quad n = 1, 2, 3, \ldots \ , \tag{9}$$

gdje je R *Rydbergova konstanta* koja je u CGS sustavu jedinica dana s

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^2} \ , \tag{10}$$

a u SI sustavu jedinica s

$$R = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \ . \tag{11}$$

Njen je iznos R=13.6 eV.

2 Čestica u jednodimenzionalnoj potencijalnoj jami

Valne funkcije čestice mase m u jednodimenzionalnoj potencijalnoj jami sa zidovima na $x = 0$ i $x = L$ tj. opisanoj potencijalom

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } 0 < x < L \\ \infty & \text{drugdje} \end{cases} \ , \tag{12}$$

su

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \ , \quad n = 1, 2, 3, \ldots \ , \tag{13}$$

s energijama

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} n^2 \ , \quad n = 1, 2, 3, \ldots \ . \tag{14}$$

Ukoliko su pak zidovi na $x = -L/2$ i $x = L/2$, odnosno ukoliko je potencijal

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \infty & \text{drugdje} \end{cases} , \tag{15}$$

onda postoje dvije grupe rješenja: *parna* (sa svojstvom $\psi(-x) = \psi(x)$)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi x}{L} , \quad n = 1, 3, 5, \ldots , \tag{16}$$

i *neparna* (sa svojstvom $\psi(-x) = -\psi(x)$)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} , \quad n = 2, 4, 6, \ldots , \tag{17}$$

a energijski nivoi su opet

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 , \quad n = 1, 2, 3, \ldots . \tag{18}$$

3 Jednodimenzionalni harmonički oscilator

Valne funkcije za česticu mase m u jednodimenzionalnom harmoničkom potencijalu

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{19}$$

su

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} , \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x , \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{20}$$

gdje je A_n konstanta normalizacije

$$A_n = \sqrt{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \frac{1}{2^n n!}} , \tag{21}$$

a H_n je n-ti *Hermiteov polinom*. Odgovarajuće energije su

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) , \quad n = 0, 1, 2, \ldots . \tag{22}$$

Hermiteovi polinomi zadovoljavaju relacije ortonormiranosti

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \delta_{nm} \sqrt{\pi} 2^n n! \tag{23}$$

i rekurzionu formulu

$$2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) = H_{n+1}(\xi) \ , \quad n \geq 1 \ . \tag{24}$$

Nekoliko prvih Hermiteovih polinoma su

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 \\ H_1 &= 2\xi \\ H_2 &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3 &= 8\xi^3 - 12\xi \\ \ldots \ . \end{aligned}$$

4 Raspršenje na potencijalnim barijerama

Koeficijent transmisije T je definiran kao omjer transmitirane i upadne struje:

$$T = \left| \frac{j_{\mathrm{trans}}}{j_{\mathrm{inc}}} \right| \ , \tag{25}$$

a koeficijent refleksije R kao omjer reflektirane i upadne struje:

$$R = \left| \frac{j_{\mathrm{ref}}}{j_{\mathrm{inc}}} \right| \ . \tag{26}$$

Vrijedi

$$T + R = 1 \ , \tag{27}$$

a transmisijski koeficijenti za tri jednostavne potencijalne barijere su dani u dodatku 1.

5 Konačna potencijalna jama

Vidi dodatak 2.

6 Moment impulsa

Operator momenta impulsa[1].

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}} \tag{28}$$

[1]Osim izraza *moment impulsa*, koriste se i izrazi *impuls vrtnje*, *kutna količina gibanja* te, najčešće, pogrešan izraz *angularni moment*.

zadovoljava komutacijske relacije

$$
\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \\
[\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\
[\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y \ .
\end{aligned} \tag{29}
$$

Kako pojedine komponente ovog operatora ne komutiraju ne postoje svojstvena stanja od $\hat{\boldsymbol{L}}$, ali je moguće konstruirati stanja koja su svojstvena stanja jedne od komponenata (npr. $\hat{L}_z$) i od kvadrata ovog operatora $\hat{L}^2$. Takva stanja označavamo, u Diracovoj notaciji, s $|l, m\rangle$ i za njih vrijedi

$$
\begin{aligned}
\hat{L}^2 |l, m\rangle &= \hbar l(l+1) |l, m\rangle \ , && (30) \\
\hat{L}_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle && (31) \\
\hat{L}_- |l, m\rangle &= \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle && (32) \\
\hat{L}_+ |l, m\rangle &= \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle \ . && (33)
\end{aligned}
$$

Kvantni broj l može poprimiti samo cjelobrojne ili polucjelobrojne vrijednosti

$$
l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ \dots \ , \tag{34}
$$

a kvantni broj m poprima vrijednosti

$$
m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l \ . \tag{35}
$$

Polucjelobrojne vrijednosti može imati samo intrinsični moment impulsa čestica (tzv. *spin*) dok je orbitalni moment impulsa ograničen na isključivo cjelobrojne vrijednosti $l = 0, 1, 2, \dots$. Svojstvene funkcije ovog orbitalnog momenta impulsa su kugline funkcije:

$$
< \boldsymbol{n}(\theta, \phi) | l, m\rangle = Y_l^m(\theta, \phi) \ . \tag{36}
$$

$$
Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m (Y_l^m(\theta, \phi))^* \tag{37}
$$

Nekoliko prvih kuglinih funkcija su:

$$
\begin{aligned}
Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
Y_1^1 &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta e^{i\phi} \\
Y_1^0 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos\theta \\
\dots \ .
\end{aligned}
$$

Između ostalog, one zadovoljavaju relaciju ortonormiranosti

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \, Y_l^{m^*}(\theta,\phi)\, Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \ . \tag{38}$$

Legendreovi polinomi:

$$\begin{aligned} P_0 &= 1 \\ P_1 &= x \\ \ldots \ . \end{aligned}$$

zadovoljavaju rekurzivnu relaciju:

$$(2n+1)xP_n(x) = (n+1)P_{n+1}(x) + nP_{n-1}(x) \ . \tag{39}$$

Pridruženi Legendreovi polinomi računaju se pomoću relacije:

$$P_l^m(x) = \sqrt{(1-x^2)^m}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x) \tag{40}$$

7 Vodikov atom

Valne funkcije čestice u centralno-simetričnom Coulombovom potencijalu

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \ , \tag{41}$$

su

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \ , \tag{42}$$

gdje su $Y_l^m(\theta,\phi)$ kugline funkcije, a radijalni dio $R_{nl}(r)$ je dan preko pridruženih Laguerreovih polinoma $L_p^q(\rho)$ kao

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\left(\frac{\rho}{r}\right)^{\frac{3}{2}}\rho^l e^{-\rho/2}L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \ , \tag{43}$$

gdje je

$$\rho = \frac{2Z}{a_0 n}r \ , \quad L_{n-l-1}^{2l+1} = \sum_{i=0}^{n-l-1}\frac{(-1)^i[(n+l)!]^2}{i!(n-l-1-i)!(2l+1+i)!}\rho^i \ , \quad L_0^p = p! \tag{44}$$

Z je naboj jezgre ($Z = 1$ za vodik), a a_0 je Bohrov radijus koji je u CGS sustavu jedinica dan s

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.53 \cdot 10^{-10} m \ . \tag{45}$$

μ je reducirana masa koja je u ovom slučaju izražena preko masa elektrona i protona:

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \ . \tag{46}$$

Nekoliko prvih radijalnih valnih funkcija su

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-Zr/a_0} \\ R_{20}(r) &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \\ R_{21}(r) &= \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{\sqrt{3}a_0} e^{-Zr/2a_0} \\ \dots \ . \end{aligned}$$

Kvantni broj n poprima cjelobrojne vrijednosti $n = 1, 2, \ldots$, kvantni broj l poprima vrijednosti $0, 1, \ldots, n-1$, a kvantni broj m vrijednosti $-l, -l+1, \ldots, l-1, l$. Energijski nivoi su[2]

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0} = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2n^2 \hbar^2} \ . \tag{47}$$

Korisnom se pokazuje relacija:

$$\frac{k+1}{n^2}\langle r^k\rangle - (2k+1)\frac{a_0}{Z}\langle r^{k-1}\rangle + \frac{k}{4}[4l(l+1) - k^2 + 1]\frac{a_0^2}{Z^2}\langle r^{k-2}\rangle = 0 \ , \quad k > -2l-1 \tag{48}$$

$$\langle r\rangle = \frac{a_0}{2Z}[3n^2 - l(l+1)] \tag{49}$$

$$\langle\frac{1}{r}\rangle = \frac{Z}{n^2 a_0} \tag{50}$$

$$\langle\frac{1}{r^2}\rangle = \frac{2Z^2}{(2l+1)n^3 a_0^2} \tag{51}$$

8 Račun smetnje

Ako su poznata rješenja Schrödingerove jednadžbe

$$\hat{H}_0 \, \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \, \psi_n^{(0)} \ , \tag{52}$$

---

[2] U CGS sustavu jedinica. U SI sustavu jedinica su energijski nivoi

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \ .$$

te ukoliko je stvarni hamiltonijan

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \ , \tag{53}$$

gdje je $\hat{H}'$ neka mala smetnja obzirom na $\hat{H}_0$, onda su, u prvom redu računa smetnje, rješenja stvarne Schrödingerove jednadžbe,

$$\hat{H}\,\psi_n = E_n\,\psi_n \ , \tag{54}$$

dana kao

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{i\neq n} \frac{\langle\psi_i^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}\psi_i^{(0)} \ , \tag{55}$$

a energijski nivoi su

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle \ . \tag{56}$$

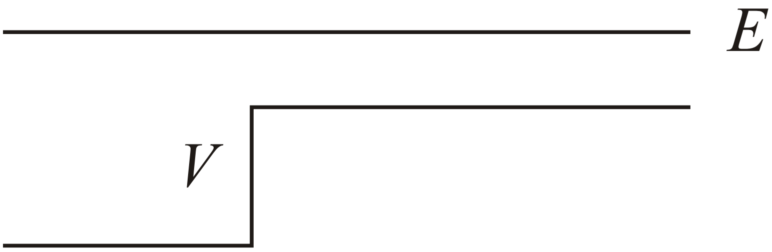
Sve ovo vrijedi uz pretpostavku da su nivoi $E_n^{(0)}$ nedegenerirani.

Pismeni ispiti

Pismeni ispiti traju tri sata. Na ispitu je dozvoljeno imati: digitron, zbirke formula iz matematike i fizike te udžbenike. Na ispitu nije dozvoljeno imati: zbirke riješenih zadataka te bilo kakve rukom pisane materijale (predavanja, vježbe). Iznimno je dozvoljeno imati rukom pisani arak papira s formulama.

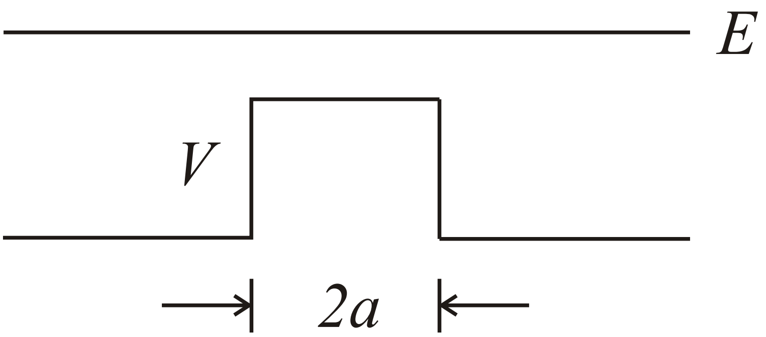
Dodatak 1.

Transmisijski koeficijenti za tri elementarne potencijalne barijere



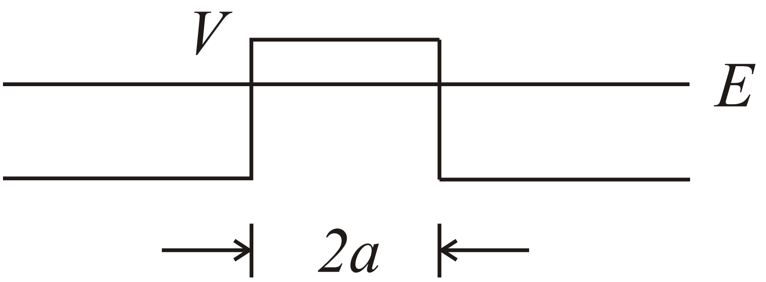
$$T = \frac{4(k_2/k_1)}{\left[1+(k_2/k_1)\right]^2}$$

$$(k_2/k_1)^2 = 1 - \frac{V}{E}$$



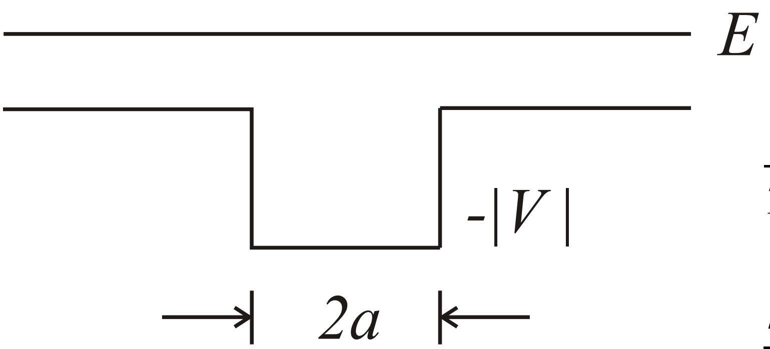
$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V^2}{4E(E-V)}\sin^2(2k_2 a)$$

$$\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V$$



$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V^2}{4E(V-E)}\sinh^2(2\kappa a)$$

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = V - E$$

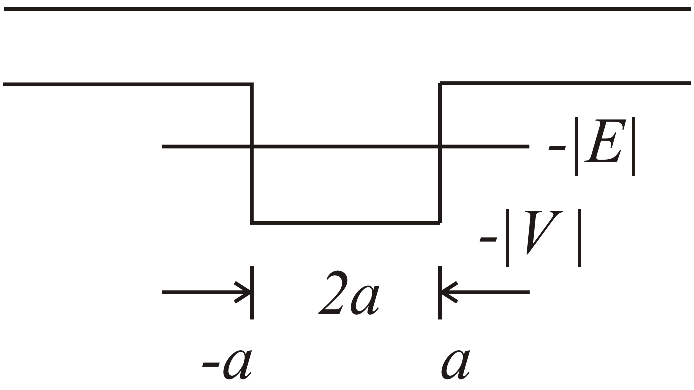


$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V^2}{4E(E+|V|)}\sin^2(2k_2 a)$$

$$\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V = E + |V|$$

Dodatak 2.

Konačna potencijalna jama



$$\xi \equiv ka = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(|V| - |E|)}$$

$$\eta \equiv \kappa a = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}|E|}$$

$$\rho \equiv \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}|V|}$$

Energije se mogu dobiti rješavanjem jednadžbi:

Parna rješenja: $\xi \tan\xi = \eta, \quad \xi^2 + \eta^2 = \rho^2$

Neparna rješenja: $\xi \cot\xi = -\eta, \quad \xi^2 + \eta^2 = \rho^2$

Ukupan broj vezanih stanja je prvi cijeli broj veći od: $\dfrac{2\rho}{\pi}$