NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:
Ingjald Øverbø, tel. 73 59 18 67

EKSAMEN I
TFY4250 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK og
FY2045 INNFØRING I KVANTEMEKANIKK

Torsdag 18. desember 2003
kl. 09.00 - 15.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator
Rottmann: Matematisk formelsamling
Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk

Oppgaveteksten er gitt på norsk side 1 – 5
og på engelsk side 6 – 10.
Et ark med uttrykk og formler er vedlagt (side i, helt til slutt).

Sensuren faller 19. januar 2004.

Oppgave 1

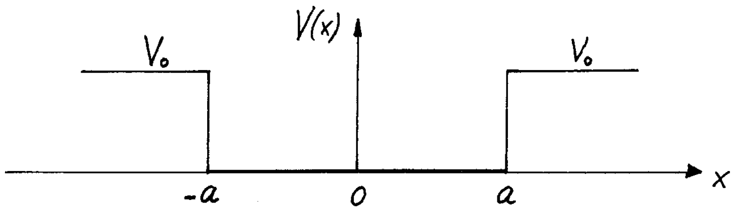
En partikkel med masse m beveger seg i et symmetrisk éndimensjonalt potensial, $V(x) = V(-x)$.

a. Anta at $\psi(x)$ er en energiegenfunksjon med energi E. Forklar (med utgangspunkt i den tidsuavhengige Schrödingerligningen for dette systemet) hvordan $\psi(x)$ *krummer*

(i) i klassisk *tillatte* områder, hvor $V(x) < E$,
(ii) i klassisk *forbudte* områder, hvor $V(x) > E$,

Hva kan du si om symmetriegenskaper og degenerasjon for bundne energiegentilstander i et slikt potensial? (Bevis kreves ikke.)

b.



Figuren viser en éndimensjonal potensialbrønn

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad -a < x < a, \\ V_0 & \text{for} \quad |x| > a. \end{cases}$$

Vis at en energiegentilstand med energi $E < V_0$ må ha formen

$$\psi(x) = C\,e^{-\kappa x}, \qquad \text{med} \quad \kappa \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)},$$

i området $x > a$. Definer (på passende måte) en *inntrengningsdybde*, $l_{\text{p.d.}}$, for det klassisk forbudte området $x > a$, og angi denne uttrykt ved κ.

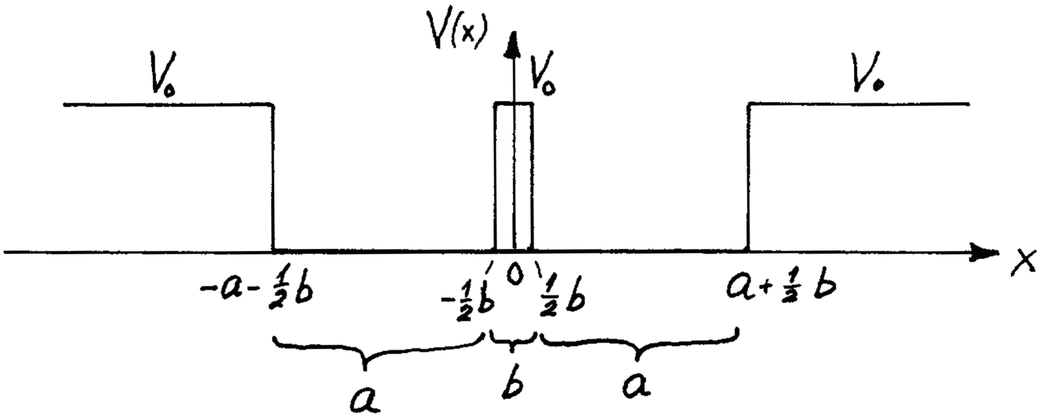
c. Anta at brønndybden V_0 er så stor at det blir plass til et stort antall N ($>> 1$) av bundne tilstander i brønnen. Det opplyses at dette krever at

$$N^2 < \frac{8mV_0a^2}{\pi^2\hbar^2} < (N+1)^2.$$

Forklar hvorfor inntrengningsdybdene for grunntilstanden $\psi_1(x)$ (med energi E_1) og første eksiterte tilstand $\psi_2(x)$ (med energi E_2) da blir mye mindre enn lengden a. Forklar også hvorfor energien E_2 blir tilnærmet fire ganger så stor som E_1. [Hint: Finn formen til $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ inne i brønnen, og lag omtrentlige skisser av de to funksjonene, for alle x.]

d. Anta nå at potensialet ovenfor modifiseres som vist i figuren nedenfor:

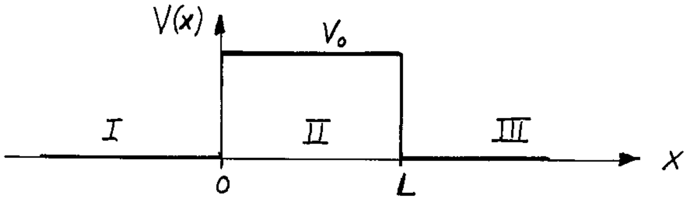
$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad \frac{1}{2}b < |x| < a + \frac{1}{2}b, \\ V_0 & \text{ellers.} \end{cases}$$



Dersom b velges liten i forhold til inntrengningsdybdene (inn i områdene $|x| > a + \frac{1}{2}b$), vil energiene E_1 og E_2 endres *bare litt* i forhold til verdiene for $b = 0$. I hvilke *retninger* endres E_1 og E_2? [Hint: Forsøk å skissere ψ_1 og ψ_2, med utgangspunkt i krumningsegenskapene, bl.a i området $|x| < \frac{1}{2}b$.]

e. Skissér de to egenfunksjonene ψ_1 og ψ_2 når b gjøres mye *større* enn inntrengningsdybdene, og angi hvordan det går med de to energiene E_1 og E_2 i dette tilfellet.

Oppgave 2



I dette éndimensjonale problemet spredes en strøm av partikler med masse m og energi $E = \hbar^2 k^2/2m$ mot potensialet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x < 0 \;\text{ og }\; x > L, \\ V_0 & \text{for} \quad 0 < x < L. \end{cases}$$

Området II ($0 < x < L$) utgjør en potensial*barriere* eller en potensial*brønn*, avhengig av om V_0 er positiv eller negativ. Denne problemstillingen kan behandles vha en energiegenfunksjon $\psi_E(x)$ som har formen

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + r\,e^{-ikx} \qquad \text{for} \quad x < 0,$$

og

$$\psi_{III}(x) = t\,e^{ikx} \qquad \text{for} \quad x > L.$$

Her er r og t komplekse koeffisienter.

a. Beregn sannsynlighets-strømtettheten j_{III} for området $x > L$, uttrykt bl.a ved den komplekse koeffisienten t. Beregn også strømtettheten j_I i område I ($x < 0$), uttrykt ved koeffisienten r. Vis at $j_I = j_i + j_r$. Her er j_i strømtettheten en ville finne fra den innkommende bølgen $\exp(ikx) \equiv \psi_i$ alene, og j_r er strømtettheten en ville finne fra den reflekterte bølgen $r\exp(-ikx) \equiv \psi_r$ alene.

b. Siden bølgefunksjonen $\Psi_E(x,t) = \psi_E(x)\exp(-iEt/\hbar)$ er stasjonær kan det ikke skje noen opphopning av sannsynlighet noe sted. Hva kan du ut fra dette si om sammenhengen mellom j_I og j_{III}? Hva kan du si om strømtettheten j_{II} i område II ($0 < x < L$)? Angi transmisjons- og refleksjonssannsynlighetene T og R uttrykt ved t og r.

c. Det kan vises at

$$t = e^{-ikL}\,\frac{2kq}{2kq\cos qL - i(k^2+q^2)\sin qL},$$

der

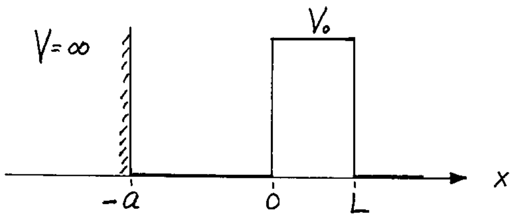
$$q = \begin{cases} \sqrt{2m(E-V_0)/\hbar^2} & \text{for} \quad E > V_0, \\ i\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2} \equiv i\kappa & \text{for} \quad E < V_0. \end{cases}$$

Bruk dette til å vise at transmisjonssannsynligheten er

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 qL}.$$

Vis at resultatet for T stemmer med klassisk mekanikk i grensen $E/|V_0| \to \infty$. Fullstendig transmisjon kan også oppnås under andre betingelser. Hva er disse betingelsene?

d. I figuren nedenfor er potensialet ovenfor (med $V_0 > 0$) modifisert, med en hard vegg i avstand a fra barrieren.



Anta at

$$V_0 = \frac{5\hbar^2}{8m_e a_0^2}, \qquad L = 5a_0 \qquad \text{og} \qquad a = 2\pi a_0,$$

der a_0 er Bohr-radien. Anta videre at et elektron med masse m_e stenges inne mellom veggen og barrieren, i en tilstand som ved $t = 0$ kan karakteriseres ved en energi og en bølgefunksjon tilnærmet gitt ved

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}; \qquad k \approx \frac{\pi}{a}; \qquad \Psi(x,0) \approx \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[k(x+a)] & \text{for} \quad -a < x < 0, \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases}$$

Bredden av barrieren er $5a_0$. Halvklassisk kan vi beregne en hastighet $v = \sqrt{2E/m_e}$ og en kollisjonsfrekvens $\nu = v/2a$ med barrieren. Hvor lang tid τ tar det ut fra denne tankegangen før sannsynligheten for å finne elektronet innestengt er redusert fra 1 til $1/e$? [Hint: Transmisjonssannsynligheten ved hvert støt mot barrieren er gitt av formelen ovenfor, med $q = i\kappa$, dvs $\sin qL = \sin i\kappa L = i \sinh \kappa L$. Merk at $\ln(1-T) \approx -T$ for $T << 1$.]

Oppgave 3

En partikkel med masse m er bundet i et kuleformet brønnpotensial

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad r < a, \\ V_0 & \text{for} \quad r > a. \end{cases}$$

For å forenkle beregningene antar vi at V_0 er uendelig, slik at potensialet danner en kuleformet *boks*.

De simultane egenfunksjonene til Hamilton-operatoren $\hat{H}$ og dreieimpulsoperatorene $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ kan skrives på formen

$$\psi_{nlm_l}(r,\theta,\phi) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm_l}(\theta,\phi),$$

der

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm_l} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm_l} \qquad \text{og} \qquad \hat{L}_z Y_{lm_l} = \hbar m_l Y_{lm_l},$$

og

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r), \qquad (0 \le r < a).$$

Det kan vises at de akseptable løsningene av radial-ligningen går som $u_{nl}(r) \sim r^{l+1}$ når $r \to 0$. Kvantetallet n angir i denne problemstillingen antall nullpunkter for funksjonen $u_{nl}(r)$, når vi tar med nullpunktet for $r = a$, men holder nullpunktet i origo utenfor.

a. Hvilke betingelser må være oppfylt for at et sett av operatorer skal kunne ha et simultant sett av egenfunksjoner (slik $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ har)?

Hvor mange vinkelfunksjoner Y_{lm_l} finnes det for et gitt dreieimpulskvantetall l?

Hvordan kan en se (av ligningene ovenfor) at energiegenverdiene (E_{nl}) i denne problemstillingen er uavhengige av kvantetallet m_l?

Argumentér for at $u_{nl}(r)$ må være lik null for $r = a$. Vis at $\psi_{nlm_l}(r,\theta,\phi)$ er normert, forutsatt at $u_{nl}(r)$ og $Y_{lm_l}(\theta,\phi)$ oppfyller betingelsene

$$\int_0^a [u_{nl}(r)]^2 dr = 1 \qquad \text{og} \qquad \int |Y_{lm_l}(\theta,\phi)|^2 d\Omega = 1.$$

b. Finn de normerte s-bølge-løsningene $u_{n0}(r)$, de tilhørende egenfunksjonene ψ_{n00}, samt energiene E_{n0}.

c. Lag en rask skisse av potensialbrønnen, sammen med sentrifugalbarrieren $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$ som inngår i radialligningen, for to l-verdier, $l = 1$ og $l = 2$. Om vi holder n fast og lar l variere, hvilken verdi av l må en ut fra skissen vente gir den laveste energien E_{nl}, den nest laveste, osv.? (Angi rekkefølgen.)

Hvilken rekkefølge må en vente å finne for energiene E_{nl} for en fastholdt l og varierende n?

Hvilken kombinasjon av n og l må en vente å finne for grunntilstanden?

d. Resultatene under **c** kan kontrolleres (et lite stykke på vei) ved å løse radialligningen for $l = 1$, som tar formen

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2}{r^2} + k^2 u = 0, \qquad \text{med} \quad k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

Ved innsetting er det lett å kontrollere at denne oppfylles av

$$u_a = \frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \qquad \text{og} \qquad u_b = -\frac{\cos kr}{kr} - \sin kr.$$

(Dette skal du ikke vise.) Vis at bare den ene av disse oppfører seg slik $u(r)$ skal for små r. Vis også at funksjonen med korrekt oppførsel for små r gir en akseptabel løsning for $u(r)$ for hver k-verdi som tilfredsstiller betingelsen

$$\tan ka = ka.$$

e. Forsøk, på basis av resultatene i **c** og **d**, å finne et tilnærmet resultat for første eksiterte energinivå for denne kuleformede boksen.

Question 1

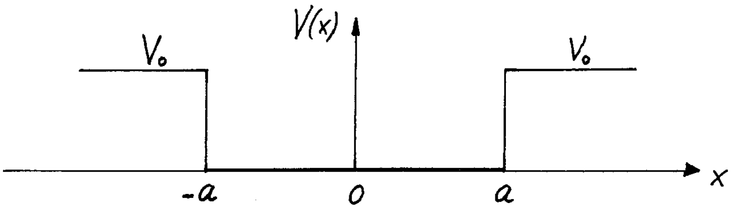
A particle with mass m moves in a symmetric one-dimensional potential, $V(x) = V(-x)$.

a. Suppose that $\psi(x)$ is an energy eigenfunction with energy E. Explain (starting from the time-independent Schrödinger equation for this system) how $\psi(x)$ *curves*

(*i*) in classically *allowed* regions, where $V(x) < E$,
(*ii*) in classically *forbidden* regions, where $V(x) > E$,

What can you say about symmetry properties and degeneracy for bound energy eigenstates in such a potential? (No proofs required.)

b.



The figure shows a one-dimensional potential well

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad -a < x < a, \\ V_0 & \text{for} \quad |x| > a. \end{cases}$$

Show that an energy eigenstate with energy $E < V_0$ must have the form

$$\psi(x) = C\, e^{-\kappa x}, \qquad \text{with} \quad \kappa \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)},$$

in the region $x > a$. Define (in a suitable way) a *penetration depth*, $l_{\text{p.d.}}$, for the classically forbidden region $x > a$, and find it, expressed in terms of κ.

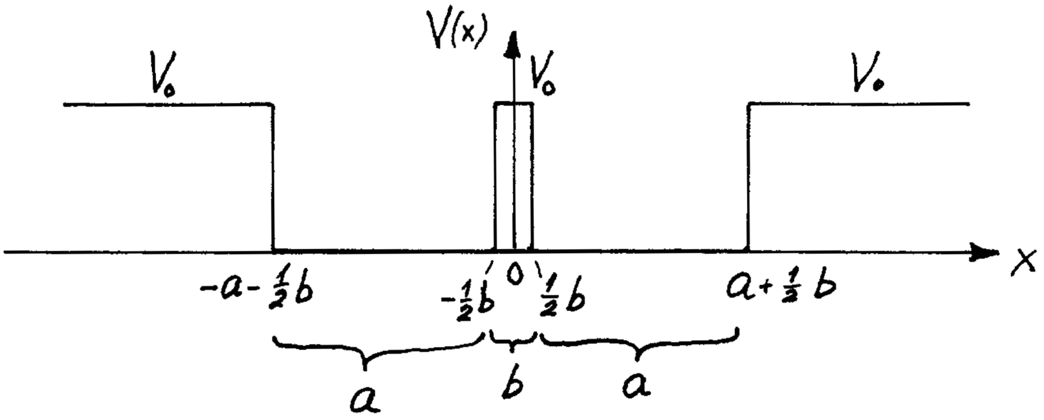
c. Assume that the depth V_0 of the well is so large that the well cantains a large number N (>> 1) of bound states. It can be shown that this requires that

$$N^2 < \frac{8mV_0 a^2}{\pi^2\hbar^2} < (N+1)^2.$$

Explain why the penetration depths for the ground state $\psi_1(x)$ (with energy E_1) and the first excited state $\psi_2(x)$ (with energy E_2) then must be much smaller than the length a. Explain also why the energy E_2 is approximately four times as large as E_1. [Hint: Find the form of $\psi_1(x)$ and $\psi_2(x)$ inside the well, and make rough sketches of the two functions, for all x.]

d. Suppose now that the potential above is modified as shown in the figure below:

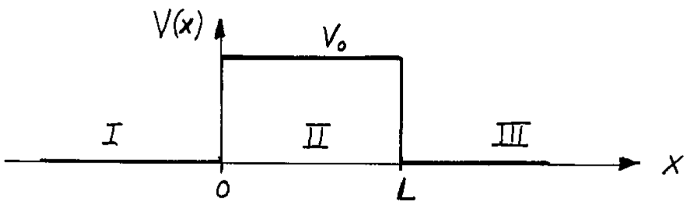
$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad \tfrac{1}{2}b < |x| < a + \tfrac{1}{2}b, \\ V_0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$



If b is chosen small compared to the penetration depths (into the regions $|x| > a+\frac{1}{2}b$), the energies E_1 and E_2 will differ *only slightly* from their values for $b = 0$. In what *directions* are E_1 and E_2 changed? [Hint: Try and sketch ψ_1 and ψ_2, starting from the curvature properties, particularly in the region $|x| < \frac{1}{2}b$.]

e. Sketch the two eigenfunctions ψ_1 and ψ_2 for the case where b is much *larger* than the penetration depths, and state what happens with the two energies in this case.

Question 2



In this one-dimensional problem a stream of particles with mass m and energy $E = \hbar^2k^2/2m$ is scattered on the potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x < 0 \;\text{ and }\; x > L, \\ V_0 & \text{for} \quad 0 < x < L. \end{cases}$$

Region II ($0 < x < L$) constitutes a potential *barrier* or a potential *well*, depending on whether V_0 is positive or negative. This problem can be treated by the use of an energy eigenfunction $\psi_E(x)$ which has the form

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + r\,e^{-ikx} \qquad \text{for} \quad x < 0,$$

and

$$\psi_{III}(x) = t\,e^{ikx} \qquad \text{for} \quad x > L.$$

Here, r and t are complex coefficients.

a. Calculate the probability current density j_{III} in region III ($x > L$) expressed in terms of the complex coefficient t. Calculate also the current density j_I in region I ($x < 0$), in terms of the coefficient r. Show that $j_I = j_i + j_r$. Here, j_i is the current density that would be obtained from the incoming wave $\exp(ikx) \equiv \psi_i$ alone, and j_r is the current density that would be obtained from the reflected wave $r\,\exp(-ikx) \equiv \psi_r$ alone.

b. Since the wave function $\Psi_E(x,t) = \psi_E(x)\exp(-iEt/\hbar)$ is stationary, there can be no accumulation of probability anywhere. What can you the say about the relation between j_I and j_{III}? What can you say about the current density j_{II} in region II ($0 < x < L$)? What are the probabilities T and R for transmission and reflection (expressed in terms of t and r)?

c. It can be shown that

$$t = e^{-ikL}\,\frac{2kq}{2kq\cos qL - i(k^2+q^2)\sin qL},$$

where

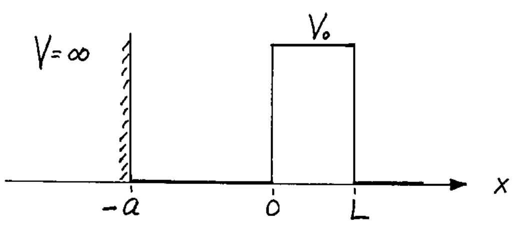
$$q = \begin{cases} \sqrt{2m(E-V_0)/\hbar^2} & \text{for} \quad E > V_0, \\ i\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2} \equiv i\kappa & \text{for} \quad E < V_0. \end{cases}$$

Use this to show that the probability of transmission is

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2\sin^2 qL}.$$

Verify that the result for T is in agreement with classical mechanics in the limit $E/|V_0| \to \infty$. Complete transmission can also be obtained under other conditions. What are these conditions?

d. In the figure below, the potential above (with $V_0 > 0$) has been modified, with a hard wall a distance a away from the barrier.



Suppose that

$$V_0 = \frac{5\hbar^2}{8m_e a_0^2}, \qquad L = 5a_0 \qquad \text{and} \qquad a = 2\pi a_0,$$

where a_0 is the Bohr radius. Suppose also that an electron with mass m_e is captured between the wall and the barrier, in a state which can at $t = 0$ be characterized by an energy and a wave function given approximately by

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}; \qquad k \approx \frac{\pi}{a}; \qquad \Psi(x,0) \approx \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin[k(x+a)] & \text{for} \qquad -a < x < 0, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

The width of the barrier is $5a_0$. Semiclassically, we can calculate a velocity $v = \sqrt{2E/m_e}$ and a collision frequency $\nu = v/2a$ with the barrier. How long time τ does it take before the probability to find the electron still captured is reduced from 1 to $1/e$? [Hint: The transmission probability for each collision with the wall is given by the formula above, with $q = i\kappa$, that is, $\sin qL = \sin i\kappa L = i \sinh \kappa L$. Note that $\ln(1-T) \approx -T$ for $T << 1$.]

Question 3

A particle with mass m is bound in a spherical-well potential

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad r < a, \\ V_0 & \text{for} \quad r > a. \end{cases}$$

To simplify the calculations we assume that V_0 is infinite, such that the potential constitutes a spherical box.

The simultaneous eigenfunctions of the Hamiltonian $\hat{H}$ and the angular-momentum operators $\hat{\mathbf{L}}^2$ and $\hat{L}_z$ can be written on the form

$$\psi_{nlm_l}(r,\theta,\phi) = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm_l}(\theta,\phi),$$

where

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm_l} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm_l} \qquad \text{and} \qquad \hat{L}_z Y_{lm_l} = \hbar m_l Y_{lm_l},$$

and

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r), \qquad (0 \le r < a).$$

It can be shown that the acceptable solutions of the radial equation behave as $u_{nl}(r) \sim r^{l+1}$ when $r \longrightarrow 0$. The quantum number n in this problem gives the number of zeros for the function $u_{nl}(r)$, counting the zero for $r = a$, but not the zero at the origin.

a. Which conditions must be satisfied by a set of operators, in order that these operators have a set of simultaneous eigenfunctions (as is the case for $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ and $\hat{L}_z$)?

How many angular functions Y_{lm_l} does one find for a given angular-momentum quantum number l?

How can it be seen (from the equations above) that the energy eigenvalues (E_{nl}) in this problem are independent of the quantum number m_l?

Argue that $u_{nl}(r)$ must be equal to zero for $r = a$. Show that $\psi_{nlm_l}(r,\theta,\phi)$ is normalized, provided that $u_{nl}(r)$ and $Y_{lm_l}(\theta,\phi)$ satisfy the conditions

$$\int_0^a [u_{nl}(r)]^2 dr = 1 \qquad \text{and} \qquad \int |Y_{lm_l}(\theta,\phi)|^2 d\Omega = 1.$$

b. Find the normalized s-wave solutions $u_{n0}(r)$ and the corresponding eigenfunctions ψ_{n00}, together with the energies E_{n0}.

c. Make a rough sketch of the potential well, together with the centrifugal barrier $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$ which enters the radial equation, for two l-values, $l = 1$ and $l = 2$. Based on this, if we keep n fixed and let l vary, which value of l must be expected to give the lowest energy, the next to the lowest, etc? (Give the order of these energies.)

What order must one expect for the energies E_{nl} for a fixed value of l and the various values of n?

What combination of n and l must be expected for the ground state?

d. The results under **c** can be checked (to a limited extent) by solving the radial equation for $l = 1$, which takes the form

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2}{r^2} + k^2 u = 0, \qquad \text{with} \quad k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

It is easy to check that this equation is satisfied by

$$u_a = \frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \qquad \text{and} \qquad u_b = -\frac{\cos kr}{kr} - \sin kr.$$

(You are not supposed to show this.) Show that only one of these solutions has the small-r behaviour that is required for $u(r)$.

Show that the function with the correct small-r behaviour gives an acceptable solution for $u(r)$ for each value of k that satisfies the condition

$$\tan ka = ka.$$

e. Make an attempt, on the basis of the results in **c** and **d**, to find an approximate result for the first excited energy level for this spherical box.

Attachment: Formulae and expressions

Some of the formulae below may turn out to be useful.

Probability current density

$$j_x(x,t) = \mathcal{R}e\left[\Psi^*(x,t)\frac{\hbar}{im}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right].$$

Laplacian in spherical coordinates. Angular-momentum operators

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}, \qquad \hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right),$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial\phi},$$

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_i] = 0 \;\; (i = x,y,z), \qquad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad \text{etc.}$$

Spherical harmonics

$$\left\{\begin{array}{c}\hat{\mathbf{L}}^2\\ \hat{L}_z\end{array}\right\}Y_{lm} = \left\{\begin{array}{l}\hbar^2 l(l+1)\\ \hbar m\end{array}\right\}Y_{lm}\;; \qquad \int Y^*_{l'm'}Y_{lm}d\Omega = \delta_{l'l}\delta_{m'm};$$

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}\,, \qquad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\cos\theta\,, \qquad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\, e^{\pm i\phi}.$$

Some physical constants

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{1}{\alpha}\,\frac{\hbar}{m_e c} = 0.529\times10^{-10}\text{m}; \qquad \alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036};$$

$$c = 2.998\times10^8\text{m/s}; \qquad \hbar = 0.6582\times10^{-15}\text{eVs}; \qquad m_e = 0.5110\ \text{MeV/c}^2.$$

Additional mathematical formulae

$$\sin(ix) = i\sinh x; \qquad \sinh x = \tfrac{1}{2}(e^x - e^{-x}); \qquad \cosh x = \tfrac{1}{2}(e^x + e^{-x});$$

$$\sin x = x - x^3/3! + x^5/5! + \mathcal{O}(x^7); \qquad \cos x = 1 - x^2/2! + x^4/4! - \mathcal{O}(x^6);$$

$$d^3r = r^2dr\,\sin\theta\,d\theta\,d\phi.$$