

מבוא לקשר כימי - קורס חלקי



תוכן העניינים

1	1. תיאוריות מוקדמות של תורת הקוונטים ומבנה האטום
26	2. תורת הקוונטים
43	3. תורת הקוונטים חלק 2
66	4. המודל הקוונטי לאטום המימן ספין והטבלה המחזורית

מבוא לקשר כימי - קורס חלקי

פרק 1 - תיאוריות מוקדמות של תורת הקוונטים ומבנה האטום

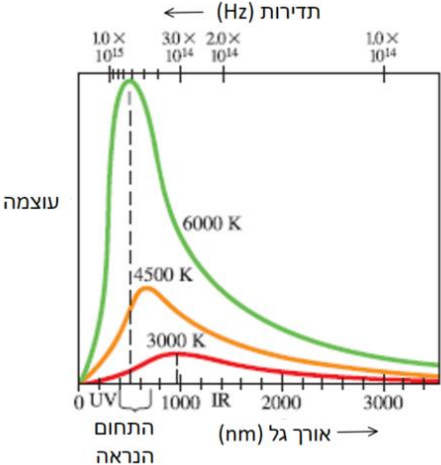
תוכן העניינים

1. תיאוריות מוקדמות של תורת הקוונטים ומבנה האטום..... 1
2. התיאוריה הפוטנית של האור והאפקט הפוטואלקטרי..... 4
3. אנרגיה מסה ותנע של פוטון..... 8
4. אפקט קומפטון..... 9
5. אינטראקציות של פוטונים ויצירת זוגות..... 11
6. דואליות גל חלקיק והאופי הגלי של החומר..... 13
7. סיכום ביניים התורה הפוטונית והשלכות (ללא ספר)..... 15
8. מודלים מוקדמים של האטום..... 16
9. מודל האטום של בוהר..... 16
10. סיכום חלק שני מודלים מוקדמים ומודל בוהר (ללא ספר)..... 20
11. בעיית שני הגופים ומסה מצומצמת..... 20
12. שאלות ותרגילים נוספים..... 21

תיאוריות מוקדמות של תורת הקוונטים ומבנה האטום:

סיכום כללי:

ההנחה הקוונטית של פלאנק וקרינת גוף שחור.

		גרף של קרינת גוף שחור כתלות באורך הגל ובטמפרטורות שונות
λ_p - אורך הגל בשיא T - הטמפרטורה בקלווין	$\lambda_p T = 2.90 \cdot 10^{-3} m \cdot K$	חוק ווין - Wien law
קבוע בולצמן $k = 1.38 \cdot 10^{-23} J \cdot K^{-1}$ קבוע פלאנק $h = 6.626 \cdot 10^{-34} J \cdot s$	$I(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2 \lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$	נוסחת פלאנק לקרינת גוף שחור
<u>ההנחה הקוונטית של פלאנק</u>	$E_{min} = hf$	אנרגיה מינימלית של מטען בתנועה הרמונית באטום
המספר הקוונטי $n = 1, 2, 3, \dots$	$E = nhf$	אנרגיית המטען חייבת להיות כפולה שלמה של הערך המינימלי

שאלות:

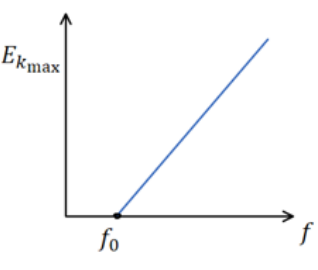
- (1) **דוגמה - טמפרטורת השמש**
הראו באמצעות חוק ווין כי הטמפרטורה על פני השמש היא באמת 6,000K אם ידוע שאורך הגל של האור הנראה הוא בערך 500nm.
- (2) **דוגמה - טמפרטורת כוכב**
טלסקופ גדול בחלל מזהה כוכב חדש. הקרינה שפולט הכוכב נקלטת בטלסקופ כאשר השיא של הקרינה הוא באורך גל של 90nm. מהי הטמפרטורה על פני הכוכב?
- (3) **טמפרטורה של מתכת**
מה הטמפרטורה של מתכת בשלב הריתוך אם שיא פליטת האור שלה באורך גל של 460nm.
- (4) **הפרש אנרגיות של מולקולה רוטטת**
מולקולת HCl רוטטת בתדירות של: $8.1 \cdot 10^{13} \text{ Hz}$. חשבו את ההפרש בין שני ערכים צמודים של האנרגיות האפשריות לפי ההנחה הקוונטית של פלאנק לערכי האנרגיה באוסילציות. תנו תשובה בג'אול ובאלקטרון וולט.
- (5) **חוק ווין וקבוע פלאנק מנוסחת הקרינה**
נוסחת פלאנק לקרינת גוף שחור היא: $I(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2 \lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$.
א. * הראו, ללא שימוש בחוק ווין, כי קבוע $\lambda_p T$, לעזרתכם פתרון המשוואה: $5e^{-x} = 5 - x$: $x = 4.966$.
ב. השתמשו בחוק ווין וחשבו את קבוע פלאנק.
ג. ** הראו כי הקרינה הנפלטת מגוף שחור פרופורציונית לטמפרטורה ברביעית - חוק סטפן - בולצמן.
הדרכה: בשביל לחשב את הקרינה הכוללת הנפלטת יש לעשות אינטגרציה על כל אורכי הגל, אין צורך לפתור את האינטגרל עד הסוף.

תשובות סופיות:

- (1) הוכחה.
- (2) 32,000K
- (3) 6,300K
- (4) $5.4 \cdot 10^{-20} \text{ J}$, 0.34eU
- (5) הוכחה.

התיאוריה הפוטונית של האור והאפקט הפוטואלקטרי:

סיכום כללי:

אנרגיה של פוטון יחיד	$E = hf$	f - תדירות האור
<u>הניסוי הפוטואלקטרי</u>		
תדירות סף	$hf_0 = W_0$	W_0 - פונקציית העבודה של המתכת
אנרגיה קינטית מקסימאלית של האלקטרונים	$E_k = hf - W_0$	
מתח עצירה	$eV_0 = E_k$	
השוואה לתורה הגלית	<u>לפי התורה הפוטונית</u> - עוצמת האור קשורה למספר הפוטונים ולא לאנרגיה של כל אחד מהם. הגדלת העוצמה תגדיל את מספר האלק' הנפלטים אבל לא את האנרגיה הקינטית שלהם. - האנרגיה של הפוטון תלויה בתדירות. - רק פוטון אחד נותן את כל האנרגיה שלו ולכן קיימת תדירות סף.	<u>לפי התורה הגלית</u> <u>אלקטרומגנטיות</u> - עוצמת האור קשורה לגודל השדה הגדלת העוצמה תגדיל את האנרגיה הקינטית של האלקטרונים. - התדירות לא משפיעה על האנרגיה של האלקטרונים.

שאלות:

- (1) **דוגמה - חישוב אנרגיית פוטון באור כחול**
חשבו את האנרגיה של פוטון באור כחול: $\lambda = 450\text{nm}$ באוויר (או וואקום).
- (2) **דוגמה - הערכה של מספר פוטונים מנורה**
נסו להעריך כמה פוטונים פולטת נורה בהספק 100W כל שניה.
הניחו שהנצילות של הנורה היא בערך 3% (כלומר רק 3% מהאנרגיה המושקעת בנורה כל שניה מנוצלת להפקה של אור). האור שיוצא מנורה לבנה הוא בכל אורכי הגל, ניתן לקחת לצורך ההערכה את אורך הגל באמצע הספקטרום של האור הנראה: $\lambda \approx 500\text{nm}$.
- (3) **דוגמה - חישוב אנרגיה של אלקטרונים נפלטים**
מהי האנרגיה הקינטית המקסימאלית ומהי המהירות המקסימאלית של אלקטרונים הנפלטים מחומר שפונקציית העבודה שלו היא: $W_0 = 2.8\text{eV}$
אם אורך הגל של האור הפוגע במשטח הוא:
א. $\lambda = 400\text{nm}$
ב. $\lambda = 600\text{nm}$
- (4) **עקיפה של קרינת גמא**
לפוטון בקרינת גמא יש אנרגיה של 380keV .
א. מהו אורך הגל של הקרינה?
ב. האם לדעתך הקרינה עושה עקיפה דרך פתחים טיפוסיים שאנחנו נתקלים ביום יום כמו פתח של דלת?
- (5) **איזו מתכת לא תפלוט אלקטרונים**
פונקציות העבודה של סודיום, צסיום, נחושת וברזל הן: $2.1, 2.3, 4.5$ ו- 4.7 אלקטרון וולט בהתאמה. אלו מהמתכות לא תפלוט אלקטרונים כאשר פוגע בה אור מהתחום הנראה?
- (6) **פונקציית עבודה ומתח עצירה**
בניסוי של האפקט הפוטואלקטרי נצפה כי לא זורם זרם כאשר אורך גל של האור הוא מעל ל- 540nm .
א. מהי פונקציית העבודה של המתכת?
ב. מהו מתח העצירה הדרושה אם מקרינים באור באורך גל של 450nm ?

(7) ניסוי פוטואלקטרי

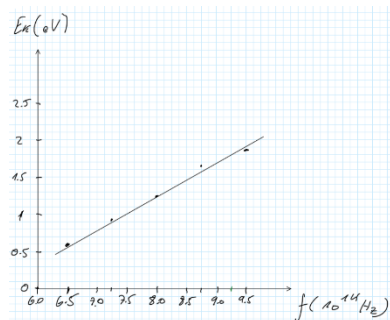
בניסוי פוטואלקטרי הקרינו אור בתדירויות שונות ומדדו את מתח העצירה. התוצאות של הניסוי מוצגות בטבלה הבאה:

$f(10^{14}\text{Hz})$	$V(V)$
6.50	0.6
7.25	0.91
8.00	1.23
8.75	1.54
9.50	1.85

- א. מצאו את האנרגיה הקינטית של האלקטרונים בפליטה ושרטטו גרף של אנרגיה זו כתלות בתדירות. השתמשו בנייר משבצות ורשמו נתונים בצורה מדויקת.
- ב. חשבו מתוך הגרף את קבוע פלאנק.
- ג. חשבו את פונקציית העבודה ותדירות הסף של המתכת.

תשובות סופיות:

- (1) 2.8eV
- (2) $8 \cdot 10^{18}$ פוטונים.
- (3) א. $3.2 \cdot 10^2 \frac{\text{m}}{\text{sec}}$ ב. לא תהיה פליטה של אלקטרונים.
- (4) א. $3.3 \cdot 10^{-3} \text{nm}$ ב. לא.
- (5) נחשת וברזל.
- (6) א. 2.3eV ב. 0.46V
- (7) א.
- ב. הוכחה.



$E_k = \text{eV}$
0.6eV
0.91eV
1.23eV
1.54eV
1.85eV

ג. $W_0 = 2.42\text{eV}$, $f = 5.84 \cdot 10^{14} \text{Hz}$

אנרגיה מסה ותנע של פוטון:

סיכום כללי:

אנרגיה של פוטון יחיד	$E = hf$	f -תדירות האור
תנע של פוטון	$p = \frac{E}{c} = h \frac{f}{c} = \frac{h}{\lambda}$	
מסת מנוחה של פוטון	$m = 0$	

שאלות:

- (1) **דוגמה - כוח שמפעילה נורה על נייר שחור**
 בדוגמה "הערכה של מספר הפוטונים מנורה" חישבנו את מספר הפוטונים שיוצאים מנורה של 100W כל שניה (בערך 10^{19}). נניח כי כל הפוטונים האלו פוגעים בנייר שחור (ולא מוחזרים) חשבו את:
 א. התנע של פוטון יחיד.
 ב. הכוח שמפועל על הנייר.

- (2) **דוגמה - יעילות של תהליך פוטוסינתזי**
 בתהליך פוטוסינתזי פיגמנטים בצמח כמו כלורופיל סופגים אור שמש ובאמצעותו הופכים פחמן דו חמצני (CO_2) לפחמימות (וחמצן שנפלט).
 בשביל להפוך מולקולה אחת של CO_2 לפחממה הצמח משתמש ב-9 פוטונים. כלורופיל סופג אור בעיקר באורך גל של 670nm. אם ידוע שהאנרגיה המשתחררת בפירוק פחממה היא: $4.9 \frac{eV}{molecule}$, מה היעילות (או נצילות) של התהליך הפוטוסינתזי?

תשובות סופיות:

- (1) א. $1.3 \cdot 10^{-27} \frac{kg \cdot m}{sec}$ ב. $10^{-8} N$
 (2) 29%

אפקט קומפטון:

סיכום כללי:

λ - אורך הגל של הקרן הפוגעת λ' - אורך הגל של הקרן המפוזרת θ - זווית ביחס לכיוון הקרן הפוגעת $\frac{h}{m_e c}$ - אורך גל של האלקטרון החופשי	$\lambda' = \lambda + \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$	הסחת קומפטון
--	--	--------------

שאלות:

(1) דוגמה - פיזור בכמה זוויות

קרני X באורך גל 0.162nm מפוזרות מסרט פחמן דק. מה יהיו אורכי הגל של הקרניים המפוזרות בזוויות?

- א. 0° .
- ב. 90° .
- ג. 180° .

(2) הסחה יחסית מקסימאלית

בפיזור קומפטון, מצאו את זווית הפיזור עבורה ההסחה (שינוי באורך הגל) היא מקסימאלית. מהי ההסחה היחסית המקסימאלית $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ עבור פוטון באורך גל: $\lambda = 500\text{nm}$ מהתחום הנראה ועבור פוטון באורך גל: $\lambda = 0.1\text{nm}$ מתחום קרינת X.

(3) פיזור רב פעמי

קרני גמא שנוצרות קרוב למרכז השמש עוברות הרבה פיזורים בזוויות קטנות עד שהן מאבדות מספיק אנרגיה והופכות לקרניים בתחום הנראה. הניחו שלפוטון בקרן גמא יש אנרגיה של 1.0MeV והפוטון עובר סדרה של התנגשויות בזוויות של 0.5° בכל התנגשות. כמה התנגשויות צריך הפוטון לעבור בשביל שאורך הגל שלו ישתנה ל- 555nm.

תשובות סופיות:

- (1) א. 0.162nm ב. 0.164nm ג. 0.167
- (2) א. $\theta = \pi$ ב. 0.00097% ג. 4.9%
- (3) $6 \cdot 10^9$ התנגשויות.

אינטראקציות של פוטונים ויצירת זוגות:

סיכום כללי:

תנאים ביצירת זוגות:

1. חייב להיווצר זוג בשביל שיתקיים שימור מטען
2. אנרגיית הפוטון שווה לאנרגיית הזוג, יש להוסיף אנרגיית מנוחה יחסותית לכל חלקיק mc^2 .
3. בשביל ליצור זוג חייבת להיות אינטראקציה עם גוף נוסף (בד"כ גרעין) כדי שיהיה שימור תנע.
4. התהליך יכול גם לקרות הפוך ונקרא אינהלציה. לדוגמה פוזיטרון פוגש אלקטרון, הם נכחדים ויוצרים פוטון.

שאלות:

- (1) דוגמה - אנרגיה מינימלית ליצירת זוגות
מצאו מהי האנרגיה המינימלית (ב-eV) ליצירת זוג אלקטרון פוזיטרון?
מה אורך הגל של הפוטון במקרה זה?
- (2) חישוב אנרגיה קינטית ביצירת זוג
חשבו כמה אנרגיה קינטית כוללת תהיה ביצירת זוג של אלקטרון פוזיטרון מתוך פוטון בעל אנרגיה של: 2.8 MeV.
- (3) אורך גל מקסימאלי ליצירת זוג
מהו אורך הגל המקסימאלי של פוטון היכול לייצר זוג של פרוטון ואנטי פרוטון (כל אחד במסה של: $1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$).
- (4) אלקטרון ופוזיטרון מייצרים שני פוטונים
אלקטרון ופוזיטרון נעים אחד כלפי השני במהירות: $10^5 \frac{\text{m}}{\text{sec}}$ כל אחד. הם מתנגשים, נעלמים ויוצרים שני פוטונים שנעים בכיוונים מנוגדים. מהן האנרגיה והתנע של כל פוטון?

תשובות סופיות:

$$(1) \quad 1.02\text{MeV} \text{ ו- } 1.2\text{pm}.$$

$$(2) \quad 1.78\text{MeV}.$$

$$(3) \quad 6.63 \cdot 10^{-16} \text{ m}.$$

$$(4) \quad p = 0.51 \frac{\text{MeV}}{c}, \quad E = 0.51\text{MeV}.$$

דואליות גל חלקיק והאופי הגלי של החומר:

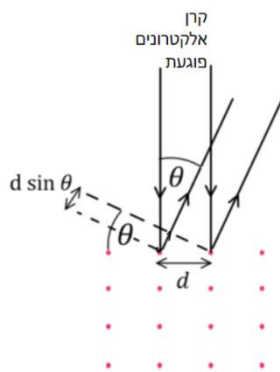
סיכום כללי:

$p = mv$ או $p = mv\gamma$	לא יחסותי או יחסותי	$\lambda = \frac{h}{p}$	אורך גל דה ברולי של חלקיק
----------------------------------	---------------------------	-------------------------	------------------------------

שאלות:

(1) דוגמה - אורך גל של כדורסל
חשבו את אורך גל דה ברולי של כדורסל השוקל חצי קילוגרם ונזרק במהירות של 10 מטר לשנייה.

(2) דוגמה - אורך גל של אלקטרון ב-100 וולט
חשבו את אורך הגל של אלקטרון המואץ תחת הפרש פוטנציאלים של 100V.



(3) דוגמה - עקיפה של אלקטרונים
מקרינים קרן אלקטרונים בניצב למשטח של חומר מוצק. האטומים בחומר מסודרים בצורת סריג ריבועי כאשר המרווח בין האטומים לא ידוע ומסומן ב- d , ראו איור. מצאו את המרחק d אם האנרגיה הקינטית של האלקטרונים היא: $E_k = 80\text{eV}$ והזווית בה מתרחשת התאבכות בונה בפעם הראשונה היא 22° . הניחו שהאנרגיה של האלקטרונים נמוכה וכי האלקטרונים עושים אינטראקציה רק עם השכבה החיצונית של החומר.

(4) כמה מתח לאורך גל
באיזה מתח צריך להאיץ אלקטרון כך שהוא יגיע לאורך גל של 0.6nm.

(5) אנרגיה ותנע מאורך גל
לאלקטרון אורך גל דה ברולי של: $\lambda = 3.2 \cdot 10^{-10}\text{m}$.
א. מהו התנע שלו?
ב. מהי מהירותו? האם היא יחסותית? רמת דיוק של 1% בגאמה.
ג. איזה מתח נדרש כדי להאיץ אותו למהירות כזו?

(6) רזולוציה של מיקרוסקופ אלקטרוני

מהו הגבול התיאורטי של הרזולוציה של מיקרוסקופ אלקטרוני שבו האלקטרונים מואצים במתח של 80 kV . יש להשתמש בנוסחאות יחסיות.

(7) אנרגיה יחסית

אלקטרון בשפופרת טלויזיה (של פעם) מואץ במתח של 33 keV .
 א. האם האנרגיה של האלקטרון יחסית? לפי רמת דיוק של אחוז אחד בגמא.
 ב. חשבו את אורך הגל של האלקטרון. האם צריך לדאוג מתופעות עקיפה? גודל פתח השפופרת הוא 5 cm .

תשובות סופיות:

- (1) $1.3 \cdot 10^{-34}\text{ m}$
 (2) $1.2 \cdot 10^{-10}\text{ m}$
 (3) 3 A
 (4) 4.17 V
 (5) א. $2.1 \cdot 10^{-24}\text{ kg} \cdot \text{sec}$. ב. $2.3 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{sec}}$, לא יחסית. ג. 15 V
 (6) $4.2 \cdot 10^{-12}\text{ m}$
 (7) א. כן. ב. $6.6 \cdot 10^{-12}\text{ m}$, אין צורך.

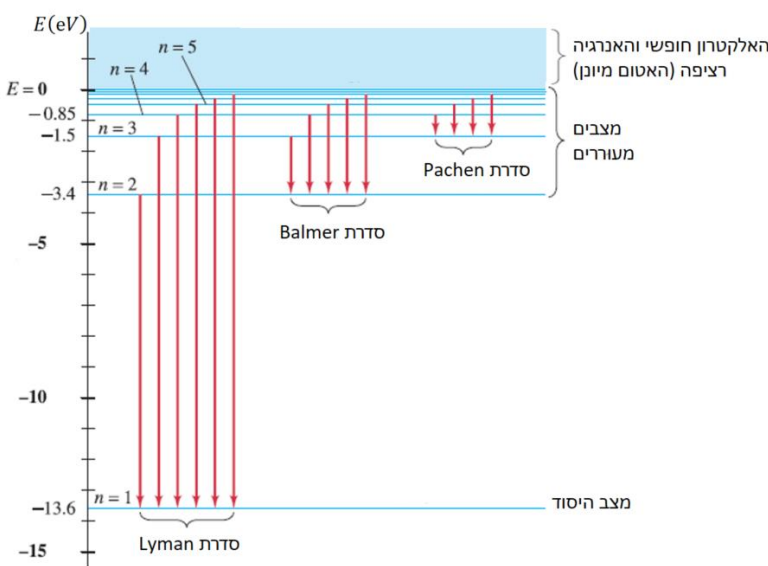
מודלים מוקדמים של האטום:

סיכום כללי:

קבוע Rydberg $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	נוסחה לאורכי הגל הנפלטים מאטום המימן $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	
1. מדוע הקרינה שנפלטת היא באורכי גל מסוימים בלבד. 2. אם האלקטרון בתאוצה כל הזמן הוא צריך לאבד אנרגיה כל הזמן ולקרוס לגרעין. אטומים לא היו צריכים להיות יציבים.		בעיות במודל הפלנטארי של ראתפורד

מודל האטום של בוהר:

סיכום כללי:

1. האלקטרונים יכולים לנוע רק במסלולים / רדיוסים ספציפיים מסביב לגרעין. המסלולים נקראים אורביטלים .		הנחות המודל
2. האלקטרונים לא מאבדים אנרגיה בתנועה המעגלית (למרות שהם בתאוצה). בגלל שהאלקטרון לא מאבד אנרגיה במצבים stationary states אלו הם נקראים מצבים יציבים		
	$hf = E_U - E_L$	אנרגיית הפוטון שווה להפרש האנרגיות בין שני מצבים
$n=1,2,3\ldots$	$L = mvr_n = \frac{nh}{2\pi}$	הנחה על התנע הזוויתי
Z - מספר הפוטונים $r_1 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi e^2 m_e} \approx 0.529 \cdot 10^{-10}$	$r_n = \frac{n^2}{Z} r_1$	הרדיוסים האפשריים
	$E = -\frac{Z^2 \cdot 13.6eV}{n^2}$	האנרגיה של האלקטרון הנמצא במסלול ה- n
		טבלה של רמות האנרגיה באטום המימן

שאלות:

- (1) **דוגמה - אורך הגל של הקו הראשון של Paschen**
השתמשו בטבלה שהוצגה בסרטון "קווי הספקטרום ממודל בוהר" ומצאו את אורך הגל של קו הספקטרום הראשון בסדרת Paschen. באיזה תחום של אורכי גל נמצא קו זה? (IR, UV או אור נראה).
- (2) **דוגמה - אורך גל מקסימלי בבליעה**
גז מימן נמצא בשפופרת בלחץ נמוך ובטמפרטורת החדר (האלקטרונים במצב היסוד). מקרינים את הגז בקרינה עם ספקטרום רציף של אורכי גל. מהו אורך הגל הכי גבוה בספקטרום הבליעה ומהו אורך הגל אחריו? השתמשו בטבלה של רמות האנרגיה באטום המימן.
- (3) **דוגמה - אנרגיית יון של יון הליום**
 He^+ הוא יון של הליום המכיל שני פרוטונים ואלקטרון אחד. השתמשו במודל בוהר וחשבו את אנרגיית היינון של He^+ , כלומר, כמה אנרגיה דרושה בשביל לנתק גם את האלקטרון היחיד שנשאר. מהו אורך הגל המקסימאלי של פוטון הגורם ליינון? הניחו שהאלקטרון במצב היסוד.
- (4) **דוגמה - אנרגיה של אטומים בטמפרטורת חדר**
לפי התיאוריה הקינטית (תיאוריה בתרמודינמיקה), האנרגיה הקינטית הממוצעת של אטום בגז (אידיאלי) היא: $\bar{E}_k = \frac{3}{2}kT$ כאשר $k = 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$. הוא קבוע בולצמן ו-T היא הטמפרטורה בקלווין. הסבירו מדוע בטמפרטורת החדר כמעט כל האטומים צריכים להיות במצב היסוד. (טמפרטורת החדר היא בערך 20 מעלות צלזיוס והטמפרטורה בקלווין שווה לטמפרטורה בצלזיוס פלוס 273).
- (5) **השוואה בין מעברים**
נתונים שלושה מעברים בין רמות אנרגיה של אטום המימן לפי מודל בוהר כאשר n הוא המצב ההתחלתי ו-n' הוא המצב הסופי.
I. $n = 1 \quad n' = 3$
II. $n = 6 \quad n' = 2$
III. $n = 4 \quad n' = 5$
א. קבעו אילו מן המעברים הם בליעה ואילו פליטה.
ב. באיזה מעבר מעורב הפוטון הכי אנרגטי?

- (6) **יינון אטום מעורר**
כמה אנרגיה דרושה על מנת ליינן אטום מימן מעורר הנמצא במצב אנרגיה החמישי?
- (7) **אורך גל של הקו השני**
מצאו את אורך הגל של הקו השני בסדרת בלמר.
- (8) **מימן בולע פוטון של הליום מיונן**
בשמש ישנם יונים של הליום - He^+ . יון של ההליום פולט פוטון במעבר מרמה 5 לרמה 2. האם אטום מימן הנמצא בשמש יוכל לבלוע את הפוטון בלי לבצע יינון? אם כן בין איזה רמות אנרגיה תתבצע הבליעה?
- (9) **אנרגיית יינון של ליתיום פלוס שתיים**
חשבו את אנרגיית היינון (ממצב הייסוד) של אטום ליתיום החסר שני אלקטרונים Li^{2+} בעל $Z = 3$ לפי מודל בוהר.
- (10) **אנרגיה קינטית של אלקטרון במצב יסוד**
מהי האנרגיה הפוטנציאלית והקינטית של אלקטרון במצב היסוד של אטום המימן?
- (11) **האם אטום המימן יחסותי**
השתמשו בתוצאה של התרגיל הקודם "אנרגיה קינטית של אלקטרון במצב ייסוד" ובדקו האם יש צורך להשתמש בנוסחאות יחסותיות במודל בוהר.
- (12) **רדיוס אטום מעורר**
אטום מימן מעורר יכול להיות תיאורטי בקוטר של 0.10mm. באיזה רמת אנרגיה נמצא אטום זה? ומהי האנרגיה של מצב זה?
- (13) **אנרגיה ותנז**
מצאו את התנע הזוויתי של אלקטרון באטום המימן אם האנרגיה שלו היא -1.5eV .
- (14) **אלקטרונים פוגעים בגז מימן**
קרן אלקטרונים בעלי אנרגיה של 12.1eV פוגעת בגז מימן הנמצא בטמפרטורת החדר (רוב האטומים במצב היסוד). מהו ספקטרום הפליטה שנצפה לראות מן הגז בעקבות פגיעת הקרן?

תשובות סופיות:

- (1) 300nm בתחום העל סגול (UV).
- (2) $\lambda_{\max} = 122\text{nm}$, $\lambda_2 = 103\text{nm}$.
- (3) 22.8nm
- (4) ראה סרטון.
- (5) א. בליעה : I , פליטה : II , בליעה : III . ב. מעבר I.
- (6) 0.544eV
- (7) 490nm
- (8) לא יוכל לקלוט.
- (9) 122.4eV
- (10) $K = 13.6\text{eV}$, $U = -27.2\text{eV}$
- (11) אין צורך.
- (12) ברמה ה-972 , האנרגיה היא : $-1.4 \cdot 10^{-J} \text{eV}$.
- (13) $3.17 \cdot 10^{-34} \text{kg} \cdot \frac{\text{m}^2}{\text{sec}}$
- (14) אורכי הגל הנצפים הם : 103nm , 656nm , 122nm

בעיית שני הגופים ומסה מצומצמת

רקע

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{r}_{rel} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$\vec{r}_{c.m.} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

שאלות

1) אטום פוזיטרוניום

אטום פוזיטרוניום הוא אטום המורכב מאלקטרון וגרעין שבו יש פוזיטרון. פוזיטרון הוא אנטי חלקיק של האלקטרון, כלומר מסתו זהה למסת האלקטרון ומטענו $+e$.

מהי האנרגיה של פוטון הנפלט במעבר מרמה $n=3$ לרמה $n=1$?

תשובות סופיות

6 eV (1)

שאלות ותרגילים נוספים:

שאלות:

- (1) **טמפרטורה של כוכב**
איזה כוכב נמצא בטמפרטורה גבוהה יותר, כוכב הנראה כחול, אדום או צהוב?
- (2) **גופים שחורים בחושך**
אם קרינה נפלטת מכל גוף, למה אנחנו לא רואים אותם בחושך?
- (3) **צבע אור של נורה**
האם האור של נורה בטמפרטורה של 3000K יראה לבן כמו האור של השמש הנמצאת ב-6000K?
- (4) **חדר חושך**
למה בחדרי חושך מאירים בנורה אדומה כשמפתחים תמונה של שחור לבן? האם ניתן להשתמש באור אדום גם בפיתוח של תמונה בצבע?
- (5) **תדירות סף מעדיפה תיאוריה פוטונית**
הסבירו למה העובדה שיש תדירות סף באפקט הפוטואלקטרי מסתדרת עם התורה הפוטונית ולא עם התורה הגלית של האור?
- (6) **אנרגיה של אינפרה אדום לעומת על סגול**
א. האם לפוטון יחיד של קרן בתחום העל סגול יש תמיד יותר אנרגיה מפוטון יחיד של קרן בתחום האינפרה אדום?
ב. האם לקרן בתחום העל סגול יש תמיד יותר אנרגיה מקרן בתחום האינפרה אדום?
- (7) **האם נפלטים יותר אלקטרונים באורך גל נמוך**
מקרינים מתכת באמצעות אור באורך גל מסוים ומודדים את האנרגיה של האלקטרונים הנפלטים. מחליפים את הקרן האור לקרן אחרת, באותה העוצמה אך עם אורך גל גדול יותר. בהנחה שבשני המקרים נפלטים אלקטרונים מן המתכת:
א. האם מספר האלקטרונים הנפלט גדל / קטן או נשאר ללא שינוי?
ב. האם האנרגיה של האלקטרונים גדלה / קטנה או נשארת ללא שינוי?

- (8) **אורך גל של פוטון בפיזור**
האם אורך הגל של פוטון בקרינת X המפוזר מאלקטרון גדל / קטן או לא משתנה?
- (9) **הבדל בין הפוטואלקטרי לקומפוטון**
באפקט קומפוטון הפגיעה של הפוטון יכולה לגרום ליציאה של אלקטרון מהמתכת, במקרה כזה מה ההבדל בינו לאפקט הפוטואלקטרי?
- (10) **איך העוצמה יורדת עם המרחק לפי כל מודל**
נניח כי ישנו מקור אור נקודתי, כיצד צריכה לרדת העוצמה של האור כתלות במרחק מהמקור לפי המודל הפוטוני וכיצד לפי המודל הגלי.
האם ניתן להבחין בין המודלים בדרך זו?
- (11) **מהם ההבדלים בין פוטון לאלקטרון**
ציינו את כל ההבדלים בין פוטון לאלקטרון.
- (12) **האם יש חמצן על כוכב**
כיצד ניתן לדעת האם יש חמצן על פני השמש או על כוכבים בכלל?
- (13) **נכונות הנוסחה של אנרגיית הפוטון**
השתמשו בשימור תנע והראו כי לפוטון הנפלט מאטום המימן יש קצת פחות אנרגיה מאשר החישוב שבנוסחה: $hf = E_U - E_L$.
- (14) **ספקטרום בליעה ופליטה בטמפרטורות שונות**
נניח שניקח את ספקטרום הפליטה של גז מימן הנמצא בטמפרטורה מאוד גבוהה כך שחלק מהאטומים נמצאים במצב מעורר ונעביר אותו דרך גז מימן הנמצא בטמפרטורה החדר (האטומים לא מעוררים) כך שתתבצע בליעה.
האם קווי הבליעה יהיו זהים לקווי הפליטה?
- (15) **אנרגיה מקסימלית להתנגשות אלסטית**
מהי האנרגיה המקסימאלית עבורה יתנגשו שני אטומי מימן הנמצאים במצב היסוד להתנגשות אלסטית?

(16) כמה פוטונים נכנסים לעין מנורה

נורה של 40W פולטת בערך 3% מהאנרגיה המושקעת בה כאור נראה באורך גל ממוצע של 550nm. האור נפלט בצורה אחידה לכל הכיוונים. העריכו כמה פוטונים פוגעים בעין של אדם הנמצא במרחק 10m מהנורה בכל שניה. קוטר האישון הוא 4.0mm.

(17) כמה פוטונים מגיעים מהשמש

עוצמת האור המגיע מן השמש היא: $I = 1350 \frac{W}{m^2}$. חשבו כמה פוטונים למטר מרובע לשנייה יש פוגעים בפני כדור הארץ מן השמש? קחו אורך גל ממוצע של 550nm.

(18) כוח של קרן לייזר

קרן לייזר באורך גל של: $\lambda = 633nm$ פוגעת בחיישן כוח. החיישן מודד כוח של: $F = 3.0nN$. כמה פוטונים פוגעים בחיישן כל שניה אם נניח שהפוטונים אינם מוחזרים?

(19) חלקיקי אלפא מתקרבים לגרעין

בחלק מהניסויים של רתפורד הוא השתמש בחלקיקי אלפא בעלי מטען $+2e$ עם אנרגיה של 3.6MeV. כמה קרוב יכלו החלקיקים להגיע למרכז גרעין של כסף המכיל מטען של $+47e$. התעלמו מהרתע של הגרעין.

(20) פוטנציאל עצירה בניסוי פוטואלקטרי

בניסוי פוטואלקטרי מקרינים מתכת באור באורך גל 440nm ומודדים כי פוטנציאל העצירה הוא 1.2V. מה יהיה פוטנציאל העצירה אם יחליפו את האור לאורך גל של 550nm.

(21) שינוי תדירות בפוטואלקטרי

בניסוי פוטואלקטרי פוטונים באנרגיה של 9.0eV פוגעים במתכת ומתח העצירה הנמדד הוא 5.0V.

א. מה תהיה האנרגיה המקסימאלית של האלקטרונים הנפלטים אם תדירות הפוטונים תקטן לחצי מהתדירות המקורית?

ב. חזרו על סעיף א אם התדירות תקטן לשליש מהתדירות המקורית.

22) מודל בוהר לשמש וכדור הארץ

נסו ליישם את המודל של בוהר לכדור הארץ והשמש.

א. מהם הרדיוסים ורמות האנרגיה? יש להשתמש ב:

$$G = 6.67 \cdot 10^{-11} \frac{\text{m}^3}{\text{sec}^2 \text{kg}}, \quad M_E = 5.97 \cdot 10^{24} \text{kg}, \quad M_S = 2 \cdot 10^{30} \text{kg}$$

ב. חשבו את רמת האנרגיה שבה נמצא כדור הארץ אם המרחק מהשמש

$$\text{הוא: } r = 1.50 \cdot 10^{11} \text{m}$$

ג. * הראו כי ההבדל בין רמות האנרגיה זניח עבור מודל זה וניתן להתייחס לאנרגיה כרציפה.

23) כוח על פנס

פנס קטן עובד בהספק של 5W כאשר כ-3% מנוצל לאור נראה. העריכו את הכוח המופעל על הפנס אם האור יוצא בכיוון אחד.

24) זמן ואורך פלאנק

נסתכל על שלושה קבועים בסיסיים בטבע קבוע הגרביטציה:

$$h = 6.63 \cdot 10^{-34} \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{sec}}, \quad G = 6.67 \cdot 10^{-11} \frac{\text{m}^3}{\text{kg} \cdot \text{sec}^2}$$

$$\text{ומהירות האור: } c = 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{sec}}$$

א. מצאו קומבינציה מתמטית של הקבועים האלו שתהיה ביחידות של זמן. זמן זה נקרא זמן פלאנק t_p והוא נחשב לזמן המוקדם ביותר מרגע תחילת הייקום שבו ניתן להפעיל את חוקי הפיזיקה כפי שאנחנו מבינים כיום. חשבו את זמן זה.

ב. מצאו קומבינציה מתמטית של הקבועים האלו שתהיה ביחידות של אורך. אורך זה נקרא אורך פלאנק λ_p והוא נחשב לאורך הקטן ביותר שבו ניתן להפעיל את חוקי הפיזיקה כפי שאנחנו מבינים כיום. חשבו את אורך זה.

תשובות סופיות:

- (1) כחול.
- (2) כי הקרינה הנפלטת היא לא בתחום הנראה.
- (3) לא, הוא יראה יותר צהוב אדום.
- (4) כי סרט שחור לבן לא מגיב לאור אדום, לא ניתן להשתמש באור אדום לפיתוח תמונה צבעונית.
- (5) לפי התורה הגלית האנרגיה של האור קשורה לעוצמת האור ולפי התורה הפוטונית לתדירות.
- (6) א. כן. ב. לא.
- (7) א. ללא שינוי. ב. קטנה.
- (8) גדל.
- (9) באפקט קומפטון הפוטון מפוזר באנרגיה יותר נמוכה לעומת הפוטואלקטרי שם תמיד כל הפוטון נבלע וכל האנרגיה שלו הולכת לאלקטרון.
- (10) לפי אחד חלקי המרחק בריבוע בשניהם ואי אפשר להבחין ביניהם.
- (11) משותף: תנע - לשניהם יש, דואליות גל חלקיק לשניהם (לשניהם יש אורך גל). שונה: פוטון נע רק במהירות האור, לפוטון אין מסת מנוחה, לפוטון אין מטען חשמלי.
- (12) לפי ספקטרום הפליטה.
- (13) ראה סרטון.
- (14) לא.
- (15) 10.2eV.
- (16) 10^{10} .
- (17) $3.7 \cdot 10^{21}$ פוטונים.
- (18) $2.9 \cdot 10^8$ פוטונים לשנייה.
- (19) $3.76 \cdot 10^{-14} \text{ m}$.
- (20) 0.64V.
- (21) א. 0.5eV. ב. לא תהיה פליטת אלקטרונים.
- (22) א. $r_n = 2.34 \cdot 10^{-138} \cdot n^2$, $E_n = -1.68 \cdot 10^{182} \cdot \frac{1}{n^2}$. ב. $n = 2.53 \cdot 10^{74}$.
- (23) ג. ראה סרטון. $5 \cdot 10^{-10} \text{ N}$.
- (24) א. $t_p = \sqrt{\frac{Gh}{c^5}} = 1.35 \cdot 10^{-43} \text{ sec}$. ב. $\lambda_p = \sqrt{\frac{Gh}{c^3}} = 4.05 \cdot 10^{-35} \text{ m}$.

מבוא לקשר כימי - קורס חלקי

פרק 2 - תורת הקוונטים

תוכן העניינים

1. הרצאות ותרגולים 26

פונקציית הגל של החומר:

סיכום כללי:

- $|\psi(x)|$ היא פונקציית הגל של החומר.
- $|\psi(x)|^2$ היא צפיפות ההסתברות למצא חלקיק בנקודה מסוימת.
- ההסתברות שחלקיק נמצא בין x_1 ל- x_2 היא: $\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx$.
- נרמול: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$.
- כאשר מתבצעת מדידה של החלקיק פונקציית הגל קורסת.
- מיקום ממוצע: $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx$.
- המיקום בעל ההסתברות הגבוה ביותר הוא נקודת המקסימום של פונקציית ההסתברות $|\psi(x)|^2$ (ניתן למצא אותו על ידי נגזרת).
- שונות: $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ כאשר $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx$.

שאלות:

- (1) דוגמה – חישוב הסתברות לדעיכה אקספוננציאלית
פונקציית הגל של חלקיק היא $4e^{-8x}$ עבור $x > 0$ ואפס עבור $x < 0$.
מה הסיכוי למצא את החלקיק ב- $x > 0.03$.

- (2) דוגמה – מצאו את המקדם

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ A \sin(20\pi x) & 0 \leq x \leq 0.05 \\ 0 & x > 0.05 \end{cases}$$

נתונה פונקציית הגל הבאה של חלקיק: $0 \leq x \leq 0.05$

מצאו את הקבוע A .

(3) דוגמה – מצאו משתנים

נתונה פונקציית גל מנורמלת לחלקיק בעל מסה M : $\psi(x) = Ae^{-\alpha(x-x_0)^2}$. מצאו את:

א. A .ב. $\langle x \rangle$.

ג. המיקום המסתבר ביותר.

ד. $\langle x^2 \rangle$.ה. Δx .

לעזרתכם: $\int_0^\infty x^2 e^{-bx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{16b^3}}$; $\int_0^\infty e^{-bx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{4b}}$

תשובות סופיות:

(1) 38%.

(2) $A = 2\sqrt{10}$.

(3) א. $A = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$ ב. x_0 ג. x_0 .

ד. $\left(\frac{\pi}{8192\alpha^3}\right)^{\frac{1}{4}} + x_0^2$ ה. $\left(\frac{\pi}{8192\alpha^3}\right)^{\frac{1}{8}}$.

עקרון אי הוודאות של הייזנברג:

סיכום כללי:

הערות		
1. אי אפשר למדוד במדויק את המיקום והתנע באותו ציר בו זמנית. 2. אותה נוסחה לכל ציר בנפרד. 3. אין בעיה למדוד במדויק את התנע ב-X והמיקום ב-Y בו זמנית.	$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.055 \cdot 10^{-34} J \cdot s$	אי ודאות מיקום תנע
1. ככל שמודדים את הזמן בדיוק גבוה יותר כך הדיוק במדידת האנרגיה קטן. 2. האנרגיה נשמרת עד כדי אי הוודאות, הגופים יכולים להיות באנרגיות האסורות קלאסית.	$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$	אי ודאות זמן אנרגיה
	$\Delta L_z \Delta \theta \geq \frac{\hbar}{2}$	אי ודאות במדידת הזווית והתנע הזוויתי

שאלות:

(1) דוגמה – מדידת מיקום

אלקטרון נע במהירות: $2.10 \cdot 10^6 \frac{m}{sec}$ שנמדדה בדיוק של 0.12%.
מה הדיוק המקסימאלי שניתן להשיג במדידה סימולטנית של המיקום?

(2) דוגמה – אי וודאות של טניס

מה היא אי הוודאות במדידת המיקום של כדור טניס בעל מסה של 150 גרם הנזרק במהירות: $35 \pm 2 \frac{m}{sec}$?

(3) אי ודאות במיקום נויטרון שנע

נויטרון נע במהירות: $(6.650 \pm 0.023) \cdot 10^5 \frac{m}{sec}$.
באיזו רמת דיוק ניתן לדעת את המיקום שלו? $m_p = 1.67 \cdot 10^{-27} kg$

(4) אנרגיה במצב מעורר

אלקטרון נשאר במצב מעורר באטום בערך $10^{-8} sec$.
מה אי הוודאות באנרגיה של המצב באלקטרון וולט?

(5) אי ודאות יחסית בפליטת פוטון

זמן החיים של אטום במצב מעורר הוא בערך 10^{-9} sec. האטום יורד מהמצב המעורר ופולט פוטון באורך גל של 400nm , מצאו את אי הודאות היחסית באנרגיית הפוטון $\frac{\Delta E}{E}$ ובאורך הגל $\frac{\Delta \lambda}{\lambda}$.

(6) אי ודאות בשל קליע באקדח

קליע בעל מסה של 5gr נורה מאקדח במהירות אופקית של $180 \frac{\text{m}}{\text{sec}}$.

- מהו אורך הגל של הקליע?
- מהי אי הודאות המינימלית במדידת המיקום של הקליע?
- מהי אי הודאות המינימלית בתנע בכיוון האנכי של הקליע אם רדיוס הקנה הוא 0.60cm ?

(7) אי ודאות במסת נויטרון

לנויטרון חופשי: $m = 1.67 \cdot 10^{-27}\text{kg}$ יש זמן חיים של 0.886sec . מה אי הודאות במדידת המסה של הנויטרון (בק"ג)?

(8) אלקטרון יורד מצב באטום המימן

אלקטרון נמצא במצב המעורר הראשון ($=2n$) של אטום המימן בממוצע 10^{-8}sec לפני שהוא יורד למצב הייסוד ($=1n$).
 א. העריכו את אי הודאות באנרגיית האלקטרון במצב $=2n$.
 ב. מהי אי הודאות היחסית באנרגיית הפוטון הנפלט?
 ג. מהו אורך הגל ורוחב הפס של קו הספקטרום הנצפה מתהליך זה?

תשובות סופיות:

$$\Delta X_{\min} = 2.3 \cdot 10^{-6}\text{m} \quad (1)$$

$$1.8 \cdot 10^{-34}\text{m} \quad (2)$$

$$1.37 \cdot 10^{-11}\text{m} \quad (3)$$

$$3 \cdot 10^{-8}\text{eV} \quad (4)$$

$$\frac{\Delta E}{E} = 4 \cdot 10^{-5}\%, \quad \left| \frac{\Delta \lambda}{\lambda} \right| = 4 \cdot 10^{-5}\% \quad (5)$$

$$7.4 \cdot 10^{-34}\text{m} \quad \text{א.} \quad 10^{-32}\text{m} \quad \text{ב.} \quad 10^{-32}\text{kg} \cdot \frac{\text{m}}{\text{sec}} \quad \text{ג.} \quad (6)$$

$$10^{-51}\text{kg} \quad (7)$$

$$3 \cdot 10^{-8}\text{eV} \quad \text{א.} \quad 3 \cdot 10^{-9} \quad \text{ב.} \quad \lambda = 122\text{nm}, \quad |\Delta \lambda| \approx 4 \cdot 10^{-7}\text{nm} \quad \text{ג.} \quad (8)$$

משוואת שרדינגר:

סיכום כללי:

משוואת שרדינגר עם תלות בזמן במימד אחד:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi(x, t)$$

תנאים נוספים:

1. פסי מנורמלת.
2. פסי יכולה להיות פונקציה מורכבת.
3. פסי רציפה.
4. הגזרת של פסי רציפה למעט נקודות בהן הפוטנציאל מתבדר.

בתלת מימד:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(x, y, z, t) + U(x, t)\Psi(x, y, z, t)$$

משוואת שרדינגר ללא תלות בזמן במימד אחד:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi$$

כאשר: $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

- התרגילים של נושא זה מופעים בנושאים הבאים.

חלקיק חופשי ובור פוטנציאל:

סיכום כללי:

חלקיק חופשי – חלקיק שנע ללא השפעת כוחות: $U(x) = 0$.
 פונקציית הגל של חלקיק חופשי: $\psi(x) = A \sin(kx)$.
 חבילת גלים: $\psi(x) = \sum_n A_n \sin(k_n x) + B_n \cos(k_n x)$.

בור פוטנציאל אינסופי:

פונקציית הגל של המצב ה- n : $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$

האנרגיה של המצב ה- n : $E_n = \frac{h^2}{8ml^2} n^2, n=1, 2, 3, \dots$

- לפי תורת הקוונטים קיימת אפשרות שהחלקיק יהיה במקום שבו האנרגיה הכוללת קטנה מהאנרגיה הפוטנציאלית, מצב שאינו אפשרי לפי המכניקה הקלאסית. באזור האסור פונקציית הגל דועכת אקספוננציאלית.

עקרונות לציור פונקציית גל:

1. ציירו את פונקציית הפוטנציאל ואת אנרגיית החלקיק.
2. עבור המצב ה- n ציירו גל עם $n-1$ נקודות צומת (לא כולל הקצוות).
3. ככל שהאנרגיה הקינטית גדולה יותר כך האמפליטודה ואורך הגל קטנים יותר (ולהיפך).
4. פונקציית הגל הולכת לאפס במיקום בו הפוטנציאל הולך לאינסוף.
5. פונקציית הגל דועכת אקספוננציאלית במקומות האסורים קלאסית. ככל שההפרש בין האנרגיה הפוטנציאלית לאנרגיה הכללית גדול יותר כך הדעיכה מהירה יותר.

מיקום ממוצע: $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx$

המיקום בעל ההסתברות הגבוהה ביותר הוא נקודת המקסימום של פונקציית ההסתברות $|\psi(x)|^2$ (ניתן למצוא אותו על ידי נגזרת).

שאלות:

- (1) **דוגמה – אלקטרון חופשי עם אנרגיה ידועה**
אלקטרון עם אנרגיה $E = 3.7\text{eV}$ נע באופן חופשי במרחב.
א. מהו אורך הגל של האלקטרון?
ב. רשמו את פונקציית הגל של האלקטרון.
אין צורך לנרמל את הפונקציה והניחו כי הפאזה היא אפס.
- (2) **דוגמה – אלקטרון באמצע הקופסה**
אלקטרון נמצא במצב היסוד בתוך קופסה קשיחה באורך l .
מצאו את ההסתברות שהאלקטרון נמצא במרחק $\frac{l}{8}$ ממרכז הקופסה (מימין או משמאל למרכז).
- (3) **דוגמה – מיקום ממוצע ומסתבר במצב המעורער הראשון**
מצאו את המיקום הממוצע והמיקום המסתבר ביותר עבור חלקיק הנמצא במצב המעורער הראשון בתוך קופסה קשיחה באורך: $2.00 \cdot 10^{-10}\text{m}$.
- (4) **דוגמה – חיידק בקופסה**
חיידק קטן בעל מסה של 10^{-13}kg מוגבל לזוז בין שני קירות קשיחים במרחק 0.1mm אחד מן השני.
א. האריכו את המהירות המינימאלית של החיידק.
ב. אם מהירות החיידק היא בערך $10^{-6} \frac{\text{m}}{\text{sec}}$, מהו המספר הקוונטי של המצב בו נמצא החיידק?
- (5) **דוגמה – חלקיק בבור סופי**
חלקיק בעל מסה M נמצא בבור פוטנציאל הנתון לפי הפונקציה הבאה:
- $$U(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq L \\ U_0 & L < x \end{cases}$$
- אנרגיית החלקיק E נתונה וקטנה מ- U_0 .
- א. מצאו את פונקציית הגל בכל המרחב ללא מציאת המקדמים הקבועים של הפונקציה בכל תחום.
ב. השתמשו בתנאי השפה (פונקציית הגל רציפה והנגזרת רציפה) בשביל למצא משוואה ממנה ניתן לחשב את הערכים האפשריים של האנרגיה. הראו כי מתקיים הקשר:
- $$\tan(kL) = -\frac{k}{\alpha} \quad \text{כאשר} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$$

ג. מצאו מהו תחום הערכים האפשריים של kL והראו כי :

$$|\sin(kL)| = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$$

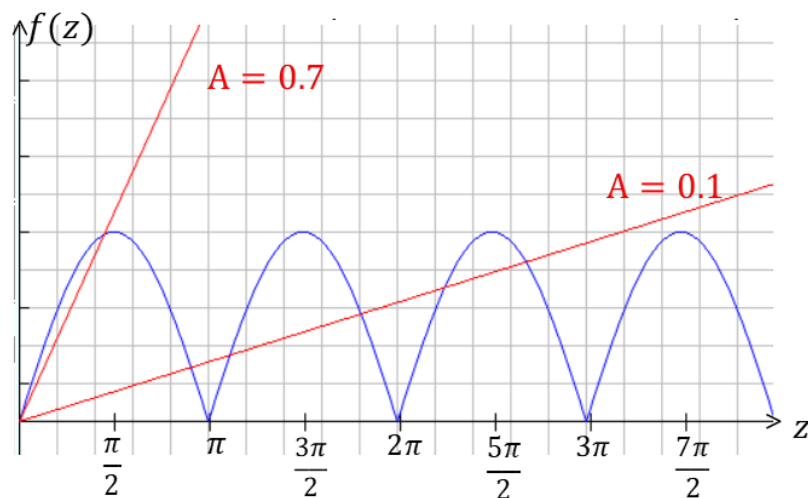
ד. כתבו את המשוואה של סעיף ג' באמצעות המשתנים : $z = kL$

ו- $A = \frac{\hbar}{L\sqrt{2mU_0}}$ כעת ניתן לפתור את הבעיה באמצעות פתרון גרפי.

הפתרונות הן נקודות החיתוך של הפונקציות משני צידי המשוואה.

סמנו את נקודות הפתרון בגרף הבא עבור : $A = 0.1$ ו- $A = 0.7$.

הקפידו על תחום ההגדרה של סעיף ג'.



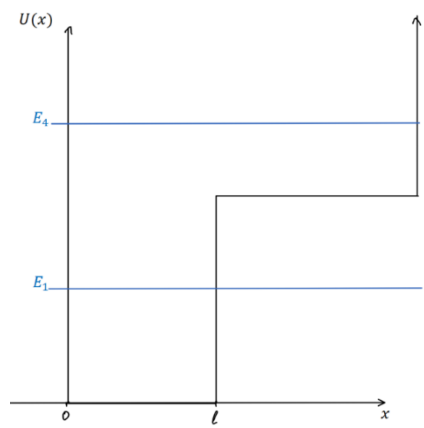
ה. מהו התנאי על A עבורו אין פתרון למשוואה?

מה המשמעות הפיזיקאלית של מצב זה?

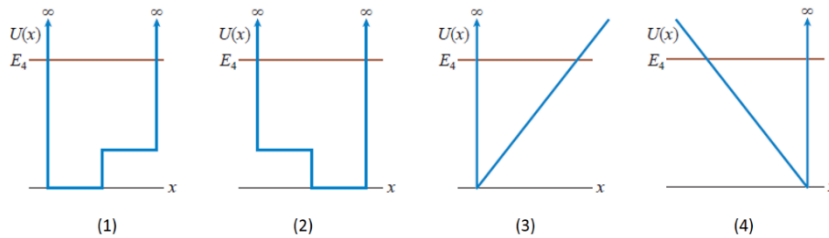
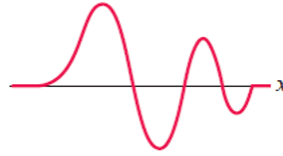
6) דוגמה – בור אינסופי עם מדרגה

באיור נתונה פונקציית פוטנציאל של בור פוטנציאל אינסופי עם מדרגת

פוטנציאל. ציירו את פונקציית הגל עבור האנרגיות E_1 ו- E_4 באיור.



(7) דוגמה – התאימו פוטנציאל לפונקציית הגל
איזה מהגרפים הבאים מתאר את הפוטנציאל של פונקציית הגל הבאה :



תשובות סופיות:

(1) א. $6.38 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. ב. $\psi(x) = A \sin(9.84 \cdot 10^{-9} \text{ m}^{-1} \cdot x)$

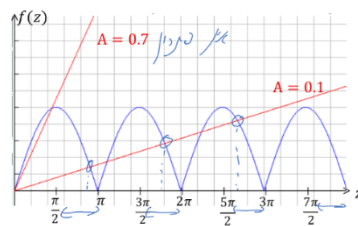
(2) .47.5%

(3) ממוצע: $\langle x \rangle = \frac{l}{2}$, מסתבר: $\frac{l}{4}$, $\frac{3l}{4}$

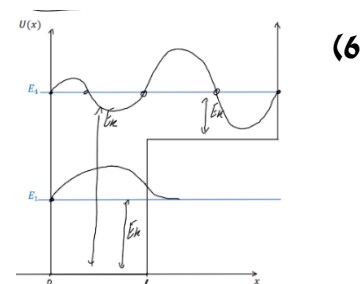
(4) א. $3 \cdot 10^{-17} \frac{\text{m}}{\text{sec}}$. ב. $3 \cdot 10^{-10}$

(5) א. $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{-\alpha x} & 0 < x < L \end{cases}$ כאשר: $\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

ב. הוכחה. ג. $\frac{\pi}{2} + \pi n < KL < \pi + \pi n \quad n = 0, 1, 2, \dots$



ד. $|\sin(z)| = Az$. ה.



(7) 4.

מנהור (tunneling):

סיכום כללי:

ההסתברות שהחלקיק יעבור את המחסום. l - אורך המחסום $T \ll 1$ רק עבור	$T \approx 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) e^{-2\alpha l}$ $\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$	מקדם ההעברה
	$R = 1 - T$	מקדם החזרה

שאלות:

(1) דוגמה – אלקטרון חודר מחסום

אלקטרון חופשי בעל אנרגיה של 40eV נע במרחב ונתקל במחסום פוטנציאל בעל אנרגיה של 60eV. מה ההסתברות שהאלקטרון יעבור את המחסום אם עובי המחסום הוא:

א. 1.0nm
ב. 0.1nm

(2) נתונים של אלקטרון חופשי

פונקציית הגל של אלקטרון חופשי היא: $\psi(x) = A \sin(\pi \cdot 10^{10} x)$ כאשר x במטרים. מצאו את:

א. אורך הגל והתנע של האלקטרון.
ב. מהירות האלקטרון.
ג. אנרגיית האלקטרון.

(3) מהירות מינימלית בבור אינסופי

מהי המהירות המינימלית של אלקטרון הנמצא בבור פוטנציאל אינסופי ברוחב 0.30nm?

(4) אי ודאות במצב היסוד*

חלקיק נמצא במצב היסוד בתוך בור פוטנציאל אינסופי. הראו כי יחס אי הודאות מתקיים עבור מצב זה. עבור Δx ניתן לקחת את רוחב הבור (או יותר מדויק רוחב הבור חלקי 4π). התנע של החלקיק אמנם ידוע מתוך האנרגיה אבל הכיוון שלו אינו ידוע, התנע יכול להיות חיובי או שלילי ולכן אי הודאות בתנע היא $2p$.

(5) הסתברות למצא אלקטרון בבור

אלקטרון נמצא בקופסה סגורה וקשיחה ברוחב 1.00nm . מה ההסתברות למצא את האלקטרון במרחק 0.10nm ממרכז הקופסה, מכל צד, עבור המצב:

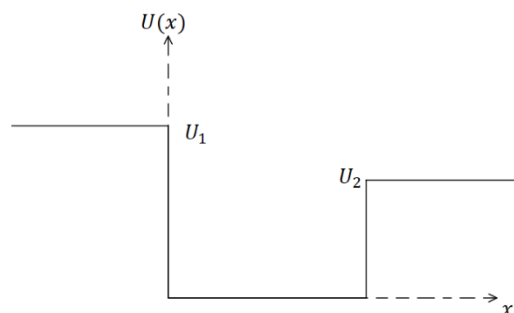
- $n = 1$
- $n = 4$
- $n = 20$
- השוו למקרה הקלאסי.

(6) בור אינסופי מוזז

מצאו את פונקציות הגל עבור בור פוטנציאל אינסופי ברוחב l הנמצא מ- $x = -\frac{l}{2}$ ועד $x = \frac{l}{2}$ (במקום מ-0 עד l). האם רמות האנרגיה משתנות?

(7) בור סופי עם קירות שונים

חלקיק נמצא תחת הפוטנציאל הנתון באיור. שרטטו את פונקציית הגל עבור שלושת המצבים הבאים:
 א. החלקיק במצב המעורר הראשון ו- $E < U_2$.
 ב. $U_2 < E < U_1$.
 ג. $U_1 < E$.



(8) זרם פרוטונים עובר מחסום

זרם של 1.2mA המכיל פרוטונים באנרגיה 1.8MeV נתקל במחסום פוטנציאל בגובה 2.0MeV וברוחב $5.0 \cdot 10^{-14}\text{m}$. מהו הזרם המועבר?

תשובות סופיות:

(1) א. $4.86 \cdot 10^{-18}\%$ ב. 3.67%

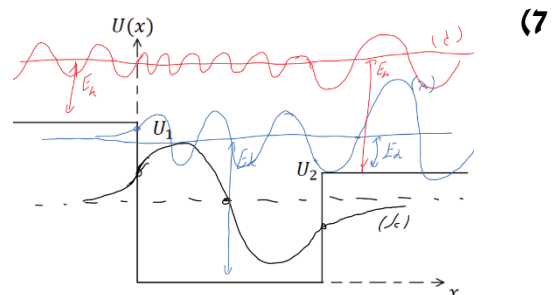
(2) א. $p = 3.3 \cdot 10^{-24}\text{kg} \cdot \frac{\text{m}}{\text{sec}}$, $\lambda = 2 \cdot 10^{-10}\text{m}$ ג. $3.64 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{sec}}$ ד. 38eV

(3) $1.2 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{sec}}$

(4) הוכחה.

(5) א. 0.387 ב. 0.153 ג. 0.2 ד. 0.2

(6) $\sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi nx}{l} + \frac{\pi n}{2}\right)$, לא משתנות.



(8) 96nA

אוסילטור הרמוני:

סיכום כללי:

$$\psi_1(x) = (\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

$$\psi_2(x) = (\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} \frac{x}{b} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

$$\psi_3(x) = 8\sqrt{3}(\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} \left(1 - \frac{2x^2}{b^2}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \quad \text{פונקציות הגל:}$$

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$E_n = \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \text{כאשר } n=1,2,3,\dots \quad \text{רמות האנרגיה:}$$

$$(n=0,1,2,\dots \text{ כאשר } E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega) \quad \text{או}$$

פתרון כללי ל

שאלות:

- (1) דוגמה – אלקטרון בתנודה הרמונית פולט פוטון
אלקטרון הנמצא באוסילטור הרמוני קוונטי פולט פוטון באורך גל של 400nm
כאשר הוא יורד רמת אנרגיה אחת.
א. האם ניתן לדעת באיזה רמת אנרגיה היה האלקטרון?
ב. מהו "קבוע הקפיץ"?

- (2) דוגמה – איזה פונקציית הסתברות מתאימה
איזו פונקציית הסתברות מתאימה לחלקיק הנמצא תחת פוטנציאל של
אוסילטור קוונטי עם אנרגיה: $E = \frac{7}{2} \hbar \omega$



תשובות סופיות:

- (1) א. לא. ב. $0.02 \frac{N}{m}$.
- (2) 4.

תרגילים נוספים:

שאלות:

- (1) **פונקציית חומר מול פונקציות גל אחרות**
השוו בין פונקציית הגל של החומר ψ לבין:
א. פונקציית הגל של מיתר.
ב. פונקציית גל של גל אלקטרומגנטי.
- (2) **מודל בוהר וקוונטים**
מה ההבדל בין המודל האטומי של בוהר למכניקת הקוונטים?
רמז: עיקרון אי הוודאות.
- (3) **האם אפשר לאזן מחט**
האם אפשר לאזן מחט כך שהיא תעמוד על החוד שלה באופן מוחלט?
- (4) **ניוטון וקוונטים**
באיזה אופן התורה של ניוטון שונה מתורת הקוונטים?
- (5) **מיקום מדויק**
האם עקרון אי הודאות מגביל את הדיוק שבו ניתן למדוד את המיקום של גוף?
- (6) **למי יש יותר סיכוי לעבור מחסום**
אטום מימן ואטום הליום בעלי אנרגיה זהה מתקרבים למחסום פוטנציאל ברוחב סופי עם אנרגיה פוטנציאלית גבוהה מהאנרגיה שלהם.
למי סיכוי גדול יותר לעבור את המחסום?
- (7) **חיים של בוזון Z^0**
בוזונים הם שם לקבוצת חלקיקים נשאי כוח (עם ספין שלם). הבוזון Z^0 קשור ל"כוח החלש" (כוח שפועל בתוך הגרעין) ודועך מאוד מהר. האנרגיה הממוצעת שלו היא 91.9 GeV והרוחב במדידת האנרגיה הוא 2.5 GeV .
מהו זמן החיים המוערך של הבוזון Z^0 ?

(8) כדור מקפץ

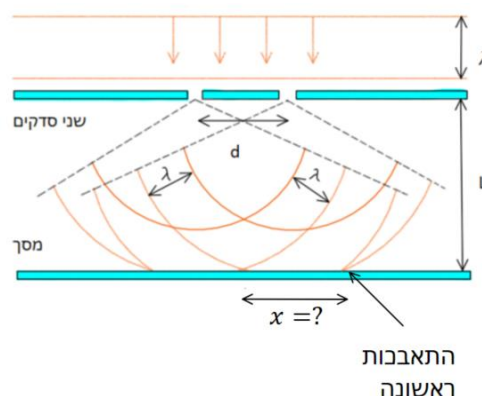
כדור קטן במסה 10^{-6} kg משוחרר ממנוחה בגובה 2 m מעל הרצפה. הכדור פוגע ברצפה וקופץ חזרה. לאחר כל פגיעה ברצפה הכדור מגיע חזרה ל-60% מהגובה הקודם בגלל איבוד אנרגיה בהתנגשות עם הרצפה. כמה פעמים צריך הכדור לפגוע ברצפה עד שאי הודאות במהירות שלו תהיה משמעותית (כלומר בסדר גודל של המהירות עצמה). הניחו שאי הודאות במדידת המיקום היא בסדר גודל של הגובה הנמדד.

(9) פונקציית גל נתונה

- נתונה פונקציית הגל הבאה: $\psi(x) = b^{-\frac{1}{2}} \left| \frac{x}{b} \right|^{\frac{1}{2}} e^{-(x/b)^2/2}$, כאשר $nmb = 0.5$.
- בדקו כי פונקציית הגל מנורמלת.
 - מהו המיקום המסתבר ביותר בו נמצא החלקיק בתחום $x > 0$?
 - מה ההסתברות למצא את החלקיק בין $x = 0$ ל- $x = 0.50 \text{ nm}$?

(10) נויטרונים בניסוי שני סדקים

- עורכים את ניסוי שני הסדקים עם נויטרונים בעלי אנרגיה של 0.0040 eV . המרחק בין הסדקים הוא $d = 0.70 \text{ mm}$ והמרחק למסך הוא $L = 1.0 \text{ m}$. מהו המרחק מהמרכז בו תופיע ההתאבכות הראשונה? $m_p = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.



תשובות סופיות:

- (1) א. חומר : פונקציה סקלרית, מתארת הסתברות וללא תווך.
מיתר : פונקציה סקלרית, מתארת תנודה, דרוש תווך.
ב. א"מ : פונקציה וקטורית, מתארת הסתברות ואת האמפליטודה של השדה החשמלי והמגנטי, ללא תווך.
- (2) ראו סרטון.
- (3) לא.
- (4) בתורה של ניוטון ניתן לחשב את המיקום והתנע באופן מדויק בזמנית, כתוצאה מכך ניתן תיאורטית לצפות בדיוק את ההתנהגות של מערכת בעתיד. לפי תורת הקוונטים יש אי ודאות במדידות ולכן ניתן לצפות רק הסתברויות להתנהגות המערכת בעתיד.
- (5) לא.
- (6) מימן.
- (7) $1.3 \cdot 10^{-25} \text{ sec}$
- (8) .70
- (9) א. הוכחה. ב. 0.35 nm ג. 63%
- (10) $6.5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$

מבוא לקשר כימי - קורס חלקי

פרק 3 - תורת הקוונטים חלק 2

תוכן העניינים

1. הרצאות ותרגילים 43
2. זרם ההסתברות 65

מהירות הפאזה, יחס דיספרסיה ומהירות החבורה

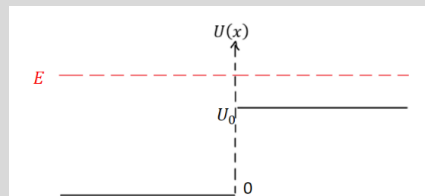
סיכום כללי

שם	נוסחה	הערות
מהירות הפאזה	$v_{ph} = \frac{\omega}{k}$	המהירות של אורך גל מסוים
מהירות החבורה	$v_g = \frac{d\omega}{dk}$	מהירות של כל הפונקציה או סכום כל הגלים (חבילת הגלים)
יחס הדיספרסיה	הקשר בין ω ל- k	

פיזור

סיכום כללי

שם	נוסחה	הערות
מקדם ההעברה	$T = \frac{ C ^2}{ A ^2}$	ההסתברות שהחלקיק יעבור את המחסום במקרה שבו k_2 בתחום אליו החלקיק עובר שונה מ-k_1 בתחום ממנו החלקיק הגיע $T = \frac{ C ^2 k_2}{ A ^2 k_1}$
מקדם החזרה	$R = \frac{ B ^2}{ A ^2}$	ההסתברות שהחלקיק יוחזר מהמחסום
עבור מדרגת פוטנציאל וכאשר $E > U_0$	$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} ; R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$	



- כאשר $E < U(\pm\infty)$ נקבל מצבים קשורים, החלקיק "כלוא" ורמות האנרגיה בדידות.
- כאשר $E > U(\pm\infty)$ נקבל פיזור, החלקיק יגיע לאינסוף ורמות האנרגיה רציפות.

שאלות

(1) פיזור מפוטנציאל מלבני

חלקיק חופשי בעל מסה m נע משמאל לימין ונתקל בפוטנציאל מלבני בגובה U_0 וברוחב L המתחיל ב- $x = 0$. אנרגיית החלקיק היא E וקטנה מ- U_0 . א. הראו כי הפתרון הכללי לפונקציית הגל הוא מצורה:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x} & 0 < x < L \\ Fe^{ikx} & L < x \end{cases}$$

$$\text{כאשר: } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ ו- } \alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$$

ב. רשמו את תנאי השפה והראו כי הקשר בין הקבועים נתון לפי המשוואות:

$$A + B = C + D$$

$$ik(A - B) = \alpha(C - D)$$

$$Ce^{\alpha L} + De^{-\alpha L} = Fe^{ikL}$$

$$\alpha(Ce^{\alpha L} - De^{-\alpha L}) = ikFe^{ikL}$$

ג. פתרו את המשוואות (רצוי באמצעות מחשב) והראו כי:

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{1}{\cosh^2(\alpha L) + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 \sinh^2(\alpha L)}$$

$$\text{כאשר: } \gamma = \frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}$$

ד. הראו כי במקרה של $e^{-\alpha L} \ll 1$ מקדם ההעברה הוא בקירוב:

$$T \approx 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) e^{-2\alpha L}$$

ה. כעת הניחו ש- $E > U_0$, מצאו את מקדם ההעברה במקרה זה. הדרכה: חזרו על השלבים שבסעיפים א - ג עבור מקרה זה.

$$\text{רמז: } \cosh(ik) = \cos(k) \text{ ו- } \sinh(ik) = i \sin(k)$$

(2) חלקיק עובר מעל בור פוטנציאל סופי

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ U_0 & L < x \end{cases}$$

חלקיק בעל מסה m נע משמאל בהשפעת הפוטנציאל: $0 < x < L$

כאשר אנרגיית החלקיק E נתונה וגדולה מ- U_0 .

א. מצאו את מקדם ההעברה.

ב. עבור אילו מצבים הבור "שקוף" לתנועת החלקיק? האם המצבים מוכרים לכם?

(3) מקדם החזרה בפגיעת אלקטרון בשפת מתכת

במקרה של פליטת אלקטרונים ממתכת, חלק מהאלקטרונים עם אנרגיה מספיקה ליציאה מהמתכת עדיין יכולים להיות מוחזרים משפת המתכת.

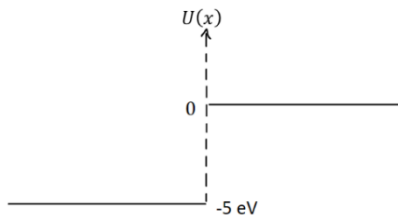
במודל חד מימדי נניח כי פוטנציאל האלקטרון בתוך המתכת ($x < 0$) שווה ל-

-5eV והפוטנציאל הוא אפס מחוץ למתכת ($x > 0$).

מהו מקדם ההחזרה של האלקטרון משפת המתכת אם אנרגיית האלקטרון היא

א. 90eV

ב. 0.4eV

**תשובות סופיות**

(1) א-ד. שאלות הוכחה. ה. $T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{1}{\cos^2(k_2 L) + \left(\frac{\tilde{\gamma}}{2} \right)^2 \sin^2(k_2 L)}$

כאשר: $\tilde{\gamma} = \frac{k_2}{k} + \frac{k}{k_2}$ ו- $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - v_0)}}{\hbar}$

(2) א. $T = \frac{1}{\cos^2(k_2 L) + \left(\frac{\tilde{\gamma}}{2} \right)^2 \sin^2(k_2 L)}$ כאשר: $\tilde{\gamma} = \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1}$ ו- $k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

ב. $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$ כן.

(3) א. $1.83 \cdot 10^{-4}$ ב. 0.328

פונקציית דלתא של דיראק

סיכום כללי

הגדרת הפונקציה :

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}$$

או

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

או

$$\delta_a(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2}$$

כאשר a הולך לאפס.

תכונה :

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a) dx = f(a)$$

פיזור מפונקציית דלתא :

עבור :

$$V(x) = -a\delta(x)$$

כאשר $E < 0$:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{am}}{\hbar} e^{-\frac{am}{\hbar^2}|x|}$$

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

מקבלים מצב אחד בלבד, לא משנה מה הערך של a (גודל הבור).

כאשר $E > 0$ וחלקיק שמגיע משמאל :

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ikx} & x > 0 \end{cases}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2}$$

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \beta^2}$$

$$\beta = \frac{am}{\hbar^2 k}$$

עבור :

$$V(x) = +a\delta(x)$$

E חייב להיות גדול מאפס והפתרון זהה לפתרון במקרה של הפוטנציאל השלילי כאשר $E > 0$.

שאלות

1) פוטנציאל דלתא בתוך בור אינסופי**

אלקטרון נמצא בבור פוטנציאל ברמה השנייה. הבור הוא אינסופי אך במרכז יש פוטנציאל דלתא, כלומר :

$$V(x) = \infty, |x| > \frac{l}{2}$$

$$V(x) = a\delta(x), |x| < l/2$$

א. מצאו את הפתרונות עבור משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן. הפרידו בין הפתרונות הסימטריים לאנטי סימטריים ומצאו את האנרגיות המתאימות לכל פתרון. עבור הפתרונות הסימטריים הראו רק כי המשוואה ממנה ניתן לקבל את רמות האנרגיה היא מהצורה: $\tan\left(k\frac{l}{2}\right) = -\frac{\hbar^2 k}{am}$ וציירו פתרון גרפי כללי למשוואה. בשני המקרים אין צורך לנרמל את הפתרונות.

ב. דונו במקרה ש- $a \ll \frac{\hbar^2}{ml}$ ובמקרה ש- $a \gg \frac{\hbar^2}{ml}$.

ג. האלקטרון יורד לרמת היסוד ופולט פוטון, מהי האנרגיה של הפוטון הנפלט ב- eV אם: $l = 2.7nm$ ו- $a = 2 \cdot 10^{-27} j \cdot m$.

(2) קרן אלקטרוניים עוברת שתי דלתות

קרן אלקטרוניים מפוזרת על ידי מחסום פוטנציאל המורכב שתי פונקציות דלתא זהות במרחק l . כלומר: $V(x) = a\delta(x) + a\delta(x-l)$. חשבו בקירוב את האנרגיה הכי נמוכה של אלקטרון עברה אין החזרה של הקרן (כל האלקטרוניים עוברים דרך המחסום).

$$a = 1.9 \cdot 10^{-27} \text{ J} \cdot \text{m}, l = 4.2 \text{ nm}$$

(3) קרן עוברת דרך שתי דלתות ומדרגה

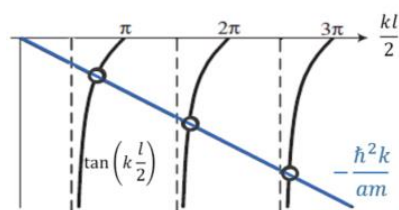
קרן אלקטרוניים מגיעה משמאל לפוטנציאל הבא:

$$V(x) = U(x) + a\delta(x) + a\delta(x-l)$$

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & 0 < x < l \\ 0 & \text{אחרת} \end{cases}$$

מצאו את רמת האנרגיה הרביעית עברה אין החזרה של הקרן, יש להשתמש בפתרון גרפי ולבטא ב- eV .

$$\text{נתון: } a = 0.63 \cdot 10^{-28} \text{ J} \cdot \text{m}, U_0 = 4.7 \text{ eV}, l = 0.2 \text{ nm}$$

תשובות סופיות**(1) א. פתרון גרפי למצבים הסימטריים:**

$$\text{האנרגיות של המצבים האנטי סימטריים: } n = 2, 4, 6, \dots \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$$

ב. האנרגיות של הפונקציות האנטי סימטריות לא מושפעות מ- a עבור $a \ll \frac{\hbar^2}{ml}$. האנרגיות של הפונקציות הסימטריות שואפות לאנרגיות שלהם בבור אינסופי (ללא דלתא). עבור $a \gg \frac{\hbar^2}{ml}$ האנרגיות של הפונקציות הסימטריות שואפות

$$\text{לאנרגיות של בור אינסופי ברוחב } \frac{l}{2} \quad \text{ג. } 0.3 \text{ eV}$$

$$0.02 \text{ eV} \quad (2)$$

$$125 \text{ eV} \quad (3)$$

פוטנציאלים תלת מימדיים

סיכום כללי

פונקציית הגל והאנרגיות של תיבה תלת מימדית:

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right)$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

אוסילטור הרמוני תלת מימדי:

$$v(x, y, z) = \frac{1}{2} k_x x^2 + \frac{1}{2} k_y y^2 + \frac{1}{2} k_z z^2$$

האנרגיה של אוסילטור תלת מימדי:

$$E = \left(n_x - \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_x + \left(n_y - \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_y + \left(n_z - \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_z$$

ניוון - כאשר לכמה מצבים (פונקציות גל) שונים יש את אותה האנרגיה. אי אפשר לדעת את המצב של החלקיק מהאנרגיה בלבד.

ניוון היא תופעה שלא מתרחשת במימד אחד

דרגת הניוון מוגדרת לפי מספר המצבים הקוונטים שיש לאנרגיה.

שאלות

(1) אוסילטור ב-Z בור ב-X ו-Y

חלקיק בעל מסה m נמצא תחת הפוטנציאל הבא :

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

כאשר :

$$V_1(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad V_2(y) = \begin{cases} 0, & 0 < y < a \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}, \quad V_3(z) = \begin{cases} 0, & 0 < z < b \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

כמו כן נתון כי :

$$\hbar \omega = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$b = 2a$$

- א. מהי האנרגיה של הרמה המעורערת החמישית?
- ב. מהי דרגת הניוון של רמה זו?
- ג. מהי פונקציית הגל של חלקיק שנמצא ברמת אנרגיה זו?

תשובות סופיות

(1) א. $E = 2.75 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$ רמה 5. ב. 2

ג.
$$\psi(x, y, z) = \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) e^{-\frac{z^2 \pi^2 \hbar^2}{4L^2}} \left[\alpha \sin\left(\frac{\pi}{2L}y\right) \left(1 - \left(\frac{\pi z}{L}\right)^2\right) + \beta \sin\left(\frac{3\pi}{2L}y\right) \right]$$

פונקציית הגל כתלות בזמן

סיכום כללי

ניתן לקבל את פונקציית הגל הכללית, הפותרת את משוואת שרדינגר התלויה בזמן על ידי קומבינציה לינארית של פונקציות הגל המתקבלות במצבים עמידים (מתוך פתרון משוואת שרדינגר הבלתי תלוי בזמן).

$$\Psi(x, t) = \sum_n \alpha_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

כאשר - הן פתרונות המצבים העמידים ו - היא האנרגיה של כל מצב.

את המקדמים ניתן למצוא לפי (בהנחה שהפונקציות שמתקבלות מהמצב העמיד הן אורתונורמליות).

$$\alpha_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) dx$$

ו - $|\alpha_n|^2$ הן ההסתברות להיות במצב מסוים.

יוצא גם שאם $\Psi(x, 0)$ מנורמלת אז $\Psi(x, t)$ מנורמלת לכל t .

שאלות

(1) רשמו פונקציית גל

חלקיק בעל מסה m נמצא תחת פוטנציאל מהצורה $\frac{1}{2} kx^2$.

ב- $t = 0$ לחלקי הסתברות של 75% להיות במצב ייסוד ו- 25% להיות במצב המעורר הראשון. רשמו את פונקציית הגל של החלקיק כתלות בזמן. פונקציות הגל של מצב היסוד והמצב המעורר הראשון הן:

$$\psi_1(x) = (\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

$$\psi_2(x) = (\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} \frac{x}{b} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$$

כאשר $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ והאנרגיות הן:

$$E_n = \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

(2) מסת חלקיק מפונקציית הגל

נתונה פונקציית גל (חד מימדית) של חלקיק חופשי

$$\Psi(x, t) = A e^{i\left(\frac{x}{L} - \frac{t}{\tau}\right)}$$

כאשר A , L , τ קבועים חיוביים נתונים. מהי מסת החלקיק?

תשובות סופיות

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{3}}{2} \psi_1(x) e^{-i\frac{1}{2}\omega t} + \frac{1}{2} \psi_2(x) e^{-i\frac{3}{2}\omega t} \quad (1)$$

$$m = \frac{\hbar \tau}{2L^2} \quad (2)$$

אופרטורים

סיכום כללי

אופרטור - לכל גודל פיזיקאלי ניתן לשייך אופרטור. כאשר שמים את האופרטור בין ψ ל- ψ^* ועושים אינטגרל על כל המרחב (סנוויץ) הוא נותן את ערך התוחלת של הגודל הפיזיקאלי אליו הוא שייך.

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q} \psi dx$$

אופרטור המיקום: $\hat{x} = x$

אופרטור התנע בממד אחד: $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

כל אופרטור אחר יהיה פונקציה של אופרטור המיקום והתנע:

$$Q(x, p, t) \rightarrow \hat{Q}\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} t\right)$$

כאשר מכפילים אופרטור בפונקציה אומרים שהאופרטור "פועל" על הפונקציה. אם $\hat{Q}\psi = \lambda\psi$, אז ψ היא פונקציה עצמית של האופרטור ו- λ הוא ערך עצמי (ע"ע) של האופרטור.

הפונקציות העצמיות של אופרטור התנע הן: $\psi(x) = Ae^{ikx}$ והערכים העצמיים הם: $\hbar k$.

הפונקציות העצמיות של אופרטור המיקום הן: $\delta(x - a)$ והערכים העצמיים הם a (המיקום עצמו).

אופרטור ההמילטוניאן (מודד את האנרגיה):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

אפשר לכתוב את משוואת שרידנגר הבלתי תלויה בזמן באמצעות ההמילטוניאן. הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן הן הפתרונות של משוואת שרידנגר הבלתי תלויה בזמן והאנרגיות הן הערכים העצמיים של ההמילטוניאן.

שאלות

(1) המילטוניאן ומדידת אנרגיה בבור פוטנציאל

חלקיק בעל מסה m נמצא בבור פוטנציאל ברוחב $0 < x < l$.
 א. מצאו את המצבים העצמיים ואת הערכים העצמיים של ההמילטוניאן.
 כעת נניח כי פונקציית הגל של החלקיק ברגע מסוים היא:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_2(x)$$

כאשר $\psi_1(x)$ ו- $\psi_2(x)$ הן פונקציות הגל של האנרגיות E_1 ו- E_2 בבור בהתאמה.
 ב. האם פונקציה זו היא פונקציה עצמית של ההמילטוניאן?
 ג. מהי האנרגיה הממוצעת של החלקיק במצב הנ"ל?
 האם ניתן למצא את החלקיק באנרגיה זו?

(2) חלקיק בצד ימין של בור פוטנציאל

חלקיק בעל מסה m נמצא בבור פוטנציאל אינסופי ברוחב l .
 נתון כי בזמן $t = 0$ לחלקיק הסתברות שווה להיות בחצי הימני של הבור.
 א. מהי פונקציית הגל של החלקיק ב- $t = 0$?
 ב. מצאו את פונקציית הגל של החלקיק כתלות בזמן.
 שערך ללא חישוב האם החלקיק יישאר בחצי הימני של הבור?
 ג. מהי ההסתברות שהחלקיק יהיה במצב היסוד ב- $t = 2\text{sec}$?
 ד. ב- $t = 3\text{sec}$ נעשתה מדידה והתגלה שהחלקיק אכן במצב היסוד.
 מהי פונקציית הגל של החלקיק מרגע זה והילך, ניתן לקבוע רגע זה כ- $t = 0$ חדש.
 ה. מהו ערך התוחלת של התנע של החלקיק מסעיף ד'?

(3) מוסיפים פאזות למקדמים

חלקיק נמצא בבור פוטנציאל אינסופי ברוחב l .
 א. מצאו את ההסתברות כתלות בזמן של החלקיק להיות בחצי השמאלי של הבור אם ידוע שהוא נמצא במצב עמיד כלשהו (או מצב עצמי של ההמילטוניאן).
 כעת נתון שפונקציית הגל של החלקיק היא:

$$\Psi(x, t) = c_1\psi_1(x)e^{-i\frac{E_1t}{\hbar}} + c_2\psi_2(x)e^{-i\frac{E_2t}{\hbar}}$$
 כאשר $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, ψ_1 ו- ψ_2 הן פונקציות הגל של מצב היסוד והמצב המעורר הראשון בבור, E_1 , E_2 הן האנרגיות של אותם מצבים.
 ב. הראו כי $\Psi(x, t)$ מנורמלת.
 ג. מהי ההסתברות למצא את החלקיק בחצי השמאלי של הבור כתלות בזמן?
 ד. חזרו על סעיף ג כאשר $c_1 = \frac{e^{i\varphi_1}}{\sqrt{2}}$, $c_2 = \frac{e^{i\varphi_2}}{\sqrt{2}}$.

(4) אופרטור האנרגיה הקינטית

אופרטור האנרגיה הקינטית הוא :

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

הראו כי הפונקציות העצמיות של אופרטור התנע $\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}$ הן גם פונקציות עצמיות של אופרטור האנרגיה הקינטית ומצאו את הערכים העצמיים של אופרטור זה.

תשובות סופיות

$$(1) \quad \langle E \rangle = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2}, \text{ ג. לא, ב. לא. } \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right), E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \quad \text{א.}$$

$$\psi(x, t) = \sum \alpha_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

$$(2) \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) \quad \text{א. } \psi(x, t=0) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x < \frac{l}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{l}} & \frac{l}{2} \leq x \leq l \end{cases} \quad \text{ב.}$$

לא יישאר, $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$

$$\alpha_n = \frac{2}{\pi n} \left[\cos\left(\frac{\pi n}{2}\right) - (-1)^n \right]$$

$$(3) \quad \text{ג. } \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \quad \text{ד. } E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}, \psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi}{l} x\right) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \quad \text{ה. אפס.}$$

$$(3) \quad \text{א. 0.5} \quad \text{ב. הוכחה.} \quad \text{ג. } \frac{1}{2} + \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \frac{4}{3\pi}$$

$$\text{ד. } \Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1, P\left(0 \leq x \leq \frac{l}{2}\right) = \frac{1}{2} + \frac{4}{3\pi} \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t - \Delta\varphi\right)$$

$$(4) \quad \lambda = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

אופרטורים הרמיטיים

סיכום כללי

גודל פיזיקאלי מדיד חייב להיות מספר ממשי .
כל הגדלים הפיזיקאלי מיוצגים ע"י אופרטורים הרמיטיים.

הגדרה :

$$(\hat{A}\psi)^* = \psi^* \hat{A}$$

לכל הפונקציות במרחב.

או :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A} \psi_1)^* \psi_2 dx$$

תכונות של אופרטור הרמיטי :

1. ערך התוחלת של אופרטור הרמיטי תמיד ממשי.
2. הערכים העצמיים של אופרטור הרמיטי תמיד ממשיים.
3. הפונקציות העצמיות של אופרטור הרמיטי הן אורתוגונליות.
4. הפונקציות העצמיות של אופרטור הרמיטי מהוות סט שלם.*

* אם ניתן לתאר את כל הפונקציות במרחב באמצעות קומבינציה לינארית של סט מסוים של פונקציות אז אותו סט נקרא סט שלם.

הפירוש הסטטיסטי המוכלל והסבר מסכם על צורת העבודה בתורת הקוונטים

סיכום כללי

הפונקציות העצמיות של אופרטור הרמיטי מהוות סט שלם של פונקציות (או בסיס). אפשר לכתוב כל פונקציית גל כקומבינציה לינארית של הבסיס העצמי של כל אופרטור.

כלומר, אם ϕ_n ו- λ_n הן הפונקציות העצמיות והערכים העצמיים של האופרטור $\hat{A}$

אז אפשר לרשום כל פונקציית גל בצורה: $\omega(x, t) = \sum \alpha_n \phi_n$.

$|\alpha_n|^2$ זה ההסתברות להיות במצב ϕ_n או ההסתברות למדוד את הערך λ_n .

הערכים המדידים היחידים של גודל מסוים הם הערכים העצמיים של האופרטור השייך לאותו גודל.

בשביל למצא את α_n :

$$\alpha_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^* \Psi(x, t) dx$$

במקרה הרציף:

$$\lambda_n = \lambda(k)$$

$$\phi_n \rightarrow \phi(k)$$

$$\sum \alpha_n \phi_n \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(k, t) \phi(k) dk$$

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(k, t) \phi(k) dk$$

$$|\alpha_n|^2 \rightarrow |\alpha(k, t)|^2 dk$$

שאלות

(1) פונקציה משולשת

נתון חלקיק בבור פוטנציאל אינסופי ברוחב L . כזכור, המצבים העצמיים עבור

בור שכזה נתונים ע"י הפונקציות: $\phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ והאנרגיות העצמיות

הן: $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$. נתון שפונקציית הגל ההתחלתית בה הוכנה המערכת היא

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \frac{A}{L} x & \text{for } 0 < x < \frac{L}{2} \\ A(1 - \frac{x}{L}) & \text{for } \frac{L}{2} < x < L \end{cases}$$

פונקציה משולשת מהצורה:

א. מצא את A .

ב. מהי ההסתברות שבמידת אנרגיית החלקיק ימדדו הערכים: E_1, E_2, E_3, E_4, E_5 ?

ג. חשבו את ערך התוחלת של אנרגיית החלקיק $\langle E \rangle$.

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2} = \frac{\pi^2}{8}$$

ייתכן ותזדקקי לטור הבא:

(2) פונקציית גאוסיאן ומעבר לתדר

פונקציית הגל (מנורמלת) של חלקיק חופשי ב- $t = 0$ נתונה לפי:

$$\Psi(x, t = 0) = (2\pi a^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}}$$

א. מצאו את פונקציית הגל של החלקיק במרחב התדר: $\Psi(k, t = 0)$.

ב. מצאו את אי הודאות של מספר הגל של החלקיק Δk .

השתמשו ב:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2 - bx - c} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2 - 4ac}{4a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-ax^2} dx = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{4a^3}}$$

תשובות סופיות

$$(1) \quad \text{א. } A = \sqrt{\frac{12}{11L}}$$

$$\text{ב. } P(E_1) = 0.09, \quad P(E_3) = 1.1 \cdot 10^{-3}, \quad P(E_5) = 1.4 \cdot 10^{-4}, \quad P(E_2) = P(E_4) = 0$$

$$\text{ג. } \langle E \rangle = \frac{6\hbar^2}{11mL^2}$$

$$(2) \quad \text{א. } \sqrt{2} (2\pi\varphi^2)^{\frac{1}{4}} e^{-ikx_0} e^{-a^2 k^2} \quad \text{ב. } \sqrt{\frac{\pi}{2a^2}}$$

יחס החילוף

סיכום כללי

יחס החילוף (או הקומוטטור) מוגדר להיות:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

יחס החילוף הוא אופרטור בפני עצמו.

אם סדר הפעולה של האופרטורים לא משנה אז יחס החילוף שלהם שווה לאפס ואם הסדר כן משנה אז הפעלה של יחס החילוף תיתן ערך מורכב כלשהו לאופרטורים שיחס החילוף שלהם מתאפס אנחנו קוראים חילופיים. יחס החילוף של המיקום עם התנע:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

אם האופרטורים $\hat{A}$ ו- $\hat{B}$ מתחלפים אז קיים סט של פונקציות עצמיות משותפות לשניהם ולהפך (אם הם לא מתחלפים אז לא ניתן למצא סט של פונקציות עצמיות משותפות).

אם שני אופרטורים מתחלפים אז ניתן למדוד את שניהם בו זמנית בדיוק אינסופי. אם הם לא מתחלפים אז ניתן לרשום את יחס אי הודאות בניהם לפי:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |[\hat{A}, \hat{B}]|$$

שאלות

1 פירוק יחס חילוף מורכב

א. הראו כי: $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$

ב. הראו כי: $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$

ג. מצאו את $[\hat{x}, \hat{p}^2]$ ובדקו האם אופרטור המיקום מתחלף עם ההמילטוניאן של חלקיק חופשי במימד אחד.

2 הוכחת זהות

הוכיחו כי: $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$.

תשובות סופיות

1 א-ב. הוכחה. ג. $2i\hbar\hat{p}$, לא מתחלף.

2 הוכחה.

משפט ארנפס

סיכום כללי

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle$$

אם אופרטור מתחלף עם ההמילטוניאן אז ערך התוחלת של הגודל הפיזיקאלי קבוע בזמן.

שאלות

1) הקשרים הקלאסיים

א. הראו באמצעות משפט ארנפס כי: $\langle p \rangle = \frac{d}{dt}\langle x \rangle$.

ב. הראו כי: $[\hat{p}, U(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial U}{\partial x}$.

ג. הראו באמצעות משפט ארנפס כי: $\frac{d}{dt}\langle p \rangle = -\left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle$.

תשובות סופיות

1) הוכחה.

תרגילים נוספים

שאלות

(1) התפתחות בזמן בבור אינסופי

נתון חלקיק בעל מסה m אשר כלוא בבור פוטנציאל אינסופי חד-מימדי בעל

אורך L אשר מרכזו ב- $x = \frac{L}{2}$. פונקציית הגל של החלקיק ברגע $t = 0$ הינה

סופרפוזיציה של שני מצבים עצמיים של בור פוטנציאל אינסופי :

$$\psi(x, t=0) = A[\phi_1(x) + \phi_2(x)]$$

כאשר ϕ_1 הוא מצב היסוד (בעל אנרגיה E_1) ו- ϕ_2 הוא המצב המעורר הראשון (בעל אנרגיה E_2).

שני המצבים בעלי הסתברות זהה.

א. מצאו את הנרמול של פונקציית הגל.

ב. מצאו את $\psi(x, t)$. ודאו כי $\psi(x, t)$ מקיימת את משוואת שרדינגר.

ג. מצאו את $|\psi(x, t)|^2$, בטאו את פונקציית צפיפות ההסתברות כפונקציה סינוסואידלית בזמן.

ד. חשבו את ערך התצפית של המקום. שימו לב כי ערך התצפית עושה אוסילציות בזמן. מהי תדירות האוסילציות?

ה. חשבו את ערך התצפית של התנע לפי הגדרה. הראו כי מתקיים :

$$\left(\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} (\langle x \rangle) \right)$$

ו. חשבו את ערך התצפית של האנרגיה של החלקיק לפי הגדרה. הסבירו את תשובתכם.

ז. הניחו כי אי הודאות באנרגיה היא : $\Delta E = (E_2 - E_1)$ והשתמשו בעיקרון

אי הודאות של הייזנברג על מנת למצוא את Δt .

השוו לזמן המחזור של האוסילציות שמצאתם בסעיף ד' והסבירו.

תשובות סופיות

$$\begin{aligned}
 (1) \quad & \text{א. } A = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{ב. } \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1 e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \phi_2 e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} \right) \\
 & \text{ג. } |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left(|\phi_1|^2 + |\phi_2|^2 + 2\phi_1 + \phi_2 \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \right) \\
 & \text{ד. } \langle x \rangle : \frac{L}{2} - \frac{16}{9} \frac{L}{\pi^2} \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \quad \text{ה. } \langle P \rangle = \frac{8\hbar}{3L} \sin\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \\
 & \quad \omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = 2\pi F
 \end{aligned}$$

ו. $\langle E \rangle = \frac{1}{2} E_1 + \frac{1}{2} E_2$, חישוב התוחלת של האנרגיה הוא ההסתברות להיות בכל

מצב עצמי של האנרגיה כפול האנרגיה של המצב.

$$\Delta t \simeq \frac{\hbar}{2(E_2 - E_1)} \quad \text{ז.}$$

זרם ההסתברות:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

- מתאפס כשפונקציות גל ממשיות
- קבוע עבור מצבים יציבים

מבוא לקשר כימי - קורס חלקי

פרק 4 - המודל הקוונטי לאטום המימן ספין והטבלה המחזורית

תוכן העניינים

1. הרצאות ותרגולים 66

פתרון עבור אטום המימן ותנע זוויתי קוונטי:

סיכום כללי:

משוואת שרדינגר לפוטנציאל התלוי רק ב- r :

משוואה ל- $\theta(\theta)$:

$$\frac{1}{\theta(\theta)} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2$$

משוואה ל- $\phi(\phi)$:

$$\frac{\partial^2 \phi(\phi)}{\partial \phi^2} = -m^2 \phi(\phi)$$

פתרון לחלק הזוויתי:

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

$$\varepsilon = \begin{cases} (-1)^m & m > 0 \\ 1 & m \geq 0 \end{cases}$$

$l \geq 0$ ו- $|m| \leq l$ שלם.

$$P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x)$$

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

$$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta$$

$$Y_3^0 = \left(\frac{7}{16\pi} \right)^{\frac{1}{2}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_3^{\pm 1}$$

$$= \mp \left(\frac{21}{64\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi} \right)^{\frac{1}{2}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_3^{\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \quad Y_3^{\pm 3} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi}$$

$$\begin{aligned} P_1^1 &= \sin \theta & P_3^3 &= 15 \sin \theta (1 - \cos^2 \theta) \\ P_1^0 &= \cos \theta & P_3^2 &= 15 \sin^2 \theta \cos \theta \\ P_2^2 &= 3 \sin^2 \theta & P_3^1 &= \frac{3}{2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) \\ P_2^1 &= 3 \sin \theta \cos \theta & P_3^0 &= \frac{1}{2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \\ P_2^0 &= \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) \end{aligned}$$

אורתוגונליות :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi [Y_l^m(\theta, \varphi)]^* [Y_l^{m'}(\theta, \varphi)] \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

המשוואה לחלק הרדיאלי :

$$\begin{aligned} \frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) &= l(l+1) \\ R(r) &= \frac{u(r)}{r} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u(r) &= Eu(r) \end{aligned}$$

פתרון עבור אטום המימן :

מתוך פתרון המשוואה תנאי שמקוונטט את האנרגיה :

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2} \\ E_1 &= -\frac{mk^2 e^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV} \\ n &= 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

הפתרון לפונקציה תלוי בקבועים n ו- l :

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

רדיוס בוהר :

$$a = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} m$$

$$L_{q-p}^p(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_q(x)$$

$$L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q)$$

$$R_{10} = 2a^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}} a^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$$

$$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}} a^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a} + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)$$

$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}} a^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)$$

$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} a^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)$$

$$R_{40} = \frac{1}{4} a^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{3}{4} \frac{r}{a} + \frac{1}{8} \left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{192} \left(\frac{r}{a}\right)^3\right) \exp\left(-\frac{r}{4a}\right)$$

$$R_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}} a^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{1}{4} \frac{r}{a} + \frac{1}{80} \left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{4a}\right)$$

$$R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}} a^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{1}{12} \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{4a}\right)$$

$$R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}} a^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{a}\right)^3 \exp\left(-\frac{r}{4a}\right)$$

פתרון כללי :

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

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$0 \leq l \leq n - 1$$

 l שלם ומקיים :

$$-l \leq m \leq l$$

 m שלם ומקיים :

אורתוגונליות :

$$\int \psi_{nlm}^* \psi_{n'l'm'} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

פונקציית ההסתברות הרדיאלית (צפיפות ההסתברות למצא את האלקטרון במרחק r מהגרעין):

$$P_{nl}(r) = |R_{nl}|^2 r^2$$

תנע זוויתי :

התנע הזוויתי הוא : $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = (L_x, L_y, L_z)$
נגדיר אופרטורים : $\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$

$$\hat{L}^2 Y_l^m = l(l+1) \hbar^2 Y_l^m$$

$$|L| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

גודל התנע יכול להיות גם אפס וזה בניגוד למודל של בוהר.

את הכיוון נתאר באמצעות הגודל של L_z , משם אפשר למצא את $\cos \theta = \frac{L_z}{|L|}$

$$\hat{L}_z Y_l^m = m \hbar Y_l^m$$

גם הכיוון של וקטור התנע הזוויתי מקוונטט!

רמות אנרגיה ניוון וספקטרום הפליטה :

צפיפות המצבים : $g(n) = 2n^2$ (ה-2 מגיע מהספין).

כללי מעבר (Selection Rules) :

$$1. n_i > n_f$$

$$2. \Delta l = l_f - l_i = \pm 1$$

$$3. \Delta m = m_f - m_i = 0, \pm 1$$

שאלות :

(1) הסתברות להיות רחוק מרדיוס בוהר

- א. חשבו את ההסתברות של אלקטרון במצב היסוד באטום מימן, להימצא במרחק שגדול מרדיוס בוהר מהגרעין.
- ב. מצאו את הרדיוס הממוצע בו נמצא האלקטרון במצב היסוד.

(2) כוח ממוצע

פונקציית הגל של המצב: $n = 2, l = 1, m = 0$ היא: $\psi_{210} = \frac{r \cos \theta}{\sqrt{32\pi a^5}} e^{-\frac{r}{2a}}$. מצאו את גודל הכוח החשמלי הממוצע שפועל על האלקטרון.

נוסחאות עזר:

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$\int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{2}{3}$$

$$\int_0^\pi \sin^5 \theta d\theta = \frac{16}{15}$$

(3) הראו כי התנז לא בכיוון Z

הראו שהתנע הזוויתי המסלולי של האלקטרון באטום המימן לא יכול להיות מקביל לציר Z.

(4) גז מעורר

נתון גז של אטומי מימן שבכל אחד מהם האלקטרון נמצא ברמה התחלתית ($n = 4, l = 3$).

נתון שאין אינטראקציה בין האטומים, טמפרטורת הגז נשארת קבועה כל הזמן ולא קיים שדה מגנטי חיצוני.

כמה קווי פליטה שונים (אורכי גל שונים) נראה בספקטרום הפליטה של הגז (ספקטרום הפליטה מתקבל כאשר האלקטרונים יורדים לרמות נמוכות יותר)? רשמו את מצבי האנרגיה הנמוכים ביותר שבהם יכולים להימצא האלקטרונים לאחר זמן רב (השתמשו במספרים הקוונטים (n, l) כדי לאפיין את מצבי האנרגיה).

(5) צבר אטומי מימן במצב 2 בשטרן גרלך

- צבר אטומי מימן נמצא במצב $n = 2$ (ועם תנע זוויתי כלשהו). בכל סעיפי השאלה יש להתחשב גם בספין.
- א. כמה כתמים יהיו על המסך עבור הצבר בניסוי שטרן גרלך?
- ב. ציינו איזה מצב קוונטי גרם לכל כתם על המסך.

- אורך המגנט בניסוי הוא L והמרחק מסוף המגנט ועד המסך הוא $10L$.
 השדה המגנטי הוא $B(z) = B_0 \frac{z}{L}$ ומהירות האטומים היא v .
 ג. מה יהיה המרחק בין שני הכתמים הנוצרים מהמצבים בהם האלקטרון נמצא ברמה $2s$?
 ד. כמה רמות אנרגיה שונות קיימות לצבר (תחת שדה מגנטי)?
 כמה אורכי גל שונים יכולים להיפלט מהצבר?

תשובות סופיות:

- (1) א. 0.677 ב. $1.5a$
- (2) $\frac{ke^2}{12a^3}$
- (3) הוכחה.
- (4) 5 קווים, $1s$ ו- $2s$.
- (5) א. ישנם 5 אופציות שונות למומנט המגנטי ולכן נקבל 5 כתמים.
 ב. הכתם הכי נמוך שייך ל- $m+2ms=2$ וככל שהערך יורד הכתם יהיה יותר גבוה.
 ג. $21 \frac{\mu_B B_0 L}{mv^2}$
 ד. לצבר 5 רמות אנרגיה שונות עבור הערכים השונים של המומנט המגנטי.
 7 אורכי גל שונים.

מומנט מגנטי מסילתי ואפקט זימן הנורמאלי:

סיכום כללי:

מומנט כוח על דיפול מגנטי:

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

אנרגיה פוטנציאלית של דיפול מגנטי בשדה מגנטי :

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

כוח על דיפול מגנטי בשדה מגנטי לא אחיד :

$$\vec{F} = (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}$$

מומנט דיפול מגנטי כתוצאה מתנועת האלקטרון סביב הגרעין :

$$\vec{\mu} = \frac{-\mu_B}{\hbar} \vec{L}$$

גודל קבוע שנקרא המגנטון של בוהר :

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.788 \cdot 10^{-5} \text{ eV}/T$$

האנרגיה הפוטנציאל כתוצאה האינטראקציה של המומנט המגנטי המסילתי עם שדה מגנטי חיצוני :

$$U = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B} = \mu_B B m$$

כאשר m הוא המספר הקוונטי של L_z .

תוספת לשינוי באנרגיה כתוצאה ממעבר בין הרמות בעקבות אפקט זימן :

$$\Delta E_z = \mu_B B \Delta m$$

$$\Delta m = \pm 1, 0$$

התוספת בעקבות אפקט זימן גורמת לכל קו ספקטרלי להתפצל לשלושה קווים.

שאלות:

(1) פוטון נפלט מאטום מימן בשדה מגנטי

אלקטרון נמצא ברמת האנרגיה $3p$ של אטום מימן. האטום נמצא באזור בו יש שדה מגנטי אחיד $B = 4 \cdot 10^3 [T]$. מצאו את אורך הגל הקצר ביותר שיכול

להתקבל ממעבר של האלקטרון לרמה כלשהיא (הניחו שהאלקטרון אינו עולה רמות לפני הפליטה).

(2) פליטה מאטום בורון ורוחב פס

- גז של אטומי בורון נמצא באזור בו קיים שדה מגנטי חיצוני אחד B .
 בכל אחד מהאטומים מעוררים את האלקטרון שנמצא ברמה $2p$ לרמה $3s$
 ומוודדים את ספקטרום הקרינה האלקטרומגנטית שמתקבל בחזרה של
 האלקטרון לרמה המקורית.
- א. כמה קווים יתקבלו בספקטרום? הניחו שרמת האנרגיה זהות לאלו של
 אטום המימן.
- ב. מצאו את הערך של B עבורו נוכל להבחין כי הפיצול אכן נבע מהשדה
 המגנטי החיצוני אם נתון שזמן החיים של הרמה המעוררת הוא 2ns .

תשובות סופיות:

- (1) 100nm .
 (2) א. 3 קווים. ב. $B > 9\text{mT}$.

ספין ניסוי ושטרן גרלך:

סיכום כללי:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$\vec{L}$ תנ"ז מסילתי, נובע מהתנועה הסיבובית של החלקיק.

$\vec{S}$ תנ"ז כתוצאה מהספין.

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

S גדולה - גודל התנ"ז מהספין.

s קטנה - הספין של החלקיק, עבור אלקטרון $s = \frac{1}{2}$.

עבור חלקיקים אחרים ערכי הספין הן כפולות שלמות של חצי $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

חלקיקים שהספין שלהם חצי שלם $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ וכו' נקראים **פרמיונים** וחלקיקים שהספין שלהם שלם $0, 1, 2$ נקראים **בוזונים**.

$$S_z = m_s \hbar$$

$-s < m_s < s$ בקפיצות של 1

עבור אלקטרון $m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$$\vec{\mu}_s = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

פקטור g או gyromagnetic ratio

עבור אלקטרון $g = 2.0023 \dots \approx 2$

שאלות:

(1) תוחלת של S

נתונה פונקציית הגל הבאה:

$$\frac{1}{\sqrt{4}}\psi_{2,1,-1,\frac{1}{2}} + \frac{1}{\sqrt{4}}\psi_{2,1,1,\frac{1}{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{2,1,1,-\frac{1}{2}}$$

א. הראו שהפונקציה מנורמלת (בהנחה ש- ψ_{n,l,m,m_s} הן אורטונורמליות).ב. מצאו את $\langle \hat{L}_z \rangle$.ג. מצאו את $\langle \hat{S}_z \rangle$.ד. מצאו את ΔS_z .

(2) שטרן גרלך עם תנז מסילתי

מה היה קורה בניסוי שטרן-גרלך אם לאלקטרון בקרן שפוגעת היה $l = 1$?

תשובות סופיות:

- (1) א. הוכחה. ב. $\frac{\hbar}{2}$. ג. 0. ד. $\frac{\hbar}{2}$.
- (2) הקרן תתפצל לחמש קרניים ונראה חמש נקודות על המסך.

אטומים מורכבים והטבלה המחזורית:

סיכום כללי:

כל אלקטרון מאכלס מצב מסוים המאופיין על ידי המספרים הקוונטיים: n, l, m_l, m_s .

בגלל האינטראקציה של האלקטרונים עם עצמם האנרגיות תלויות ב- n וגם ב- l .

עיקרון האיסור של פאולי (1900-1958) Wolfgang Pauli:

שני אלקטרונים באטום לא יכולים לאכלס את אותו המצב הקוונטי.

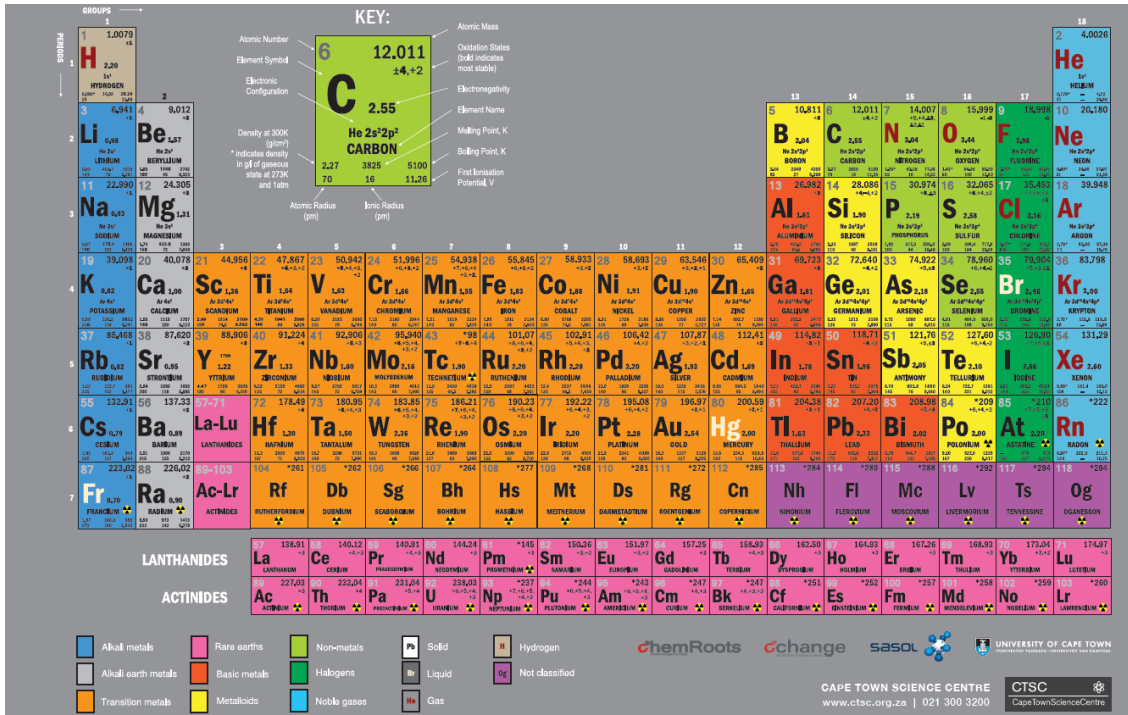
כלומר לא יכולים להיות שני אלקטרונים שיש להם בדיוק אותם מספרים קוונטיים: n, l, m_l, m_s .

ככל ש- l גדל (יש יותר תנ"ז מסילת) האנרגיה גדלה.

הטבלה המחזורית:

KEY:

- Atomic Number
- Element Symbol
- Electronic Configuration
- Density at 300K (g/cm³)
- * indicates density in g/L of gaseous state at 273K and 1 atm
- Atomic Mass
- Oxidation States (bold indicates most stable)
- Electronegativity
- Element Name
- Melting Point, K
- Boiling Point, K
- First Ionization Potential, V



Legend:

- Alkali metals
- Alkali earth metals
- Transition metals
- Rare earths
- Basic metals
- Metalloids
- Noble gases
- Non-metals
- Halogens
- Gas
- Solid
- Liquid
- Hydrogen
- Not classified

chemRoots cchange sasol UNIVERSITY OF CAPE TOWN
CAPE TOWN SCIENCE CENTRE www.ctsc.org.za | 021 300 3200 CTSC Cape Town Science Centre

שאלות:

(1) טיטניום

כמה אלקטרונים יש ליסוד טיטניום: $\text{Ti} (Z = 22)$ ברמה הרביעית? הניחו שהוא במצב היסוד.

(2) אטום ראשון ברמה החמישית

מהו המספר האטומי של האטום "הראשון" ברמה החמישית?

(3) קונפיגורציה של ברזל

רשמו את קונפיגורציית האלקטרונים של אטום הברזל: $\text{Fe } Z=26$ במצב היסוד. רשמו את הכתיב המלא והמקוצר.

(4) קונפיגורציות הגיוניות

אלו מהקונפיגורציות הבאות הן הגיוניות ואלו לא? (עבור אטומים ברמת היסוד)

א. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^3$

ב. $1s^2 2s^2 2p^6 2d^2$

ג. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 4s^2$

ד. $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$

תשובות סופיות:

(1) שני אלקטרונים.

(2) 37.

(3) $3d^2 4s^2$, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

(4) א. לא. ב. לא. ג. לא. ד. כן.