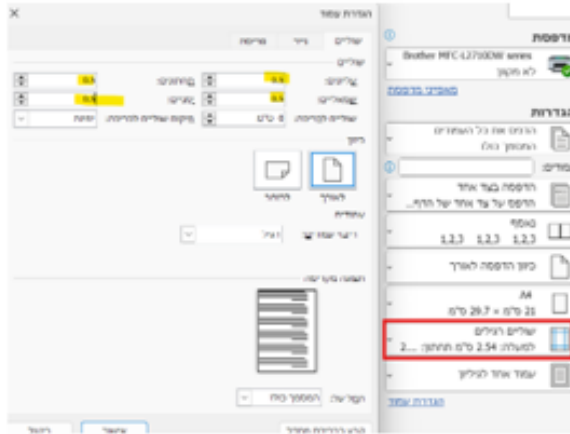


הוראות לדף הנוסחאות



הוראות הדפסה!

את הדף יש להדפיס עם שוליים מותאמות אישית ברוחב 0.5 בכל צד.

ב WORD, יש לבחור בלשונית הדפסה את חלון השוליים, לבחור שוליים מותאמים אישית ולשנות ל 0.5 בכל הכיוונים

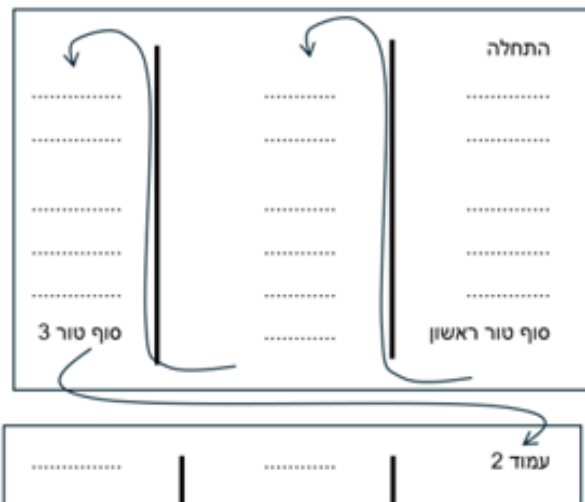
עריכה:

בדף הכנסנו כמה שיותר הסברים, נוסחאות ותמונות. אם מספר העמודים חורג ממספר העמודים המותר בבחינה ניתן לערוך את קובץ ה WORD ולהוריד הסברים מורחבים, תמונות או נוסחאות טריוויאליות. ניתן גם כמובן להוסיף הסברים שלכם או נוסחאות.

בכל מקרה מומלץ מאוד לעבור על הדף לפני המבחן!! הוא גם סיכום של החומר.

אין להוריד את הסמל של GOOL או כל סימן מסחרי אחר!!

מבנה הדף:



הדף בנוי משלושה טורים.

ההתחלה היא בפינה הימנית העליונה.

בסוף הטור הראשון עוברים לטור השני באותו עמוד (ולא לעמוד הבא). בסוף הטור האחרון עוברים לטור הראשון (הימני) בעמוד הבא.

ניתן לשנות את כיוון הפריסה לרוחב, זה יוצר מראה יותר מרווח על חשבון מספר עמודים.

כל הזכויות שמורות למני גבאי ולאתר GOOL

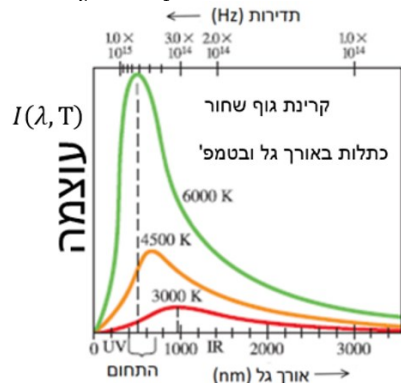
הדף מיועד לכל שימוש שאינו מסחרי ובפרט לשימוש מרצים, מורים, סטודנטים ותלמידים בקורסים שונים, ניתן לערוך את הדף אך יש להשאיר סימונים של אתר גול.

תיאוריות מוקדמות של תורת הקוונטים והאטום:

חוק בוין: $\lambda_p T = 2.90 \cdot 10^{-3} m \cdot K$

λ_p - אורך הגל בשיא. T - הטמפרטורה בקלווין

נוסחת פלאנק לקרינת גוף שחור: $I(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2 \lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$



קבוע בולצמן: $k = 1.38 \cdot 10^{-23} J \cdot K^{-1}$

קבוע פלאנק: $h = 6.626 \cdot 10^{-34} J \cdot s$

התנחה הקוונטית של פלאנק: האנרגיה המינימלית של

מטען בתנועה הרמונית באטום היא $E_{min} = hf$

- אנרגיית המטען חייבת להיות כפולה שלמה של הערך

המינימלי: $E = nhf$

כאשר n הוא המספר הקוונטי

התיאוריה הפוטונית והאפקט הפוטואלקטרי:

אנרגיה של פוטון יחיד (f- תדירות האור): $E = hf$

הניסוי הפוטואלקטרי:

תדירות סף (W_0 - פונקציית העבודה של המתכת): $hf_0 = W_0$

אנרגיה קינטית מקסי של האלקטרונים: $E_k = hf - W_0$

מתח עצירה: $eV = E_{kmax}$

השוואה לתורה הגלית:

- לפי התורה הפוטונית

1. עוצמת האור קשורה

למספר הפוטונים ולא

אנרגיה של כל אחד מהם.

הגדלת העוצמה תגדיל את

מספר האלק' הנפלט אבל

לא את האנרגיה הקינטית

שלם.

2. האנרגיה של הפוטון תלויה בתדירות.

3. רק פוטון אחד נותן את כל האנרגיה שלו ולכן קיימת

תדירות סף.

- לפי התורה הגלית-אלקטרומגנטית

1. עוצמת האור קשורה לגודל השדה, הגדלת העוצמה

תגדיל את האנרגיה הקינטית של האלקטרונים.

2. התדירות לא משפיעה על האנרגיה של האלקטרונים.

אנרגיה מסה ותנע של פוטון:

אנרגיה של פוטון יחיד: $E = hf$

תנע של פוטון: $p = \frac{E}{c} = h \frac{f}{c} = \frac{h}{\lambda}$

מסת מנוחה של פוטון: $m = 0$

אפקט קומפטון:

הסתת קומפטון: $\lambda' = \lambda + \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$

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.

אינטראקציות של פוטונים ויצירת זוגות:

תנאים ביצירת זוגות:

1. חייב להיווצר זוג בשביל שיתקיים שימור מטען

2. אנרגיית הפוטון שווה לאנרגיה הזוג, יש להוסיף אנרגיה

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.

דואליות גל חלקיק והאופי הגלי של החומר:

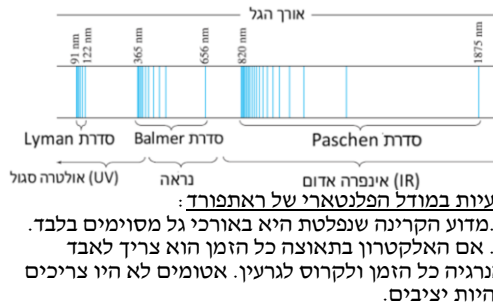
אורך גל דה ברויל של חלקיק: $\lambda = \frac{h}{p}$

$p = mv$ לא יחסותי, $p = \gamma mv$ יחסותי

מודלים מוקדמים של האטום:

אורכי הגל הנפלטים מאטום המימן: $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$

קבוע Rydberg: $R = 1.097 \cdot 10^7 m^{-1}$



מודל האטום של בוהר:

הנחות המודל:

1. האלקטרונים יכולים לנוע רק במסלולים/רדיוסים

ספציפיים מסביב לגרעין. המסלולים נקראים **אורביטלים**.

2. האלקטרונים לא מאבדים אנרגיה בתנועה המעגלית

(למרות שהם בתאוצה). בגלל שהאלקטרון לא מאבד

אנרגיה במצבים אלו הם נקראים **מצבים יציבים**.

אנרגיית הפוטון שווה להפרש האנרגיות בין שני מצבים:

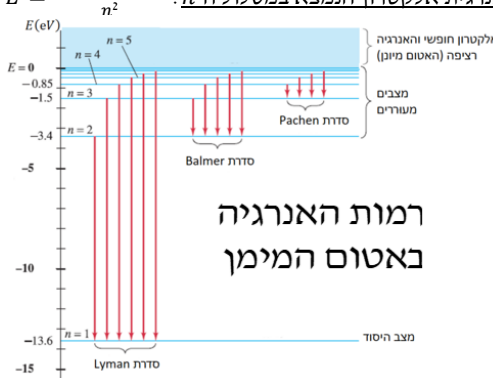
$hf = E_U - E_L$

הנחה על התנע הזוויתי ($n=1,2,3...$): $L = mvr_n = \frac{nh}{2\pi}$

הרדיוסים האפשריים (Z- מספר הפרוטונים): $r_n = \frac{n^2}{Z} r_1$

$r_1 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi e^2 m_e} \approx 0.529 \cdot 10^{-10}$

אנרגיית אלקטרון הנמצא במסלול ה-n: $E = -\frac{Z^2 \cdot 13.6 eV}{n^2}$



רמות האנרגיה באטום המימן

בעיית שני הגופים ומסה מצומצמת:

מעבר למשתנים החדשים והמעבר ההפוך:

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

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

האנרגיה במשתנים החדשים:

$E = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) v_{c.m.}^2 + \frac{1}{2} \mu v_{rel}^2 + U(r_{rel})$

מסה מצומצמת: $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

בהנחה שאין כוחות חיצוניים אז החלק הראשון קבוע

והאנרגיה תלויה רק ב r_{rel} והנגזרת שלו כמו במימד אחד.

תנ"ץ:

$\vec{L} = \vec{r}_{c.m.} \times \vec{p}_{c.m.} + \vec{L}_{c.m.}$; $\vec{L}_{c.m.} = \mu \vec{r}_{rel} \times \vec{v}_{rel}$

פונקציית הגל של החומר:

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 למצוא אותו על ידי נגזרת).

שונות: $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

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

עקרון אי הוודאות של הייזנברג:

אי ודאות מיקום תנע: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.055 \cdot 10^{-34} J \cdot s$

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.

אי ודאות זמן אנרגיה: $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

1. ככל שמודדים את הזמן בדיוק גבוה יותר כך הדיוק

במדידת האנרגיה קטן.

2. האנרגיה נשמרת עד כדי אי הודאות. הגופים יכולים

להיות באנרגיות האסורות קלאסית.

אי ודאות במדידת הזווית והתנע הזוויתי: $\Delta L_z \Delta \theta \geq \frac{\hbar}{2}$

משוואת שרדינגר:

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. הנגזרת של פסי רציפה

למעט נקודות בהן הפוטנציאל מתבדר.

בתלת מימד: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U \Psi$

משוואת שרדינגר ללא תלות בזמן במימד אחד:

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

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

חלקיק חופשי ובור פוטנציאל אינסופי:

פונקציית הגל, 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 ברוחב l:

$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l} x\right)$

$E_n = \frac{\hbar^2}{8ml^2} n^2, n = 1, 2, 3, \dots$

לפי תורת הקוונטים קיימת אפשרות שהחלקיק יהיה

במקום שבו האנרגיה הכוללת קטנה מהאנרגיה

פוטנציאלית, מצב שאינו אפשרי לפי המכניקה הקלאסית.

באזור האסור פונקציית הגל דועכת אקספוננציאלית.

עקרונות לציון 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.

מנהור (tunneling):

מקדם ההעברה עבור $T \ll 1$ (ההסתברות לעבור):

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

$U_0 > E$, אורך המחוס, $\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$ גובה

הפוטנציאל במחסום.

מקדם החזרה: $R = 1 - T$

אוסילטור הרמוני:

פונקציות הגל: $\psi_1(x) = (\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$ $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

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

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

רמות האנרגיה, n שלם שמתחיל מ 1: $E_n = \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$

או שאפשר להתחיל את n מאפס ואז $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$

מהירות הפאזה והחבורה, יחס דיספרסיה

מהירות הפאזה (המהירות של אורך גל מסוים):

$v_{ph} = \frac{\omega}{k}$

מהירות החבורה:

$v_g = \frac{d\omega}{dk}$

יחס דיספרסיה הוא הקשר בין ω ל- k

פיזור

מקדם העברה (ההסתברות לעבור):

אם k_2 בתחום הימני שונה מ- k_1 בתחום השמאלי אז:

$T = \frac{|C|^2 k_2}{|A|^2 k_1}$

מקדם החזרה (ההסתברות לחזור) בכל מקרה:

$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$

פיזור

מקדם העברה (ההסתברות לעבור):

אם k_2 בתחום הימני שונה מ- k_1 בתחום השמאלי אז:

$T = \frac{|C|^2 k_2}{|A|^2 k_1}$

מקדם החזרה (ההסתברות לחזור) בכל מקרה:

$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$

פיזור

מקדם העברה (ההסתברות לעבור):

אם k_2 בתחום הימני שונה מ- k_1 בתחום השמאלי אז:

$T = \frac{|C|^2 k_2}{|A|^2 k_1}$

מקדם החזרה (ההסתברות לחזור) בכל מקרה:

$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$

$$P_1^1=\sin\theta\;;\;P_3^1=\frac{3}{2}\sin\theta\;(5\cos^2\theta-1)$$

$$P_2^0=\frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1)$$

$$P_3^1=\frac{3}{2}\sin\theta\;(5\cos^2\theta-1)$$

$$P_2^1=3\sin\theta\cos\theta\;;\;P_3^1=\frac{3}{2}\sin\theta\;(5\cos^2\theta-1)$$

$$P_2^2=3\sin^2\theta\;\;\;\;;\;\;\;P_3^3=15\sin\theta\;(1-\cos^2\theta)$$

אורתוגונליות:

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

המשוואה לחלק הרדיאלי:

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}(V(r)-E)=l(l+1)$$

$$R(r)=\frac{u(r)}{r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\left[V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r)=Eu(r)$$

פתרון עבור אטום המימן

V
(
r
)
=

k

e

2

r

{\displaystyle V(r)={\frac {ke^{2}}{r}}}

:

$$E_n=-{\frac {mk^2e^4}{2\hbar ^2}}\cdot {\frac {1}{n^2}}={\frac {E_1}{n^2}}={\frac {-13.6eV}{n^2}}$$

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

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

רדיוס בוהר:

$$L_{q-p}^p(x)=(-1)^p\left({d\over dx}\right)^pL_q(x)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

פתרון כללי:

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

n ו-*l* שלמים, *l*=1,2,3... ו-*n*=0,1,2,3... ו-*l* ≤ *n* -1

m שלם ומקיים: -*l* ≤ *m* ≤ *l*

אורתוגונליות:

$$\int \psi _{nlm}^{*}\psi _{n'l'm'}r^2\sin \theta \,drd\theta d\phi =\delta _{nn'}\delta _{ll'}\delta _{mm'}$$

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

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

$$\vec L=\vec r\times \vec p=(L_x,L_y,L_z)$$

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

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

גודל התנ"י יכול להיות אפס בניגוד לגודל של בוהר.

את הכיוון נקרא באמצעות הגודל של *L*_z, משם אפשר למצא את

cos
⁡
θ
=

L

z

|
L

{\displaystyle \cos \theta ={\frac {L_{z}}{|L|}}}

$$\hat L_zY_l^m=m\hbar Y_l^m$$

גם הכיוון של וקטור התנע הזוויתי מקוונטט!

צפיפות המצבים:

g
(
n
)
=

2

n

2

{\displaystyle g(n)=2n^{2}}

 (ה-2 מגיע מהספין).

כללי מעבר: *n*_f > *n*_i. ב.

Δ

l

=

l

f

−

l

i

=
±
1

{\displaystyle \Delta l=l_{f}-l_{i}=\pm 1}

ג.

Δ

m

=

m

f

−

m

i

=
0
,
±
1

{\displaystyle \Delta m=m_{f}-m_{i}=0,\pm 1}

מומנט מגנטי מסילתי ואפקט זימן הנורמאלי:

מומנט כוח על דיפול מגנטי

μ
⃗

{\displaystyle {\vec {\boldsymbol {\mu }}}\,}

:

אנרגיה פוטנציאלית של דיפול מגנטי בשדה מגנטי:

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

$$\Psi (x,t)=\sum \alpha _{n}\phi _{n}$$

*|α_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.

$$\alpha _n=\int _{-\infty }^{\infty }\phi _n^{*}\Psi (x,t)\,dx$$

במקרה הרציף:

$$|\alpha _n|^2\rightarrow |\alpha (k,t)|^2dk;\;\lambda _n\rightarrow \lambda (k);\;\;\phi _n\rightarrow \phi (k)$$

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

$$\alpha (k,t)=\int _{-\infty }^{\infty }\phi (k)\Psi (x,t)\,dx$$

יחס החילוף

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

יחס החילוף הוא אופרטור בפני עצמו. אם סדר הפעולה של האופרטורים לא משנה אז יחס החילוף שלהם שווה לאפס (אופרטורים חילופיים).

יחס החילוף של המיקום עם התנע:

⟨
x
,

p

x

⟩
⟩
=
i
ℏ

{\displaystyle \langle {\hat {x}},{\hat {p}}_{x}\rangle =i\hbar }

:

אם"ם האופרטורים *Â* ו-*Ĕ* מתחלפים אז קיים סט של פונקציות עצמיות משותפות לשניהם.

אם שני אופרטורים מתחלפים אז ניתן למדוד את שניהם בו זמנית בדיוק אינסופי.

אם הם לא מתחלפים אז ניתן לרשום את יחס אי הודאות

Δ
A
Δ
B
≥

1
2

|
⟨
[
A
,
B
]
⟩
|

{\displaystyle \Delta A\Delta B\geq {\frac {1}{2}}|[\langle {\hat {A}},{\hat {B}}\rangle |}

: בניהם לפי:

משפט ארנפס

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

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

זרם ההסתברות:

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

- זרם ההסתברות מתאפס כשפונקציות גל ממשיית.
- קבוע עבור מצבים יציבים.

אטום המימן ותנע זוויתי קוונטי: GOOL

משוואת שרדינגר לפוטנציאל התלוי רק ב-r:
ניתן לעשות הפרדת משתנים לפונקציית הגל:

$$\Psi (r,\theta ,\varphi)=R(r)\theta (\theta)\phi (\varphi)$$

המשוואה ל-θ(θ):

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

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

משוואה ל-φ(φ):

פתרון ל- θ(θ) ו-φ(φ):

$$Y_l^m(\theta ,\varphi)=\theta (\theta)\phi (\varphi)=$$

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

ε
=
{

(
−
1

)

m

m
>
0

1

m
≤
0

l
≥
0

{\displaystyle \varepsilon ={\begin{cases}(-1)^m&m>0\\1&m\leq 0\end{cases}}\;l\geq 0}

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

$$P_l(x)={1\over 2^ll!}\left({d\over dx}\right)^l(x^2-1)^l$$

$$Y_0^0=\left({1\over 4\pi }\right)^{\frac {1}{2}};\;Y_2^0=\left({5\over 16\pi }\right)^{\frac {1}{2}}(3\cos ^2\theta -1)$$

$$Y_1^0=\left({3\over 4\pi }\right)^{\frac {1}{2}}\cos \theta ;\;Y_2^{\pm 1}=\mp \left({15\over 8\pi }\right)^{\frac {1}{2}}\sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi }$$

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

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

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

$$Y_3^{\pm 1}=\mp \left({21\over 64\pi }\right)^{\frac {1}{2}}\sin \theta (5\cos ^2\theta -1)e^{\pm i\phi }$$

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

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

$$P_1^0=\cos \theta ;\;P_3^0={1\over 2}(5\cos ^3\theta -3\cos \theta)$$

- עבור מדרגת פוטנציאל

E
>

U

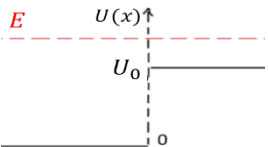
0

{\displaystyle E>U_{0}}

 וכאשר

U
(
x
)
↑

{\displaystyle U(x)\uparrow }



T
=

4

k

1

k

2

(

k

1

+

k

2

)

2

{\displaystyle T={\frac {4k_{1}k_{2}}{(k_{1}+k_{2})^{2}}}}

R
=

(

k

1

−

k

2

)

2

(

k

1

+

k

2

)

{\displaystyle R={\frac {(k_{1}-k_{2})^{2}}{(k_{1}+k_{2})}}

- כאשר

E
<

U

(
±
∞
)

{\displaystyle E<U(\pm \infty)}

 נקבל מצבים קשורים, החלקיק "כלוא" ורמות האנרגיה בדידות.

- כאשר

E
>

U

(
±
∞
)

{\displaystyle E>U(\pm \infty)}

 נקבל פיזור, החלקיק יגיע לאינסוף ורמות האנרגיה רציפות.

פונקציית דלתא של דיראק

הגדרות הפונקציה:

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

או

∫

−
∞

δ
(
x
)
d
x
=
1

{\displaystyle \int _{-\infty }^{\infty }\delta (x)\,dx=1}

 או

δ

a

(
x
)
=

1

a

√
π

e

−

x

2

/

a

2

{\displaystyle \delta _{a}(x)={\frac {1}{a{\sqrt {\pi }}}e^{-x^{2}/a^{2}}}

 כאשר a הולך לאפס.

$$\int _{-\infty }^{\infty }f(x)\delta (x-a)\,dx=f(a)$$

פיזור מפונקציית דלתא:

עבור

V
(
x
)
=
−
a
δ
(
x
)

{\displaystyle V(x)=-a\delta (x)}

 ו-

E
<
0

{\displaystyle E<0}

נקבל

ψ
(
x
)
=

√
a
m
ℏ

e

−

i
a
m
ℏ

|
x
|

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

 ו-

E
=
−

a

2

m

2

2
ℏ

2

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

מקבלים מצב אחד בלבד, לא תלוי ב-*a* (גודל הבור).

אם

E
>
0

{\displaystyle E>0}

:

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

$$T=\left|{\frac {C}{A}}\right|^{2}{\frac {1}{1+\beta ^{2}}},\;\beta ={\frac {am}{\hbar ^{2}k}},\;k={\frac {\sqrt {2mE}}{\hbar }}$$

עבור:

V
(
x
)
,
E
=
+
a
δ
(
x
)

{\displaystyle V(x),E=+a\delta (x)}

 חייב להיות גודל מאפס והפתרון זהה לפתרון במקרה של הפוטנציאל השלילי כאשר

E
>
0

{\displaystyle E>0}

.

פוטנציאלים תלת מימדים

תיבה תלת מימדית בגודל *a × b × c*:

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

$$E={\frac {\pi ^{2}\hbar ^{2}}{2m}}\left({\frac {n_{x}^{2}}{a^{2}}}+{\frac {n_{y}^{2}}{b^{2}}}+{\frac {n_{z}^{2}}{c^{2}}}\right)$$

אוסילטור הרמוני תלת מימדי:

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

$$E=\left(n_{x}-{\frac {1}{2}}\right)\hbar \omega _{x}+\left(n_{y}-{\frac {1}{2}}\right)\hbar \omega _{y}+\left(n_{z}-{\frac {1}{2}}\right)\hbar \omega _{z}$$

ניווט: כמה מצבים (פונקציות גל) עם אותה האנרגיה (לא מתרחש במימד אחד).

דרגת הניווט מוגדרת לפי מספר המצבים הקוונטים שיש לאנרגיה.

פונקציית הגל כתלות בזמן

$$\Psi (x,t)=\sum _{n}\alpha _{n}\psi _{n}(x)e^{\frac {iE_{n}t}{\hbar }}$$

כאשר *ψ_n(x)* הן פתרונות המצבים העמידים ו- *E_n* היא האנרגיה של כל מצב.

*|α_n|*² הן ההסתברות להיות במצב מסוים.

אם

Ψ
(
x
,
0
)

{\displaystyle \Psi (x,0)}

 מנורמלת אז

Ψ
(
x
,
t
)

{\displaystyle \Psi (x,t)}

 מנורמלת לכל *t*.

אופרטורים

אם

λ
ψ
=
ψ
Q
,

{\displaystyle \lambda \psi =\psi Q,}

 אז *ψ* היא פ"ע ו-*λ* הוא ע"ע.

פ"ע של אופרטור התנע:

ψ
(
x
)
=
A

e

i
k
x

{\displaystyle \psi (x)=Ae^{ikx}}

:

ה"ע"ע של אופרטור התנע:

ℏ
k

{\displaystyle \hbar k}

:

פ"ע של אופרטור המיקום:

ψ
(
x
)
=
δ
(
x
−
a
)

{\displaystyle \psi (x)=\delta (x-a)}

:

ו"ע"ע: *a* (המיקום עצמו).

אופרטור ההמילטוניאן (מוודד את האנרגיה):

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

אופרטורים הרמיטיים

גודל פיזיקאלי מדיד חייב להיות מספר ממשי .

כל הגדלים הפיזיקאלי מיוצגים ע"י אופרטורים הרמיטיים.

הגדרה:

(
A
Ψ
)

∗

=
Ψ

∗

A

{\displaystyle (A\Psi)^{*}=\Psi ^{*}A}

 לכל הפונקציות במרחב,

או

∫

−
∞

Ψ

1

∗

A
Ψ

2

d
x
=

∫

−
∞

(
A
Ψ

1

)

∗

Ψ

2

d
x

{\displaystyle \int _{-\infty }^{\infty }\Psi _{1}^{*}A\Psi _{2}\,dx=\int _{-\infty }^{\infty }(A\Psi _{1})^{*}\Psi _{2}\,dx}

תכונות של אופרטור הרמיטי:

- ערך התוחלת של אופרטור הרמטי תמיד ממשי.
- הערכים העצמיים של אופרטור הרמיטי תמיד ממשיים.
- הפונקציות העצמיות של אופרטור הרמטי הן אורתוגונליות.
- הפונקציות העצמיות של אופרטור הרמיטי מהוות סט שלם.

הפירוש הסטטיסטי המוכלל

אם

ϕ

n

λ

n

{\displaystyle \phi _{n}\lambda _{n}}

 הן הפ"ע והע"ע של האופרטור *Â* אז אפשר לרשום כל פונקציית גל בצורה:

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

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

האנרגיה הפוטנציאלית 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.

ספין ניסוי ושטרן גרלך: **GOOL**

תנ"י כולל:
$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

כאשר $\vec{L}$ תנ"י מסילתי, $\vec{S}$ תנ"י כתוצאה מהספין.

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

S גדולה - גודל התנ"י מהספין. s קטנה - הספין של

החלקיק, עבור אלקטרון $s = \frac{1}{2}$. עבור חלקיקים אחרים

ערכי הספין הן כפולות שלמות של חצי

... , $\frac{3}{2}, 1, \frac{1}{2}, 0$. חלקיקים שהספין שלהם חצי שלם

נקראים **פרמיונים** וחלקיקים שהספין שלהם שלם נקראים **בוזונים**.

$$S_z = m_s \hbar$$

$$-s < m_s < s \text{ בקפצות של } 1$$

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

מומנט מגנטי מהספין:
$$\vec{\mu}_s = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

פקטור g, עבור אלקטרון $g \approx 2.0023 \dots$

אטומים מורכבים והטבלה המחזורית: GOOL

כל אלקטרון מאכלס מצב מסוים המאופיין על ידי

המספרים הקוונטים: m_s, m_l, l, n . בגלל

האינטראקציה של האלקטרונים עם עצמם האנרגיות

תלויות ב- n וגם ב- l .

עיקרון האיסור של פאולי, לא יכולים להיות שני

אלקטרונים שיש להם בדיוק אותם מספרים קוונטים:

$$n, l, m_l, m_s$$

ככל ש- l גדל (יש יותר תנ"י מסילתי) האנרגיה גדלה.