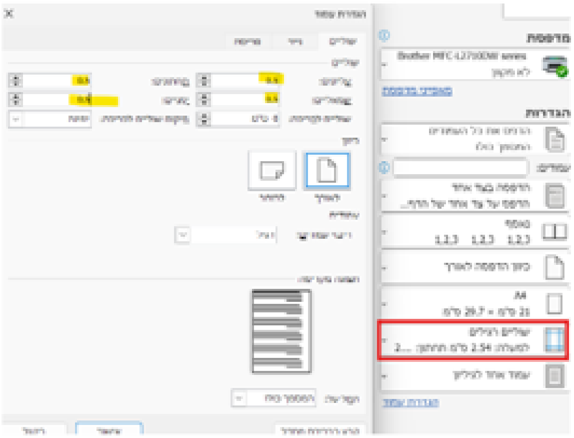
הוראות לדף הנוסחאות



הוראות הדפסה!:

את הדף יש להדפיס עם <u>שוליים מותאמות אישית ברוחב 0.5 בכל צד</u>.

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

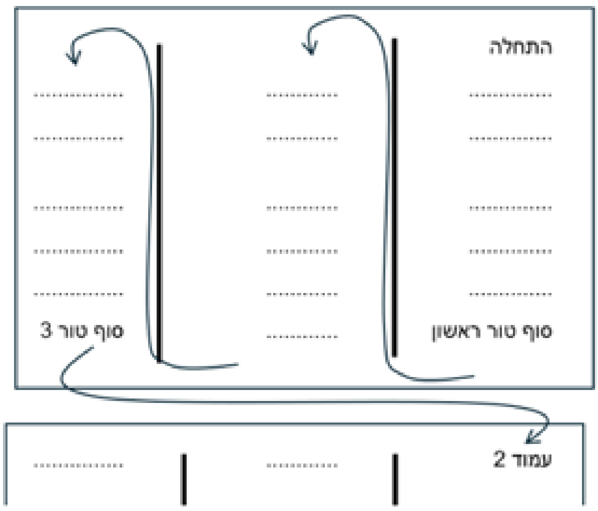
<u>עריכה:</u>

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!!

<u>מבנה הדף:</u>



הדף בנוי משלושה טורים.
ההתחלה היא בפינה הימנית העליונה.
בסוף הטור הראשון עוברים לטור השני <u>באותו עמוד</u> (ולא לעמוד הבא). בסוף הטור האחרון עוברים לטור הראשון (הימני) בעמוד הבא.

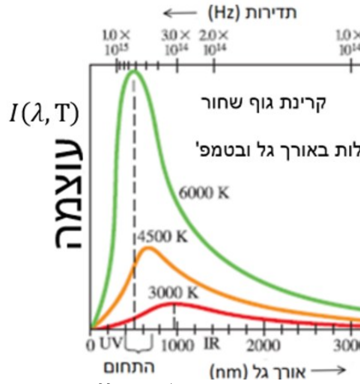
ניתן לשנות את כיוון הפריסה לרוחב, זה יוצר מראה יותר מרווח על חשבון מספר עמודים.

תיאוריות מוקדמות של תורת הקוונטים והאטום:

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

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

ההנחה 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 $n = 1,2,3 \ldots$

התיאוריה הפוטונית והאפקט הפוטואלקטרי:

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

הניסוי הפוטואלקטרי:

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

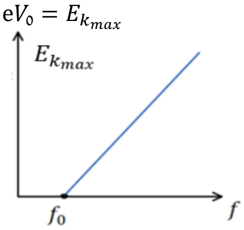
אנרגיה קינטית מקסימלית של האלקטרונים: $E_k = hf - W_0$

מתח עצירה: $eV_0 = E_{k_{max}}$

השוואה לתורה הגלית:

- לפי התורה הפוטונית

1. עוצמת האור קשורה למספר הפוטונים ולא לאנרגיה של כל אחד מהם. הגדלת העוצמה תגדיל את מספר האלק' הנפלטים אבל לא את האנרגיה הקינטית שלהם.



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: GOOL

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: GOOL

הסחת 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: GOOL

תנאים ביצירת זוגות:

1. חייב להיווצר זוג בשביל שיתקיים שימור מטען
2. אנרגיית הפוטון שווה לאנרגית הזוג, יש להוסיף אנרגית 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 אניהלציה. לדוגמה פוזיטרון פוגש אלקטרון, הם נכחדים ויוצרים פוטון.

דואליות גל חלקיק והאופי הגלי של החומר:

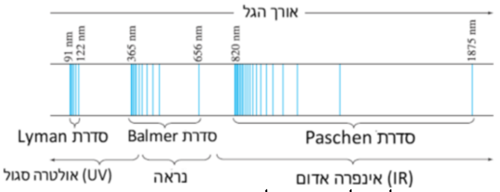
אורך גל דה ברולי של חלקיק: $\lambda = \frac{h}{p}$

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

מודלים מוקדמים של האטום: GOOL

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

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



בעיות במודל הפלנטארי של ראתפורד:

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.

מודל האטום של בוהר: GOOL

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.**

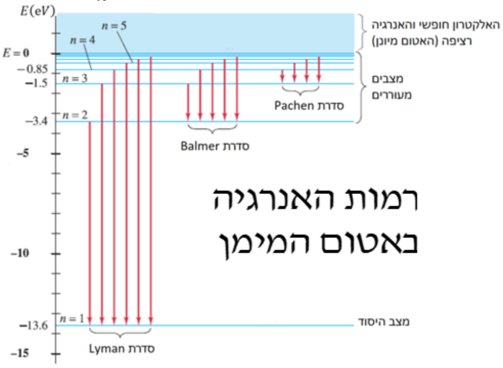
אנרגיית הפוטון שווה להפרש האנרגיות בין שני מצבים: $hf = E_U - E_L$

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

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

$r_1 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi e^2 m_e} \approx 0.529 \cdot 10^{-10}$

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



פונקציית הגל של החומר: GOOL

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

עקרון אי הוודאות של הייזנברג: GOOL

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

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

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: $\Delta E \Delta t \ge \frac{\hbar}{2}$

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.

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

משוואת שרדינגר: GOOL

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 מרוכבת. 3. פסי רציפה. 4. הנגזרת של פסי רציפה למעט נקודות בהן הפוטנציאל מתבדר.

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

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: GOOL

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:

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

$E_n = \frac{h^2}{8ml^2}n^2, n = 1,2,3\ldots$

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.

מנהור (tunneling): GOOL

מקדם ההעברה עבור $T << 1$ (ההסתברות לעבור):

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

גובה $U_0 > E$, אורך המחסום -l, $\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$ הפוטנציאל במחסום.

מקדם החזרה: $R = 1 - T$

אוסילטור הרמוני: GOOL

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 $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

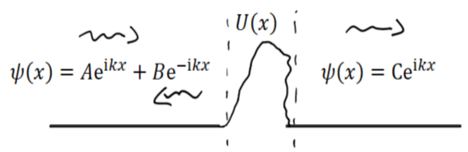
מהירות הפאזה והחבורה, יחס דיספרסיה

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 GOOL

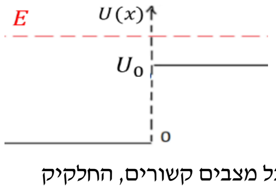


מקדם העברה (ההסתברות לעבור): $T = \frac{|C|^2}{|A|^2}$

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

- עבור מדרגת פוטנציאל וכאשר $E > U_0$



$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$

$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$

- 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.

פונקציית דלתא של דירק GOOL

הגדרות הפונקציה: $\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \ne 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}$

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.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)\,\mathrm{d}x = f(a)$$

<u>פיזור מפונקציית דלתא</u>:

עבור $V(x) = -a\delta(x)$ ו- $E<0$

נקבל $\psi(x) = \frac{\sqrt{am}}{\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{am}{\hbar^2}|x|}$ ו- $\mathrm{E} = -\frac{a^2m}{2\hbar^2}$

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

אם $E>0$: $R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\beta^2}{1+\beta^2}$

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

עבור: $V(x) = +a\delta(x)$, E חייב להיות גדול מאפס והפתרון זהה לפתרון במקרה של הפוטנציאל השלילי כאשר $E>0$.

פוטנציאלים תלת מימדים GOOL

<u>תיבה תלת מימדית בגודל $a\times b\times c$</u>:

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

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

<u>אוסילטור הרמוני תלת מימדי</u>:

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

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

<u>ניוון</u>: כמה מצבים (פונקציות גל) עם אותה האנרגיה (לא מתרחש במימד אחד).

דרגת הניוון מוגדרת לפי מספר המצבים הקוונטים שיש לאנרגיה.

פונקציית הגל כתלות בזמן GOOL

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

כאשר $\psi_n(x)$ הן פתרונות המצבים העמידים ו - E_n היא האנרגיה של כל מצב.

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

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

- אם $\Psi(x,0)$ מנורמלת אז $\Psi(x,t)$ מנורמלת לכל t.

אופרטורים GOOL

אם $\hat{Q}\psi = \lambda\psi$, אז ψ היא פ״ע ו-λ הוא ע״ע.

<u>פ״ע של אופרטור התנע</u>: $\psi(x) = Ae^{ikx}$

<u>הע״ע של אופרטור התנע</u>: $\hbar k$

<u>פ״ע של אופרטור המיקום</u>: $\psi(x) = \delta(x-a)$

<u>וע״ע</u>: a (המיקום עצמו).

<u>אופרטור ההמילטוניאן (מודד את האנרגיה)</u>:

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

אופרטורים הרמיטיים GOOL

גודל פיזיקאלי מדיד חייב להיות מספר ממשי .

כל הגדלים הפיזיקאלי מיוצגים ע״י אופרטורים הרמיטיים.

הגדרה: $\Psi^*\hat{A} = \left(\hat{A}\Psi\right)^*$ לכל הפונקציות במרחב,

או $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_1^*\hat{A}\Psi_2\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\hat{A}\Psi_1\right)^*\Psi_2\,\mathrm{d}x$

תכונות של אופרטור הרמיטי:

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

הפירוש הסטטיסטי המוכלל GOOL

אם ϕ_n ו-λ_n הן הפ״ע וע״ע של האופרטור $\hat{A}$ אז אפשר לרשום כל פונקציית גל בצורה:

$$\Psi(x,t) = \sum \alpha_n\phi_n$$

$|\alpha_n|^2$ 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.

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

במקרה הרציף:

$$|\alpha_n|^2 \to |\alpha(k,t)|^2\,\mathrm{d}k;\ \lambda_n \to \lambda(k)\ ;\ \ \phi_n \to \phi(k\,)$$

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

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

יחס החילוף GOOL

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

יחס החילוף הוא אופרטור בפני עצמו.

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

<u>יחס החילוף של המיקום עם התנע</u>: $\langle[\hat{x},\hat{p}_x]\rangle = i\hbar$

אס״ם האופרטורים $\hat{A}$ ו-$\hat{B}$ 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 ביניהם לפי: $\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|$

משפט ארנפס GOOL

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

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

אטום המימן ותנע זוויתי קוונטי: GOOL

<u>משוואת שרדינגר לפוטנציאל התלוי רק ב-r</u>:

<u>ניתן לעשות הפרדת משתנים לפונקצית הגל</u>:

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

<u>המשוואה ל-$\theta(\theta)$</u>:

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

<u>משוואה ל-$\phi(\varphi)$</u>: $\frac{\partial^2\phi(\varphi)}{\partial\varphi^2} = -m^2\phi(\varphi)$

<u>פתרון ל - $\theta(\theta)$ ו- $\phi(\varphi)$</u>:

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

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

$l\geq 0$ $\varepsilon = \begin{cases}(-1)^m & \mathrm{m}>0\\ 1 & \mathrm{m}\leq 0\end{cases}$ ו- $l \leq |m|$ שלם.

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

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

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

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta;\ Y_2^{\pm1} = \mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$Y_1^{\pm1} = \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta e^{\pm i\phi};$$

$$Y_2^{\pm2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$$

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

$$Y_3^{\pm1} = \mp\left(\frac{21}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\theta\,(5\cos^2\theta - 1)e^{\pm i\phi}$$

$$Y_3^{\pm2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin^2\theta\cos\theta\, e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_3^{\pm3} = \mp\left(\frac{35}{64\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sin^3\theta\, e^{\pm 3i\phi}$$

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

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

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

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

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

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

<u>אורתוגונליות</u>:

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

<u>המשוואה לחלק הרדיאלי</u>:

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

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

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

<u>פתרון עבור אטום המימן</u> $V(r) = \frac{ke^2}{r}$:

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

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

<u>רדיוס בוהר</u>: $a = \frac{\hbar^2}{kme^2} = 0.529\cdot10^{-10}m$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

<u>פתרון כללי</u>:

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

n ו- l שלמים, n=1,2,3… ו- $0\leq l\leq n-1$

m שלם ומקיים: $-l\leq m\leq l$

<u>אורתוגונליות</u>:

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

<u>פונקציית ההסתברות הרדיאלית (צפיפות ההסתברות למצא את האלקטרון במרחק r מהגרעין)</u>:

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

<u>התנע הזוויתי</u>: $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = \left(L_x,L_y,L_z\right)$

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

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

גודל התנ״ז יכול להיות אפס בניגוד למודל של בוהר.

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

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

גם הכיוון של וקטור התנע הזוויתי מקוונטט!

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

<u>כללי מעבר</u>: א. $n_i > n_f$ ב. $\Delta l = l_f - l_i = \pm1$

ג. $\Delta m = m_f - m_i = 0,\pm1$

מומנט מגנטי מסילתי ואפקט זימן הנורמאלי:

<u>מומנט כוח על דיפול מגנטי</u> $\vec{\mu}$: $\vec{\tau} = \vec{\mu}\times\vec{B}$

<u>אנרגיה פוטנציאלית של דיפול מגנטי בשדה מגנטי</u>:

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

<u>כוח על דיפול מגנטי בשדה מגנטי לא אחיד</u>:

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

<u>מומנט דיפול מגנטי כתוצאה מתנועת האלקטרון סביב הגרעין</u>: $\vec{\mu} = \frac{-\mu_B}{\hbar}\vec{L}$

<u>המגנטון של בוהר</u>: $\mu_B = \frac{\mathrm{e}\hbar}{2m_e} = 5.788\cdot10^{-5}\,{eV}/{T}$

האנרגיה הפוטנציאלית של המומנט המגנטי המסילתי עם שדה מגנטי חיצוני: $U = \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L}\cdot\vec{B} = \mu_B Bm$ כאשר m הוא המספר הקוונטי של L_z.

<u>תוספת לשינוי באנרגיה כתוצאה ממעבר בין הרמות בעקבות **אפקט זימן**</u>: $\Delta E_z = \mu_B B\Delta m$; $\Delta m = \pm1,0$

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

ספין ניסוי ושטרן גרלך: GOOL

<u>תנ״ז כולל</u>: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

כאשר $\vec{L}$ תנ״ז מסילתי, $\vec{S}$ 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 נקראים **פרמיונים** וחלקיקים שהספין שלהם שלם נקראים **בוזונים.**

$S_z = m_s\hbar$

$-s < m_s < s$ בקפיצות 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 $g = 2.0023\ldots \approx 2$

אטומים מורכבים והטבלה המחזורית: GOOL

כל אלקטרון מאכלס מצב מסוים המאופיין על ידי המספרים הקוונטים: $n,\ l,\ m_l,\ m_s$. 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"ז מסילתי) האנרגיה גדלה.

ייצוג באמצעות אלגברה ליניארית: GOOL

תכונות המכפלה הפנימית:

סקלר $= \langle v|u\rangle = \langle u|v\rangle^*$

$\langle v|v\rangle$ תמיד ממשי גדול או שווה לאפס

אם $\langle v|v\rangle = 0$ אז $|v\rangle = |0\rangle$

$< v|(\alpha|u> + \beta|k>) = \alpha\langle v|u\rangle + \beta\langle v|k\rangle$

הגדרת המכפלה הפנימית בפונקציות הגל:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\psi_2\,dx$$

נורמה: $\|v\| = \sqrt{\langle v|v\rangle}$

מכפלה פנימית: $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \sum\alpha_i^*\beta_i$ כאשר α_i ו- β_i הם המקדמים של פונקציות הגל באותו בסיס

אי שוויון שוורץ: GOOL

$$|\langle a|b\rangle|^2 \le \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle$$

זווית מוכללת בין וקטורים: $\cos\theta = \sqrt{\frac{\langle a|b\rangle\langle b|a\rangle}{\langle a|a\rangle\langle b|b\rangle}}$

אי שוויון המשולש: $|(|a\rangle + |b\rangle)| \le |a| + |b|$

אופרטורים בייצוג אלגברי GOOL

אופרטורים מיוצגים באמצעות מטריצות:

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ Q_{n1} & Q_{n2} & \cdots & Q_{nn} \end{pmatrix}$$

- האיבר Q_{ij} מעביר את הוקטור e_j לוקטור e_i (כפול סקלר כלשהו): $Q_{ij} = \langle e_i|\hat{Q}|e_j\rangle$, i שורה, j עמודה.
- אם הבסיס הוא בסיס עצמי של אופרטור כלשהו אז המטריצה של האופרטור תהיה אלכסונית והערכים על האלכסון הם הערכים העצמיים של האופרטור.
- כתיב נוסף: $\langle\psi_1|\hat{Q}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{Q}\psi_2\rangle$

$$\langle\hat{Q}\psi| = (\hat{Q}|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{Q}^\dagger$$

מטריצה משוחלפת:

$$A^T = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

צמד הרמיטי:

$$A^\dagger = (A^*)^T = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & \cdots & A_{n1}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* & \cdots & A_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{1n}^* & A_{2n}^* & \cdots & A_{nn}^* \end{pmatrix}$$

מטריצת יחידה:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = \sum|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

כפל מטריצות: $C = A\cdot B \Rightarrow C_{mn} = \sum A_{mi}B_{in}$

כפל מטריצות הוא לא חילופי: $AB \ne BA$

יחס חילוף בין מטריצות: $[A,B] = AB - BA$

מטריצה הופכית: $AA^{-1} = A^{-1}A = I$

מטריצה אוניטרית: $U^\dagger = U^{-1}$

זהויות:

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger; \quad (AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$$

$$(A^\dagger)^\dagger = A; \ \left(\langle\psi_1|\hat{A}^\dagger|\psi_2\rangle\right)^* = \langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle$$

$$(AB)^T = B^TA^T; \ \langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi_1|\psi_2\rangle$$

- **הגודל** של ע"ע של אופרטור אוניטרי הוא תמיד 1.

אופרטורים הרמיטים ואוניטרים הם אופרטורים נורמליים, כלומר: $[A, A^\dagger] = 0$.

פונקציות של אופרטורים והפרופוגטור GOOL

אם $f(x) = \sum_n \alpha_n x^n$ אז ניתן להגדיר $f(\hat{A}) = \sum_n \alpha_n \hat{A}^n$

אם ורק אם $\hat{A}$ אלכסונית ו- a_i הם הע"ע שלה

כלומר אם

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & . & 0 \\ 0 & 0 & 0 & . \end{pmatrix}$$

אז:

$$\hat{B} = f(\hat{A}) = \begin{pmatrix} f(a_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f(a_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & . & 0 \\ 0 & 0 & 0 & . \end{pmatrix}$$

זהויות:

אם $[\hat{A},\hat{B}] = 0$ אז $[\hat{A}, f(\hat{B})] = 0$

אם $[\hat{A},\hat{B}] = cI$ כאשר I היא מטריצת יחידה ו- c קבוע. אז $[\hat{A}, f(\hat{B})] = c\frac{df(\hat{B})}{dx}$

אם f(x) ממשית (ואנליטית, כלומר ניתן לפתח אותה לטור) אז $f^\dagger(\hat{A}) = f(\hat{A}^\dagger)$

הפרופוגטור: $|\Psi(t)> = \hat{U}(t)|\Psi(0)>$

$$\hat{U}(t) = \Sigma e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|E_n><E_n| = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$$

הפרופוגטור הוא אופרטור אוניטרי ולכן הנורמה של פונקציית הגל נשמרת במהלך ההתפתחות בזמן.

תנ"ז מסילתי והספין: GOOL

התנ"ז בקואורדינטות כדוריות: $\hat{L}_z = (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial\varphi}$

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$$

$$\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hbar\hat{L}_z$$

$$\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - \hbar\hat{L}_z$$

יחסי החילוף של התנ"ז המסילתי:

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad ; \quad [\hat{L}_y,\hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$$

$$[\hat{L}_z,\hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \quad ; \quad [\hat{L}_+,\hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$$

$$[\hat{L}_z,\hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm \ ; \ [\hat{L}^2,\hat{L}_\pm] = 0$$

$$[\hat{L}^2,\hat{L}_z] = [\hat{L}^2,\hat{L}_y] = [\hat{L}^2,\hat{L}_x] = 0$$

$$L_\pm Y_l^m = \hbar\sqrt{l(1+1) - m(m\pm1)}\,Y_l^{m\pm1}$$

מטריצות התנ"ז עבור $l = 1$:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{L}^2 = \hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ספין - אותם יחסי חילוף כמו התנ"ז:

$$\hat{S}_z f = \hbar m_s f$$

$$\hat{S}^2 f = \hbar^2 S(S+1) f$$

$-S \le m_s \le S$ קפיצות של 1

S, m_s יכולים להיות חצי שלמים.

S קבוע ותלוי רק בסוג החלקיק. פרמיונים– חצי שלם, בוזונים – ספין שלם.

ספין חצי: $S = \frac{1}{2} \qquad m_s = \pm\frac{1}{2}$

$$|x_+\rangle = \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \equiv |\uparrow\rangle \ ; \ |x_-\rangle = \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \equiv |\downarrow\rangle$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$$

$$\hat{S}_\pm|s,m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s\pm1)}\,|s,m_s\pm1\rangle$$

פונקציית ספין כללית: $|x\rangle = \alpha|x_+\rangle + \beta|x_-\rangle$

המילטוניון פריק:

$$\hat{H}(\hat{X},\hat{P},\hat{S}) = \hat{H}_0(\hat{X},\hat{P}) + \hat{H}_S(\hat{S})$$

במקרה זה ניתן לפתור את משוואת שרדינגר לספין ולמרחב בנפרד.

תורת ההפרעות ללא תלות בזמן וללא ניוון:

עבור המילטוניאן מהצורה $H = H_0 + H'$, כאשר $H' << H_0$.

$E_n^{(0)}$ ו-$\psi_n^{(0)}$ הן האנרגיות ופונקציות הגל של H_0.

$$E_n^{(1)} = \left\langle\psi_n^{(0)}\middle|H'\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle$$

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m\ne n}\frac{\left\langle\psi_m^{(0)}\middle|H'\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\ne n}\frac{\left|\left\langle\psi_m^{(0)}\middle|H'\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$