1. domaća zadaća iz Fizike materijala

1. travnja 2016. godine

Riješiti sljedeće primjere (P) i zadatke (Z) iz "žute zbirke":

P 1.1	**P 1.2**
Z 1.3	**P 1.6**
P 2.3	**P 3.1**
P 3.6	

Primjere i zadatke riješiti sa svim detaljima i koracima, uz komentare.

Zadaću predati na sljedećem predavanju, 8. travnja 2016.

♠ ♠

MIRZA MEŠIĆ
0036457976

PREDATI: 8.4.2016.
NA PREDAVANJU

1. DOMAĆA ZADAĆA IZ FIZIKE MATERIJALA

P.1.1. Izračunati deBroglievu duljinu za:

(a) auto mase 1t koji ide brzinom od 100 m/s
(b) česticu dima mase 10^{-6} kg koja se kreće brzinom 1 cm/s
(c) elektron kinetičke energije 1 eV

RJEŠENJE:

(a)
→ deBroglieva relacija daje $\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}}{1000\ \mathrm{kg} \cdot 100\ \mathrm{m/s}}$

$\Rightarrow \boxed{\lambda = 6.626 \cdot 10^{-39}\ \mathrm{m}}$

(b) $\lambda = \frac{6.626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}}{10^{-6}\ \mathrm{kg} \cdot 10^{-2}\ \mathrm{m/s}} \Rightarrow \boxed{\lambda = 6{,}626 \cdot 10^{-26}\ \mathrm{m}}$

(c) → kako je $E_k \ll m_0 c^2 = 5.1 \cdot 10^5\ \mathrm{eV}$ vidimo da možemo računati s nerelativističkim izrazima pa vrijedi

$$p = \sqrt{2 m E_k} = \sqrt{2 \cdot 9{,}10938 \cdot 10^{-31} \cdot 1{,}602 \cdot 10^{-19}} = 5{,}40245 \cdot 10^{-25}\ \mathrm{kgm/s}$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}}{5{,}40245 \cdot 10^{-25}\ \mathrm{kgm/s}} \Rightarrow \boxed{\lambda = 1{,}2265 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m}}$$

P.1.2. Kolika je deBroglieva valna duljina elektrona čija je kinetička energija jednaka njegovoj energiji mirovanja?

RJEŠENJE:

→ radi se o relativističkom elektronu ukupne energije $E = \underbrace{m_0 c^2}_{5{,}1 \cdot 10^5\,\mathrm{eV}} + \underbrace{E_k}_{5{,}1 \cdot 10^5\,\mathrm{eV}} = 2 \cdot 0{,}51\ \mathrm{MeV}$

→ količina gibanja je $p = \frac{1}{c}\sqrt{3 m_0^2 c^4} = \frac{\sqrt{3}}{c} \cdot \sqrt{(\underbrace{m_0 c^2}_{0{,}51\,\mathrm{MeV}})^2} = \frac{\sqrt{3}}{c} \cdot 0{,}51\ \mathrm{MeV}$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js} \cdot 2{,}998 \cdot 10^8\ \mathrm{m/s}}{\sqrt{3} \cdot 5.1 \cdot 10^5 \cdot 1.602 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{J}}$$

$\Rightarrow \boxed{\lambda = 1{,}4037 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{m}}$

Z.1.3. Izračunajte kinetičku energiju a) elektrona b) protona, čija deBroglieva valna duljina iznosi 10^{-10} m.

RJEŠENJE:

$\lambda = 10^{-10}$ m ⟶ obzirom na red veličine i P.1.1. vidimo da možemo računati s nerelativističkim izrazima

$E_k = ?$

(a) $m_e = 9.10938 \cdot 10^{-31}$ kg

$$\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{10^{-10}\,\mathrm{m}}$$

$$\Rightarrow p = 6.626 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{kgm/s}$$

$$\Rightarrow p = \sqrt{2 m_e E_k} \quad \Big|^2$$

$$p^2 = 2 m_e E_k \Rightarrow E_k = \frac{p^2}{2 m_e}$$

$$\Rightarrow E_k = \frac{(6.626 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{kgm/s})^2}{2 \cdot 9{,}10938 \cdot 10^{-31}\ \mathrm{kg}} \cdot \frac{1}{1{,}602 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{J}} \quad [\mathrm{eV}]$$

$$\Rightarrow \boxed{E_k = 150{,}426\ \mathrm{eV}}$$

(b) $m_p = 1.67262 \cdot 10^{-27}$ kg

$$\Rightarrow \text{iz (a)} \quad E_k = \frac{p^2}{2 m_p} = \frac{(6.626 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{kgm/s})^2}{2 \cdot 1{,}67262 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg}} \cdot \frac{1}{1{,}602 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{J}} \quad [\mathrm{eV}]$$

$$\Rightarrow \boxed{E_k = 0{,}081924\ \mathrm{eV}}$$

P.1.6. Izvedite opći oblik izraza koji izražava zavisnost de Broglieve valne duljine nabijene čestice u gibanju od potencijala U u kojem čestica ubrzava, u relativističkom slučaju.

RJEŠENJE:

→ za nerelativističku česticu vrijedi relacija

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_k}}$$

→ budući da je $E_k = q \cdot U$, gdje je q naboj čestice, dobiva se

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 q \cdot U}}$$

→ relativistička čestica je opisana relacijom

$$E^2 = p^2c^2 + (m_0c^2)^2$$

→ kinetička energija je

$$E_k = E - m_0c^2 = \sqrt{p^2c^2 + (m_0c^2)^2} - m_0c^2 = q \cdot U$$

→ iz ove jednadžbe slijedi količina gibanja u zavisnosti od akcelerirajućeg potencijala:

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{2m_0c^2 \cdot qU + (qU)^2} = \sqrt{2m_0 qU} \cdot \sqrt{1 + \frac{q \cdot U}{2m_0c^2}}$$

→ slijedi

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 q \cdot U} \cdot \sqrt{1 + \frac{q \cdot U}{2m_0c^2}}}}$$

P.2.3. Elektron je ubrzan razlikom potencijala $U=(10^5 \pm 70)V$. Izračunajte supripadnu najveću neodređenost položaja elektrona.

RJEŠENJE:

→ budući da se radi o velikom ubrzavajućem potencijalu, problem treba tretirati relativistički. Zavisnost količine gibanja p o potencijalu U u relativističkom slučaju glasi:

$$p=\sqrt{2meU\left(1+\frac{eU}{2E_0}\right)}$$

→ diferenciranjem gornjeg izraza i zamjenom diferencijalnih priraštaja konačnim realnim iznosima Δp i ΔU dobiva se:

$$\Delta p = \frac{me(1+eU/E_0)}{\sqrt{2meU}\cdot\sqrt{1+eU/2E_0}}\cdot\Delta U$$

gdje se može izdvojiti relativistički korekcijski faktor Q kao:

$$Q=\frac{1+eU/E_0}{\sqrt{1+eU/2E_0}}$$

→ primjenom relacije neodređenosti $\Delta x\cdot\Delta p\approx\hbar$ slijedi neodređenost položaja Δx:

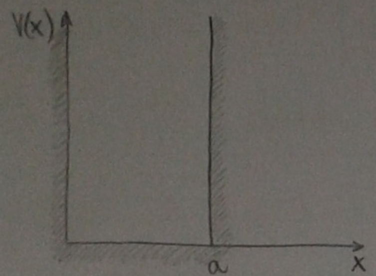
$$\boxed{\Delta x=\frac{\hbar}{\Delta p}=\frac{h}{2\pi}\cdot\frac{\sqrt{2meU}}{meQ\Delta U}}$$

→ Uz najveću neodređenost ubrzavajućeg napona $\Delta U=2\cdot 70\ V=140\ V$ i zamjenom numeričkih vrijednosti dobiva se neodređenost položaja

$$\boxed{\Delta x=7.7358\cdot 10^{-10}\ m}$$

$$\Delta x=1.055\cdot 10^{-34}\cdot\frac{\sqrt{2\cdot 9{,}10938\cdot 10^{-31}\cdot 1{,}602\cdot 10^{-19}\cdot 10^5}}{9{,}10938\cdot 10^{-31}\cdot 1{,}602\cdot 10^{-19}\cdot Q\cdot 140V}$$

P.3.1. Riješite problem gibanja čestice mase m u jednodimenzionalnoj potencijalnoj jami beskonačno visokih stjenki, tj. $V(x)=\begin{cases} 0, & \text{za } 0<x<a \\ \infty, & \text{za } x<0 \text{ i } x>a \end{cases}$ odnosno odredite normirane vlastite funkcije Hamiltonijana i vlastite vrijednosti - energije!



RJEŠENJE:

→ Schrödingerova jednadžba napisana za područje gdje potencijal nije beskonačan $(0<x<a)$ je (uz $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$)

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \qquad (1)$$

čije je opće rješenje

$$\psi(x)=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx} \quad \text{ili} \quad \psi(x)=A\cos kx+B\sin kx \qquad (2)$$

→ čestica ne može ući u područje beskonačnog potencijala pa su rubni uvjeti za valne funkcije jednaki $\psi(0)=0$ i $\psi(a)=0$ gdje je a širina jame

→ za $x=0$ dobijemo

$$\psi(0)=0=A\cos 0+B\sin 0 \Rightarrow A=0 \qquad (3)$$

→ za $x=a$ je

$$\psi(a)=0=B\sin ka \Rightarrow ka=n\pi \quad (n=1,2,3\ldots) \qquad (4)$$

tj. iz definicije k dobijemo kvantiziranu energiju

$$\boxed{E_n=\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}} \quad (n=1,2,3\ldots) \qquad (5)$$

gdje n predstavlja kvantni broj. Time smo riješili dio problema: odredili smo vlastitu vrijednost operatora (ukupne) energije - Hamiltonijana.

→ treba, dakle uočiti da je uvjet nametnut na valnu funkciju (na rubu potencijalne jame) doveo do kvantiziranja energije

⟶ za $n=1$ imamo energiju osnovnog stanja koja se ponekad zove i energija nultog stanja

⟶ uvjet normalizacije vodi na određenje konstante B:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1 = |B|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{1}{2} |B|^2 \cdot a \qquad (6)$$

pa je $B = \sqrt{2/a}$ i vlastita valna funkcija operatora H (Hamiltonijana) je

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \qquad \psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}} \qquad (7)$$

i

$$H\psi_n(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(x,t) = E_n \psi_n(x,t) = \left(\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right) \psi_n(x,t) \qquad (8)$$

⟶ valne su funkcije međusobno okomite (za različite kvantne brojeve)

⟶ okomitost je definirana s obzirom na (neki) skalarni produkt

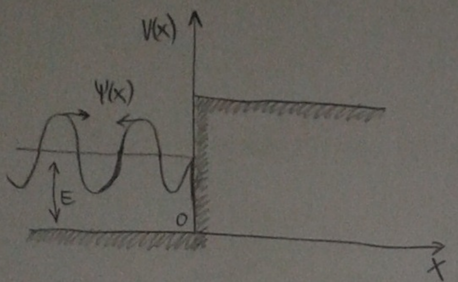
⇒ ovdje ulogu skalarnog produkta dviju funkcija ψ_n i ψ_m ima integral

$$\int_0^a \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{n,m} = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n \\ 1, & \text{za } m = n \end{cases}$$

⟶ točnije, taj integral daje uvjet ortonormiranosti valnih funkcija i on vrijedi općenito za sve valne funkcije vezanih stanja

⟶ iz svojstva normalizacije i ortogonalnosti, skup funkcija $\{\psi_n(x,t)\}$ možemo smatrati „bazom prostora fizikalnih stanja", na isti način kao što npr. trojka $(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k})$ u trodimenzionalnom Euklidskom prostoru predstavlja bazu pa svaki (prostorni) vektor možemo prikazati kao linearnu kombinaciju tih jediničnih, međusobno okomitih vektora. Zato i ovdje proizvoljno fizikalno stanje za česticu u beskonačnoj potencijalnoj jami možemo prikazati kao linearnu kombinaciju funkcija $\{\psi_n(x,t)\}$

P.3.6. Riješite problem refleksije slobodne kvantnomehaničke čestice na potencijalnom skoku oblika $V(x) = \begin{cases} 0, & \text{za } x<0 \\ V_0, & \text{za } x>0 \end{cases}$



RJEŠENJE:

⟿ Schrödingerovu jednadžbu rješavamo u dva područja:

područje I

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_I''(x) = E\psi_I(x) \quad \text{ili} \quad \psi''(x)_I + k_1^2\psi_I(x) = 0 \qquad (1)$$

⟿ gdje je $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$

područje II

$$\psi_{II}''(x) + k_2^2\psi_{II}(x) = 0 \qquad (2)$$

⟿ gdje je $k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)/\hbar^2}$

⟿ rješenje u <u>području I</u>:

$$\psi_I(x) = C_1 e^{ikx} + D_1 e^{-ik_1x} \equiv \psi_I^{(+)}(x) + \psi_I^{(-)}(x) \qquad (3)$$

⇒ to je linearna kombinacija rješenja koja opisuju gibanje s desna na lijevo i s lijeva na desno

⟿ gustoća struje vjerojatnosti (njena x komponenta) za gibanje s lijeva na desno

$$j^{(+)}(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_I^{(+)*}(x)\frac{d}{dx}\psi_I^{(+)}(x) - \left(\frac{d}{dx}\psi_I^{(+*)}(x)\right)\psi_I^{(+)}(x)\right] \qquad (4)$$

$$|C_1|^2\frac{\hbar k}{m}$$

⟶ za gibanje s desna na lijevo je $j^{(-)}(x) = -|C_1|^2 \frac{\hbar k}{m}$ (5)

⟶ relativna gustoća vjerojatnosti za jednu odnosno drugu gustoću struje vjerojatnosti je

$$\frac{\rho(-)}{\rho(+)} = \frac{|\psi^{(-)}|^2}{|\psi^{(+)}|^2} = \frac{|D_1|^2}{|C_1|^2} \qquad (6)$$

⟶ relativna vrijednost na intervalu dx je

$$\frac{P_-}{P_+} = \frac{|\psi^{(-)}|^2 dx}{|\psi^{(+)}|^2 dx} = \frac{|D_1|^2}{|C_1|^2} \qquad (7)$$

⟶ rješenje u <u>području II</u> je:

$$\psi_{II}(x) = C_2 e^{ik_2 x} + D_2 e^{-ik_2 x} \qquad (8)$$

⟶ valna funkcija i njena derivacija moraju biti neprekidne, tj. moramo „sašiti" (jednakost valnih funkcija na granici područja) valne funkcije, ali „glatko" (jednakost derivacija valnih funkcija na granici područja)

(9)

$\Rightarrow$ $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ $\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0)$ što daje dvije odredbene jednadžbe za C-ove i D-ove:

$$C_1 + D_1 = C_2 + D_2 \qquad k_1(C_1 - D_1) = k_2(C_2 - D_2) \qquad (10)$$

⟶ ako je <u>$E > V_0$</u> dobijemo za omjer vjerojatnosti

$$P = \frac{|D_1|^2}{|C_1|^2} = \frac{2-\alpha-2(1-\alpha)^{1/2}}{2-\alpha+2(1-\alpha)^{1/2}} \quad \text{gdje je } \alpha = V_0/E \qquad (11)$$

⟶ ako je $\alpha \leq \frac{1}{2}$ onda možemo razviti korjen $(1-\alpha)^{\frac{1}{2}} \approx 1 - \frac{\alpha}{2} - \frac{\alpha^2}{8} - \frac{\alpha^3}{48} \dots$

pa vjerojatnost (14) postaje

$$P = \frac{\alpha^2/4}{4-2\alpha-\alpha^2/4} \longrightarrow \frac{\alpha^2}{8(2-\alpha)} \qquad (12)$$

→ dakle, iako je energija ulaznih čestica veća od visine potencijalnog skoka, neke se čestice ipak reflektiraju

→ refleksije nema kada je $\alpha = 0$, a to postignuto samo ako je $E \simeq \infty$, ako je npr. $E = 2V_0$, tj. $\alpha = 0.5$ dobijemo iz (12) da je $P = 0.021$, tj. 2% ulaznih čestica će se reflektirati!

→ ako je $E < V_0$ onda je izraz pod korijenom u definiciji k_2 negativan pa zato napišemo da je $k_2' = ik_2$ i rješenje u području II je

$$\psi_{II}(x) = C_2 e^{k_2' x} + D_2 e^{-k_2' x} = \psi_{II}^{(+)} + \psi_{II}^{(-)}(x) \qquad (13)$$

→ valna funkcija svuda mora biti konačna što znači da je $C_2 = 0$ jer $\psi_{II}^{(+)}(x \to \infty) \to \infty$

⇒ za omjer vjerojatnosti sada dobijemo

$$\frac{|D_2|^2}{|C_1|^2} = \frac{4}{\alpha} \qquad (14)$$

→ prema tome, za konačnu barijeru je vjerojatnost nalaženja čestice u području $x > 0$ (tj. u klasično zabranjenom području) različita od nule!

→ za razmatranje vjerojatnosti nalaženja transmitiranih i reflektiranih čestica računamo koeficijent refleksije R i transmisije T koji su definirani ovako

$$T = \frac{j_{II}^{(+)}}{j_I^{(+)}} \qquad R = \frac{j_I^{(-)}}{j_I^{(+)}} \qquad (3\text{-}18)$$

2. domaća zadaća iz Fizike materijala

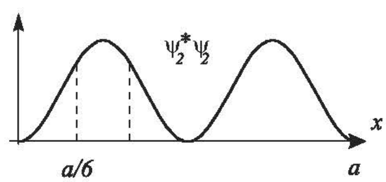
8. travnja 2016. godine

Riješiti sljedeće primjere (P) i zadatke (Z) iz "žute zbirke":

P 3.13	**P 3.15**
Z 3.2	**Z 3.3**
P 3.48	

Riješiti i sljedeće zadatke:

Zadatak 2.1 Čestica se nalazi u jednodimenzionalnoj beskonačnoj potencijalnoj jami širine a, u prvom pobuđenom stanju ($n = 2$). Izračunajte omjer vjerojatnosti nalaženja čestice $\mathcal{P}_1/\mathcal{P}_2$ gdje je $\mathcal{P}_2$ vjerojatnost nalaženja čestice u "drugoj šestini jame" (tj. između $\frac{a}{6}$ i $\frac{2a}{6}$), a $\mathcal{P}_1$ je vjerojatnost nalaženja čestice u "prvoj šestini jame" (tj. između 0 i $\frac{a}{6}$).
[Uputa: valja izračunati samo jednu vjerojatnost, $\mathcal{P}_1$ ili $\mathcal{P}_2$ i zatim na osnovu geometrije površine izračunati drugu.]



Slika uz zadatak 1: gustoća vjerojatnosti za $n = 2$.

Zadatak 2.2 Čestica se nalazi u trodimenzionalnoj "kutiji" beskonačno tvrdih zidova, tj. u potencijalnoj "kutiji" oblika

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{za } x < a_x,\ y < a_y,\ z < a_z \\ \infty & \text{za } x > a_x,\ y > a_y,\ z >_z \end{cases}.$$

Riješite Schrödingerovu jednadžbu za takav potencijal (potencijalnu energiju), prema bilješkama s predavanja, za slučaj "kocke" tj. $a_x = a_y = a_z = a$ za $a = 1\,\text{fm}$ i $m =$masa protona, za skup kvantnih brojeva $\{n_x, n_y, n_z\}$ koji poprimaju vrijednosti 1 i 2.

Zadatak 2.3 Napišite operator Δ ("laplasijan") u Kartezijevim i sfernim koordinatama.

♠ ♠

Primjere i zadatke riješiti sa svim detaljima i koracima, uz komentare.

Zadaću predati na sljedećem predavanju, 15. travnja 2016.

♠ ♠

MIRZA MEŠIĆ

0036457976

2. DOMAĆA ZADAĆA IZ FIZIKE MATERIJALA

„ŽUTA ZBIRKA"

Primjer 3.13.

1. pobuđeno stanje $\Psi(x) = Axe^{-a^2x^2/2}$

$$a^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$V(x) = \omega^2 m x^2/2$$

$$E = ?$$

$$\Delta = \frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\cdot\Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\cdot\left(Ae^{-\frac{a^2x^2}{2}} + A\left(-\frac{a^2}{\cancel{2}}\cdot\cancel{2}x\cdot e^{-a^2x^2/2}\right)\cdot x\right)' + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\left(Ae^{-\frac{a^2x^2}{2}} - Aa^2x^2e^{-\frac{a^2x^2}{2}}\right)' + V(x)\Psi(x) = E\cdot\Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\left(-A\cdot\frac{a^2}{\cancel{2}}\cdot\cancel{2}x\cdot e^{-\frac{a^2x^2}{2}} - A\left(a^2\cdot 2x\cdot e^{-\frac{a^2x^2}{2}} - a^4x^3e^{-\frac{x^2a^2}{2}}\right)\right) + V(x)\Psi(x) =$$

$$= E\cdot\Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\left(-Aa^2xe^{-\frac{a^2x^2}{2}} - 2Aa^2xe^{-\frac{a^2x^2}{2}} + Aa^4x^3e^{-\frac{a^2x^2}{2}}\right) + V(x)\Psi(x) = E\cdot\Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\cdot\underbrace{A\cdot x\cdot e^{-\frac{a^2x^2}{2}}}_{\cancel{\Psi(x)}}\cdot\left(-3a^2 + a^4x^2\right) + V(x)\cancel{\Psi(x)} = E\cdot\cancel{\Psi(x)}$$

$$a^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\left(a^4x^2 - 3a^2\right) + \frac{1}{2}\omega^2 m x^2 = E$$

$$-\frac{\cancel{\hbar}}{2\cancel{m}}\cdot\frac{\cancel{m}\omega}{\cancel{\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\cdot x^2 - 3\right) + \frac{1}{2}\omega^2 m x^2 = E$$

$$-\frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}\omega^2 m x^2 = E \implies \boxed{E = \frac{3}{2}\hbar\omega}$$

Zadatak 3.2. a) $a = 5 \cdot 10^{-5}$ b) $a = 1\ cm = 10^{-2}\ m$

$\Delta E = ?$ $\lambda = ?$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

a)

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = 2,40986 \cdot 10^{-19}\ J$$

$$E_2 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = 9,63946 \cdot 10^{-19}\ J$$

$$\Delta E = 7,2296 \cdot 10^{-19}\ J$$

$$\Delta E = h \cdot f$$

$$f = 1.09108 \cdot 10^{15}\ Hz$$

$$\lambda = \frac{c}{f} = 2,7495 \cdot 10^{-7}\ m$$

b)

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = 6,0246 \cdot 10^{-34}\ J$$

$$E_2 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = 2,40986 \cdot 10^{-33}\ J$$

$$\Delta E = 1,8074 \cdot 10^{-33}\ J$$

$$\Delta E = h \cdot f$$

$$f = 2,727\ Hz$$

$$\lambda = \frac{c}{f}$$

$$\Rightarrow \lambda = 1,1 \cdot 10^{8}\ m$$

Primjer 3.15

(a) $R_{2l}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2r_0}}$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)R(r)=l(l+1)R(r)$$

$$E_n = \frac{-me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\cdot\left[\left(2-\frac{1}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2r_0}}-\frac{1}{2r_0}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2r_0}}\right]+\right.$$

$$+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(-\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{4}+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)\cdot\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\cdot e^{-\frac{r}{2r_0}}=$$

$$=l(l+1)\cdot\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2r_0}}$$

$$\cancel{\frac{1}{2\sqrt{2}}}\cancel{\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}}\cancel{e^{-\frac{r}{2r_0}}}\cdot\left[2r\left(2-\frac{1}{a_0}-\frac{1}{r_0}+\frac{\frac{3}{2}r}{2a_0r_0}\right)-\frac{1}{2r_0}\cdot r^2\left(2-\frac{1}{a_0}-\frac{1}{r_0}+\frac{r}{2a_0r_0}\right)\right]$$

$$+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(-\frac{me^4r+32\pi\varepsilon_0\hbar^2e^2}{128\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2r}\right)\cdot\cancel{\frac{1}{2\sqrt{2}}}\cancel{\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\cancel{e^{-\frac{r}{2r_0}}}=$$

$$=l(l+1)\cancel{\frac{1}{2\sqrt{2}}}\cancel{\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\cancel{e^{-\frac{r}{2r_0}}}$$

$$4r-2\frac{r}{a_0}-2\frac{r}{r_0}+\frac{3r^2}{2a_0r_0}-\frac{r^2}{r_0}+\frac{r^2}{2a_0r_0}+\frac{r^2}{2r_0^2}-\frac{r^3}{4a_0r_0^2}-$$

$$-\frac{mr}{\hbar^2}\left(\frac{me^4r+32\pi\varepsilon_0\hbar^2e^2}{64\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\right)\left(2-\frac{r}{a_0}\right)=l(l+1)\left(2-\frac{r}{a_0}\right)$$

$$l(l+1)=0$$

$$l=0$$

$\Rightarrow R_{2l}=R_{20}$ // 2s - stanje

$\downarrow$

sharp orbitala

(b) $R_{2l}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2r_0}}$

$$\frac{d}{dr}\left[r^2 \cdot \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}} - \frac{r}{2a_0 r_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\right)\right] + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)R(r) =$$

$$= l(l+1)R(r)$$

$$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{2r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}} - \frac{r^2}{2a_0 r_0}e^{-\frac{r}{2r_0}} - \frac{3r^2}{2a_0 r_0}e^{-\frac{r}{2r_0}} + \frac{r^3}{4a_0 r_0^2}e^{-\frac{r}{2r_0}}\right) +$$

$$+ \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}\right)R(r) = l(l+1)R(r)$$

$$\cancel{R(r)}\left(2 - \frac{2r}{r_0} + \frac{r^2}{4r_0^2}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}\right)\cancel{R(r)} = l(l+1)\cancel{R(r)}$$

$$\Rightarrow \underline{l = 1}$$

principal orbitala

$$\underline{R_{2l} = R_{21}} \longrightarrow 2p - \text{stanje}$$

ZADATAK 3.3.

$$\psi_1(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{r_0}}$$

$$\psi_2(r,\theta,\phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2r_0}} \sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$\psi_3(r,\theta,\phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2r_0}} \cdot \cos\theta$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2}$$

ψ_1

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{r_0}}\cdot\left(-\frac{1}{r_0}\right)\right)\right] + V\psi_1 = E\psi_1$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\left(-\frac{2r}{r_0}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{r_0}} + \frac{r^2}{r_0^2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\cdot e^{-\frac{r}{r_0}}\right)\right] + V\psi_1 = E\psi_1$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{1}{r_0^2} - \frac{2}{rr_0}\right)\psi_1 + V\cancel{\psi_1} = E\cancel{\psi_1}$$

NOVI ARAK

MIRZA MEŠIĆ 0036457976 2. DOMAĆA ZADAĆA

NASTAVAK ZADATAK 3.3.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{r-2r_0}{r_0^2 r}\right)+V=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{r-2r_0}{r_0^2 r}\right)-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2} \leftarrow r=r_0 \quad \leftarrow r_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar}{me^2} \qquad \boxed{1=1}$$

$$\underline{\Psi_1=\Psi_{100}} \qquad n=1 \quad l=0 \quad m_e=0$$

Ψ_2

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sin\theta e^{i\phi}\cdot\left(\frac{1}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}-\frac{r}{2a_0r_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\right)\right]+\right.$$

$$+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\left(-\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\sin\theta e^{i\phi}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\right.\right.$$

$$\left.\left.\left.\cdot\cos\theta e^{i\phi}\right)\right]\right\}+V\Psi_2=E\Psi_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sin\theta e^{i\phi}\left(\frac{2r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}-\frac{r^2}{2r_0a_0}\cdot e^{-\frac{r}{2r_0}}-\frac{3r^2}{2a_0r_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}+\frac{r^3}{4a_0r_0^2}e^{-\frac{r}{2r_0}}\right)+\right.$$

$$+\frac{1}{r^2}\left[-\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\sin\theta e^{i\phi}+\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}\cdot e^{-\frac{r}{2r_0}}\cdot e^{i\phi}\right.$$

$$\left.\left.\cdot\left(\cos^2\theta-\sin^2\theta\right)\right]\right\}+V\Psi_2=E\Psi_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sin\theta e^{i\phi}e^{-\frac{r}{2r_0}}\left(\frac{2r}{a_0}-\frac{2r^2}{a_0r_0}+\frac{r^3}{4a_0r_0^2}\right)-\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\right.$$

$$\left.\cdot\sin\theta e^{i\phi}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}e^{i\phi}\left(\cos^2\theta-\sin^2\theta\right)\right]\right\}+V\Psi_2=E\Psi_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\cancel{\Psi_2}\left(2-\frac{2r}{r_0}+\frac{r^2}{4r_0^2}\right)-\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cancel{\Psi_2}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\cancel{\Psi_2}\left(1-2\sin^2\theta\right)\right\}+V\cancel{\Psi_2}=E\cancel{\Psi_2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left(2-\frac{2r}{r}+\frac{r^2}{4r_0^2}\right)-\frac{2}{r^2}\right\}+V=E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{8r_0^2-8\cdot r\cdot r_0+r^2}{4r_0^2}-\frac{2}{r^2}\right)+V=E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{8r^2r_0^2-8r^3r_0+r^4-8r_0^2}{4r_0^2r^2}\right)-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=\frac{\pi^2\hbar^2}{8mr_0^2} \leftarrow r_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

$\leftarrow r=r_0$

$\boxed{1=1}$ ✓

$n=2 \qquad m_l=1 \leftarrow e^{i\phi}$

$\Rightarrow \underline{\psi_2=\psi_{211}}$ $\qquad l=1 \leftarrow \sin\theta$

ψ_3

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\cdot\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\cos\theta\left(\frac{1}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}-\frac{r}{2a_0r_0}\cdot e^{-\frac{r}{2r_0}}\right)\right]+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(-\sin^2\theta\cdot\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\right)\right]\right\}+V\psi_3=E\psi_3$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{2}{3}}\cos\theta\left[\frac{2r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}-\frac{r^2}{2r_0a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}-\frac{3r^2}{2r_0a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}+\frac{r^3}{4a_0r_0^2}\right]+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\cdot\left(-2\sin\theta\cdot\cos\theta\cdot\frac{1}{4\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2r_0}}\right)\right\}+V\psi_3=E\psi_3$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\cancel{\psi_3}\cdot\frac{1}{r^2}\left(2-\frac{2r}{r_0}+\frac{r^2}{4r_0^2}\right)-\frac{2}{r^2}\cancel{\psi_3}\right\}+V\cancel{\psi_3}=E\cancel{\psi_3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{8r^2r_0^2-8r^3r_0+r^4-8r_0^2}{4r_0^2}\right)-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=\frac{\pi^2\hbar^2}{16mr_0^2} \leftarrow r=r_0$$

$r_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$

$\boxed{1=1}$ ✓

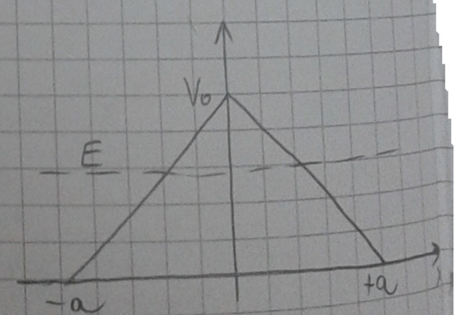
$n=2 \qquad m=0$

$\Rightarrow \underline{\psi_3=\psi_{210}}$ $\qquad l=1 \leftarrow \cos\theta$

Primjer 3.48.

$a=3{,}5\cdot10^{-9}\ m$

$V_0=9{,}5\ eV \qquad E=5{,}20\ eV$

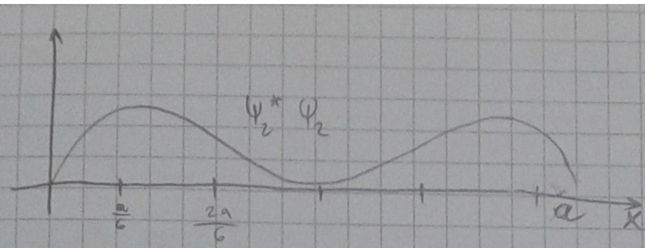


$$\tau=e^{-\sqrt{8m/\hbar^2}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{V(x)-E}\,dx}$$

$$\underline{\tau}=e^{-\sqrt{\frac{32m}{\hbar^2}}\cdot\frac{2a}{3V_0}\cdot\sqrt{(V_0-E)^3}}=\underline{3{,}999\cdot10^{-20}}$$

„DODATNO"

ZADATAK 2.1.



$n=2$

$$E_2 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$P_1 = \frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{6}} \sin^2 \frac{2\pi x}{a}\, dx = \frac{2}{a} \cdot \frac{(4\pi - 3\sqrt{3})\cdot a}{48\pi} = \frac{4\pi - 3\sqrt{3}}{24\pi}$$

$$P_2 = \frac{2}{a}\int_{\frac{a}{6}}^{\frac{2a}{6}} \sin^2 \frac{2\pi x}{a}\, dx = \frac{1}{24}\left(2 + \frac{3\sqrt{3}}{\pi}\right)\cdot \cancel{a} \cdot \frac{2}{\cancel{a}} = \frac{1}{12}\left(2 + \frac{3\sqrt{3}}{\pi}\right)$$

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{\frac{4\pi - 3\sqrt{3}}{24\pi}}{\frac{2\pi + 6\sqrt{3}}{12\pi}} = 0{,}442$$

ZADATAK 2.2.

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & za \quad x < a_x, \; y < a_y, \; z < a_z \\ \infty, & za \quad x > a_x, \; y > a_y, \; z > a_z \end{cases}$$

kocka $\Rightarrow a_x = a_y = a_z$ $\qquad a = 1\ fm \quad m = m_p$

$\{n_x, n_y, n_z\}$ poprimaju vrijednosti 1 i 2

$(1,1,1) \rightarrow 3E_0$

$$\left.\begin{matrix}(1,1,2)\\(2,1,1)\\(1,2,1)\end{matrix}\right\} 6E_0$$

$$\left.\begin{matrix}(2,1,2)\\(2,2,1)\\(1,2,2)\end{matrix}\right\} 9E_0$$

$(2,2,2) \rightarrow 12E_0$

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\Psi(x,y,z) + V(x,y,z)\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)$$

$$E_n = \frac{\overbrace{\pi^2\hbar^2}^{E_0}}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

$(1,1,1)$ $\qquad E_{1,1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(1+1+1) = 3E_0$

$$E_0 = 3{,}281358 \cdot 10^{-11}\ J$$

ZADATAK 2.3.

Kartezijev:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Sferne koordinate:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right)$$

MIRZA MEŠIĆ
0036457976

PREDATI: 22.4.2016.

3. DOMAĆA ZADAĆA IZ FIZIKE MATERIJALA

„ŽUTA ZBIRKA"

Primjer 5.1.

$U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$

$m > n$

→ uvjet postojanja stabilnog vezanog stanja, u slučaju potencijalne energije $U(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m}$, možemo napisati kao uvjete minimuma $U(r)$:

$$\left(\frac{dU}{dr}\right)_{r=r_0} = 0 \quad i \quad \left(\frac{d^2U}{dr^2}\right)_{r=r_0} > 0$$

koji daju

$$\frac{n\alpha}{r_0^{n+1}} - \frac{m\beta}{r_0^{m+1}} = 0 \quad i \quad -\frac{n(n+1)\alpha}{r_0^{n+2}} + \frac{m(m+1)\beta}{r_0^{m+2}} > 0$$

→ iz prve jednakosti se može napisati

$$r_0^{m-n} = \frac{m}{n} \cdot \frac{\beta}{\alpha}$$

dok se druga može napisati kao

$$r_0^{m-n} - \frac{m(m+1)}{n(n+1)} \cdot \frac{\beta}{\alpha} < 0$$

→ njihovim povezivanjem imamo

$$\frac{m}{n} \cdot \frac{\beta}{\alpha} - \frac{m(m+1)}{n(n+1)} \cdot \frac{\beta}{\alpha} < 0$$

odnosno $n(n+1) < m(n+1)$ što je zapravo zahtjevani uvjet $m > n$

Zadatak 5.1. $U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{b}{r^9}$

→ ravnotežni položaj $\left(\frac{dU(r)}{dr}\right) = 0$

$$\frac{dU(r)}{dr} = +\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^2} - 9\frac{b}{r^{10}} = 0$$

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot 9}\cdot r^8 = b$$

$$\frac{\Delta U}{U} = \frac{\frac{b}{r^9}}{-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} + \frac{b}{r^9}} = \frac{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot 9}\cdot\cancel{\frac{1}{r}}}{-\frac{9e^2}{9\cdot 4\pi\varepsilon_0}\cdot\cancel{\frac{1}{r}} + \frac{e^2}{36\pi\cdot\varepsilon_0}\cancel{\frac{1}{r}}} =$$

$$= \frac{\frac{1}{9}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}}{-\frac{8}{9}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}} = -\frac{1}{8}$$

⇒ POGREŠKA JE $\frac{1}{8}$.

Primjer 5.3. Lennard-Jones izraz: $E_p(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right]$

→ ravnotežnu udaljenost atoma r_0 odredit ćemo iz minimalne potencijalne energije:

$$\left(\frac{dE_p(r)}{dr}\right)_{r=r_0} = 0 \Rightarrow 4\varepsilon\left[-\frac{12\sigma^{12}}{r_0^{13}} + \frac{6\sigma^6}{r_0^7}\right] = 0$$

što daje

$$\frac{2\sigma^6}{r_0^6} = 1 \Rightarrow r_0 = \sigma\sqrt[6]{2}$$

→ dubina potencijalne jame je:

$$E_p(r_0) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^6\right]$$

$$E_p(r_0) = 4\varepsilon\left[\frac{1}{4} - \frac{1}{2}\right]$$

$$E_p(r_0) = -\varepsilon$$

Primjer 5.8.

$$F = k\frac{q_1 \cdot q_2}{r^2}$$

$$V = -\int F\,dr = k\cdot\frac{q_1\cdot q_2}{r}$$

$$V_{tot} = \sum V = 2\cdot\left(-\frac{e^2}{a}+\frac{e^2}{2a}-\frac{e^2}{3a}+\cdots\right)\cdot k$$

$$= -2\cdot\frac{k\cdot e^2}{a}\left(1-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}-\frac{1}{4}+\cdots\right)$$

$$= -2\cdot\frac{k\cdot e^2}{a}\ln 2$$

$$V_{tot} = -2\,\frac{e^2\ln 2}{4\pi\varepsilon_0 a}$$

Primjer 5.10.

→ kristal tipa NaCl je jednostavna kubična rešetka u kojoj su suprotno nabijeni ioni postavljeni bliže jedan drugome, a istovrsni ioni dijagonalno. Iz slike vidimo, uočimo li ion u sredini strukture, da je on najprije okružen sa 6 suprotno nabijenih iona na udaljenosti R

→ zatim s 12 istoimenih na udaljenosti $R\sqrt{2}$, te s 8 suprotno nabijenih iona na udaljenosti $R\sqrt{3}$

→ na udaljenosti 2R smješteno je 6 istovrsnih iona

→ budući da elementarnu ćeliju čini jednaki broj jednih i drugih iona, to od ovih 6 na udaljenosti 2R doprinos treba računati samo jednog, kako upućuje sljedeća tablica:

I	II
početni ion	6 suprotno nabijenih iona (R)
12 istoimenih ($R\sqrt{2}$)	8 suprotno nabijenih ($R\sqrt{3}$)
1 istoimeni (2R)	
$\Sigma = 14$	$\Sigma = 14$

Madelungova konstanta je dakle: $\alpha = 6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} = 1{,}6335$