

# Równanie ruchu w mechanice kwantowej

Różniczkowanie operatorów względem czasu:

Z definicji  $\overline{\dot{f}} = \dot{\overline{f}}$

Z wykorzystaniem pochodnych  $\frac{\partial \psi}{\partial t}$  i  $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$  (z równania Schrödingera) znajdziemy

$$\dot{f} = \frac{d}{dt} f$$
$$\dot{\overline{f}} = \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{f} \psi dV$$

$$\overline{\dot{f}} = \int \psi^* \left( \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{f} - \frac{i}{\hbar} \hat{f} \hat{H} \right) \psi dV$$

$$\Rightarrow \boxed{\dot{\hat{f}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}]}$$

gdzie  $[\hat{H}, \hat{f}] = \hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}$   
komutator operatorów  $\hat{H}$  i  $\hat{f}$ .

Prędkość cząstki:  $\hat{v} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{r} - \hat{r} \hat{H}) = \frac{\hat{p}}{m}$   $\hat{v} = \dot{\hat{r}}$

$$\dot{\hat{v}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{v} - \hat{v} \hat{H}) = \frac{i}{m\hbar} (\hat{H} \hat{p} - \hat{p} \hat{H}) = \frac{i}{m\hbar} (U \hat{p} - \hat{p} U)$$

$$\Rightarrow \boxed{m \dot{\hat{v}} = -\nabla U}$$

równanie ruchu cząstki w mechanice kwantowej

# Moment pędu

Operator momentu pędu cząstki:

$$\hbar \hat{\vec{l}} = \vec{r} \times \hat{p} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla$$

$\vec{l}$  w jednostkach  $\hbar$

Składowe operatora pędu:  $\hbar \hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$ ,  $\hbar \hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$ ,  $\hbar \hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$

Kwadrat długości wektora momentu:

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$$

We współrzędnych sferycznych:

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\hat{l}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

gdzie  $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Funkcje własne momentu pędu:

$$-i \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = l_z \psi$$

$$\hat{l}_z \psi = l_z \psi$$

równanie ~~na~~  
funkcje własne

Rozwiązanie:

$$\psi = f(r, \theta) e^{il_z \varphi}$$

$$l_z = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

- ponieważ funkcje  $\psi$  powinny być jednoznaczne

Zależny od  $\varphi$  mnożnik (funkcje własne operatora  $\hat{l}_z$ )

$$\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Funkcje  $\phi_m(\varphi)$  są unormowane i ortogonalne

$$\int_0^{2\pi} \phi_m^*(\varphi) \phi_{m'}(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}$$

$$\delta_{mm'} = \begin{cases} 1, & m = m' \\ 0, & m \neq m' \end{cases}$$

delta-funkcja

Wartość własna operatora  $\hat{l}^2$ :

$$\hat{l}^2 = l(l+1)$$

# Ruch w polu o symetrii sferycznej

7.

Równanie Schrödingera:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U(r)\right) \Psi = E \Psi$$

$$U(r) = -\frac{d}{r}$$

potencjał pola kulombowskiego

$d = e^2$   
 $m_0$  - masa swobodnego elektronu

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \hat{L}^2$$

operator Laplace'a we współrzędnych sferycznych

Szukamy rozwiązania w postaci:

$$\Psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Otrzymujemy równanie dla funkcji radialnej  $R(r)$ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$  - funkcje własne operatora kwadratu momentu pędu:

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}$$

Rozwiązanie tego równania:  $R_{nl}(r) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} e^{-r/n} \left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n+l} \left(\frac{2r}{n}\right)$

gdzie  $r$  w jednostkach atomowych  $\hbar^2/m_0 d^2$ ,  $n = 1, 2, \dots$ ,  $l = 0, 1, \dots, (n-1)$

$L_n^m(z) = \frac{n!}{(n-m)!} e^z \frac{d^m}{dz^m} e^{-z} z^{n-m}$  - uogólniony wielomian Laguerre

Energia stanu z pewnym  $(n, l, m)$ :

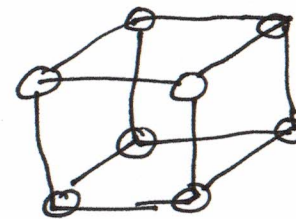
$$E_n = - \frac{m_0 \alpha^2}{2 \hbar^2 n^2}$$

- energia nie zależy od liczb  
kwantowych  $l$  i  $m$

# Przewodnictwo elektryczne ciał stałych

## Właściwości elektryczne ciał stałych

- Krystaliczne ciała stałe - atomy są uporządkowane w określonej strukturze zwanej siatką



Komórka elementarna

Właściwości elektryczne:

- opór elektryczny właściwy  $\rho$
- temperaturowy współczynnik oporu  $\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$
- koncentracja nośników ładunku  $n$

izolatory - praktycznie nie przewodzą prąd.  $\rho$  jest duże  
przykład - diament

Opór właściwy półprzewodników  $\rho$  jest znacznie większy niż opór  $\rho$  metal.

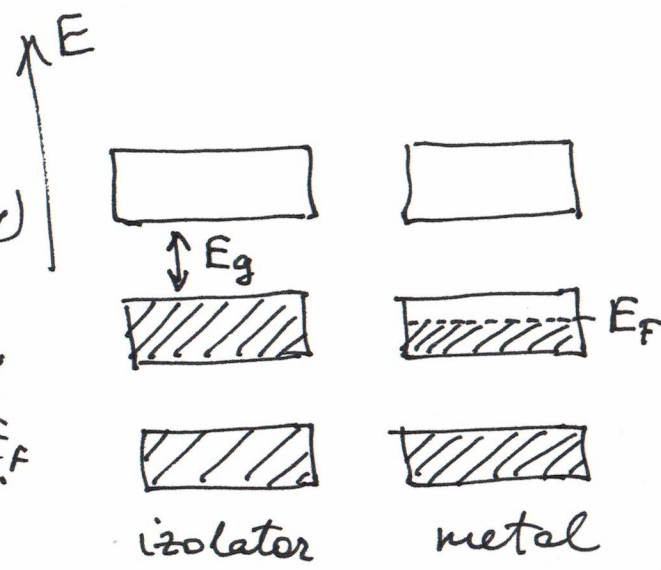
W półprzewodnikach  $\alpha$  jest duży i ujemny

W półprzewodnikach  $n$  jest mniejsza niż w metalach

	miedź	krzem	
$\rho$	$2 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^3$	$\Omega \cdot m$
$\alpha$	$4 \cdot 10^{-3}$	$-70 \cdot 10^{-3}$	$K^{-1}$
$n$	$9 \cdot 10^{28}$	$1 \cdot 10^{16}$	$m^{-3}$

# Poziomy energetyczne w kryształach

- W izolatorach poziom o najwyższej (obsadzony) energii to poziom z wierzchołka pasma
- W metalach obsadzony poziom o najwyższej energii - nazywany poziomem Fermiego  $E_F$  znajduje się w pobliżu środka pasma



Prędkość elektronów z poziomu Fermiego zwana jest prędkością Fermiego  $v_F$ .  
Dla nich  $v_F \approx 1,6 \cdot 10^6$  m/s

## Gęstość stanów

Ilość stanów kwantowych w jednostkowej objętości próbki z energią w przedziale od  $E$  do  $E+dE$  jest  $N(E)dE$   
 $N(E)$  - gęstość stanów dla energii  $E$

Wzór na gęstość stanów (model swobodnych elektronów, trójwymiarowy kryształ):

$$N(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3} E^{1/2}$$

