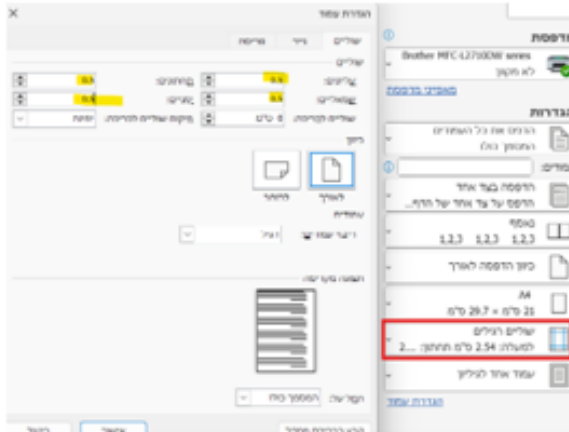


הוראות לדף הנוסחאות

הוראות הדפסה!

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

ב WORD, יש לבחור בלשונית הדפסה את חלון השולים, לבחור שולים 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 באות
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 ולאטר GOOL

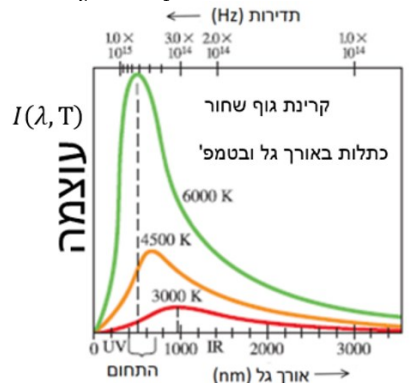
הדף מיועד לכל שימוש שאינו מסחרי ובפרט לשימוש מרצים, מורים, סטודנטים ותלמידים בקורסים שונים, ניתן לערוך את הדף אך יש להשאיר סימונים של אתר גול.

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

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' 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:

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:

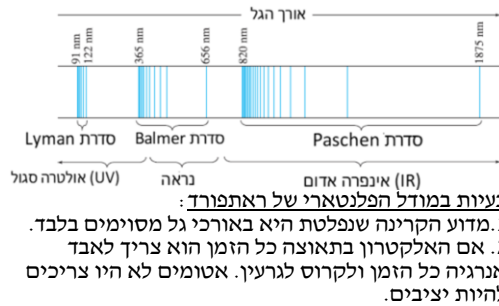
אורך גל דה ברויל של חלקיק: $\lambda = \frac{h}{p}$

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

מודלים מוקדמים של האטום:

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

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:

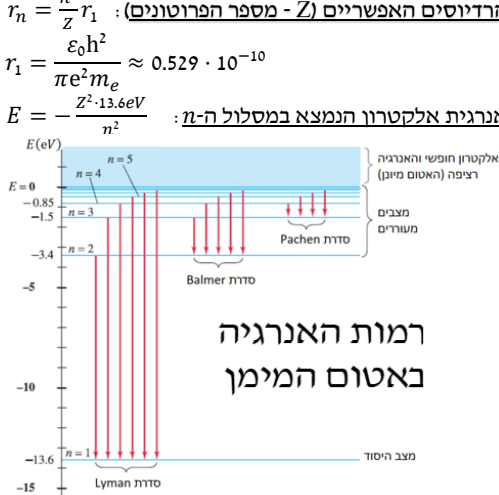
$hf = E_U - E_L$

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

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: $E = -\frac{Z^2 \cdot 13.6 eV}{n^2}$



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:

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

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

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 קלאסיות.

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

מקדם החזרה: $R = 1 - T$

אוסילטור הרמוני:

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

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

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

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):

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

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

מהירות החבורה:

יחס דיספרסיה הוא הקשר בין ω ל- k

פיזור

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\psi(x) = Ce^{ikx}$$

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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: $U = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B} = \mu_B B m$
הוא המספר הקוונטי של L_z .
תוספת לשינוי באנרגיה כתוצאה ממעבר בין הרמות

בעקבות אפקט זימן: $\Delta m = \pm 1, 0$; $\Delta E_z = \mu_B B \Delta m$
התוספת בעקבות אפקט זימן גורמת לכל קו ספקטרולי להתפצל לשלושה קווים.

ספין ניסוי ושטרן גרלך:
 $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
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 קרן כפולות שלמות של חצי
 $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$
נקראים **פרמיונים** וחלקיקים שהספין שלהם חצי 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 $2 \approx 2.0023 \dots$

אטומים מורכבים והטבלה המחזורית:
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, 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 מסילתי) האנרגיה גדלה.
ייצוג באמצעות אלגברה לינארית:

טכנות המכפלה הפנימית:
 $\langle u|v \rangle = \langle v|u \rangle^*$ סקלר
 $\langle v|v \rangle = 0$ אם $|v\rangle = |0\rangle$
 $\langle v|v \rangle = 0$ אם $|v\rangle = |0\rangle$
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 שורץ:
 $\langle a|b \rangle^2 \leq \langle a|a \rangle \langle b|b \rangle$

זווית מוכללת בין וקטורים: $\cos \theta = \frac{\langle a|b \rangle \langle b|a \rangle}{\langle a|a \rangle \langle b|b \rangle}$
אי שוויון המשולש: $||a\rangle + |b\rangle| \leq |a| + |b|$

אופרטורים בייצוג אלגברי
אופרטורים מיוצגים באמצעות מטריצות:

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

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

- כתיב נוסף: $\langle \psi_1 | Q | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | Q | \psi_2 \rangle$
 $\langle \hat{Q} \psi | = (\hat{Q} | \psi \rangle)^\dagger = \langle \psi | \hat{Q}^\dagger$

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

צמד הרמיטי:
 $A^\dagger = (A^*)^T = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & \dots & A_{n1}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* & \dots & A_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n}^* & A_{2n}^* & \dots & A_{nn}^* \end{pmatrix}$
מטריצת יחידה:

$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \sum |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$
כפל מטריצות: $C = A \cdot B \Rightarrow C_{mn} = \sum A_{mi} B_{in}$
כפל מטריצות הוא לא חילופי: $AB \neq BA$
יחס חילוף בין מטריצות: $[A, B] = AB - BA$
מטריצה ההופכית: $AA^{-1} = A^{-1}A = I$
מטריצה אוניטרית: $U^\dagger = U^{-1}$
זהויות:

$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$; $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$
 $(A^\dagger)^\dagger = A$; $(\langle \psi_1 | A^\dagger | \psi_2 \rangle)^* = \langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle$
 $(AB)^T = B^T A^T$; $\langle \psi_1 | A \psi_2 \rangle = \langle A^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle$
- הגודל של ע"ע של אופרטור אוניטרי הוא תמיד 1.
אופרטורים הרמיטים ואוניטרים הם אופרטורים נורמליים, כלומר: $[A, A^\dagger] = 0$.

פונקציות של אופרטורים והפרופגטור
 $f(\hat{A}) = \sum_n \alpha_n \hat{A}^n$ אז ניתן להגדיר $f(x) = \sum_n \alpha_n x^n$
אם ורק אם $\hat{A}$ אלכסונית ו- a_i הם הע"ע שלה
כלומר אם $\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$
אז:

$\hat{B} = f(\hat{A}) = \begin{pmatrix} f(a_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f(a_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$
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
 $[\hat{A}, f(\hat{B})] = c \frac{df(\hat{B})}{d\hat{B}}$
אם $f(x)$ ממשית (ואנליטית), כלומר ניתן לפתח אותה לטור
אז $f^+(\hat{A}) = f(\hat{A}^\dagger)$

הפרופגטור:
 $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle$
 $\hat{U}(t) = \sum e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |E_n\rangle \langle E_n|$
הפרופגטור הוא אופרטור אוניטרי ולכן הנורמה של פונקציית הגל נשמרת במהלך ההתפתחות בזמן.

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

$\hat{L}_x = -i\hbar \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$
 $\hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$
 $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$
 $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$
 $\hat{L}_+ \hat{L}_- = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hbar \hat{L}_z$
 $\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - \hbar \hat{L}_z$

יחסי החילוף של התנ"ז המסילתי:
 $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$; $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x$
 $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$; $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_z$
 $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm \hbar \hat{L}_\pm$; $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$
 $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_z^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = 0$

$L_\pm Y_l^m = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_l^{m \pm 1}$
מטריצות התנ"ז עבור $l = 1$:
 $\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
 $\hat{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$
 $\hat{L}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

ספין - אותם יחסי חילוף כמו התנ"ז:
 $\hat{S}_z f = \hbar m_s f$
 $\hat{S}^2 f = \hbar^2 S(S+1) f$
 $S \leq m_s \leq S$ - קפיצות של 1
 m_s, S יכולים להיות חצי שלמים.
 S קבוע ותלוי רק בסוג החלקיק. פרמיונים - חצי שלם, בוזונים - ספין שלם.

ספין חצי:
 $S = \frac{1}{2}$ $m_s = \pm \frac{1}{2}$
 $|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |\uparrow\rangle$; $|x_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \equiv |\downarrow\rangle$
 $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\hat{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
 $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i \hat{S}_y$
 $\hat{S}_\pm |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle$
פונקציית ספין כללית:
 $|x\rangle = \alpha |x_+\rangle + \beta |x_-\rangle$
המילטוניו פרק:

$\hat{H}(\hat{X}, \hat{P}, \hat{S}) = \hat{H}_0(\hat{X}, \hat{P}) + \hat{H}_S(\hat{S})$
במקרה זה ניתן לפתור את משוואת שרדינגר לספין ולמרחב בנפרד.

נקיפת לרמור:
ערך התוחלת של S עבור ספין חצי בשדה מגנטי עושה נקיפה (פרסציה) מסביב לשדה בתדירות $\omega = \gamma B_0$
ובזווית α ביחס לשדה כאשר $\gamma = g \frac{-e}{2m_e}$.

g הוא היחס הגיירו מגנטי. α נקבעת מתנאי התחלה. פונקציית הגל:

$\chi(t) = \left(\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{\gamma B_0 t}{2}}, \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) e^{\frac{\gamma B_0 t}{2}} \right)$
חיבור תנ"ז:

חיבור שני ספינים:
 $|S_1 - S_2| \leq S < S_1 + S_2$
 S הוא של כל המערכת והוא לא קבוע בניגוד לחלקיק בודד.
 $-S \leq m_s \leq S$

$|S, m_s\rangle$ עבור שני חלקיקים עם ספין חצי:
 $|1, -1\rangle \rightarrow |\downarrow\downarrow\rangle$
 $|1, 1\rangle \rightarrow |\uparrow\uparrow\rangle$; $|1, 0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$

מצב סינגלט:
 $|0, 0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

תנ"ז כולל:
 $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$
אותם יחסי חילוף כמו של התנ"ז המסילתי והספין.
 $\hat{J}_z f = \hbar m_j f$; $\hat{J}^2 f = \hbar^2 j(j+1) f$
 $m_j = m_l + m_s$; $|l - S| \leq j \leq l + S$

אינטראקציית ספין מסלול:
 $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e^2 \cdot \vec{S} \cdot \vec{L}}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3}$
 $\vec{B} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e}{m_e c^2 r^3} \vec{L}$

הע"ע של $\vec{S} \cdot \vec{L}$:
 $\frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - S(S+1) - l(l+1))$

אופרטור העלאה והורדה באוסילטור הרמוני:
אופרטור ההורדה (או השמדה):

$\hat{a} |\psi_n\rangle = \sqrt{n} |\psi_{n-1}\rangle$; $\hat{a} = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p}\right)$
אופרטור ההעלאה (או יצירה):

$\hat{a}^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p}\right)$
 $\hat{a}^\dagger |\psi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\psi_{n+1}\rangle$
 $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger - \frac{1}{2}\right)$
 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$; $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ $n = 0, 1, 2, \dots$

$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$
 $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} x\right]$
 $H_0(y) = 1$; $H_2(y) = -2(1 - 2y^2)$
 $H_1(y) = 2y$; $H_3(y) = -12\left(y - \frac{2}{3}y^3\right)$

פונקציית הגל של חלקיקים זהים
 $P(a \leq x_1 \leq b, c \leq x_2 \leq d) = \int_c^d \int_a^b |\Psi(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2$

$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1, x_2, t)$
אם הפוטנציאל לא תלוי בזמן אז פונקציית הגל היא:

$\Psi(x_1, x_2, t) = \psi(x_1, x_2) e^{-\frac{iE t}{\hbar}}$
עבור שני חלקיקים הנמצאים במצבים $\psi_a(x)$ ו- $\psi_b(x)$ אורתונורמליים, פונקציית הגל היא:

- אם החלקים שונים, אז: $\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1) \psi_b(x_2)$
- אם החלקיקים הם בוזונים / פרמיונים זהים אז פונקציית הגל צריכה להיות סימטרית (פלוס) / אנטי-סימטרית (מינוס) **להחלפה של החלקיקים**:

$\Psi_\pm(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \pm \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)]$

שימו לב שפונקציית הגל הכללית צריכה לקיים את תנאי הסימטריה וצריך להתחשב גם בספין.

כוח ההחלפה – Exchange Forces

ריבוע המרחק הממוצע של שני חלקיקים שונים

$$\langle \Delta x^2 \rangle_a = \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2 \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

$$\langle x \rangle_a = \int x |\psi_a(x)|^2 dx$$

ריבוע המרחק הממוצע של חלקיקים עם פונקציה מרחבית

סימטרית / אנטי סימטרית

$$\langle \Delta x^2 \rangle_{\pm} = \langle \Delta x^2 \rangle_a \mp 2 |\langle x \rangle_{ab}|^2$$

$$\langle x \rangle_{ab} = \int \psi_a(x) \psi_b(x) dx$$

קשר קוולנטי נוצר כאשר יש אלקטרונים במצב ספין

אנטי-סימטרי (עבור שני אלקטרונים זהו מצב הסינגלט).

מצב הספין האנטי-סימטרי מאלץ את פונקציית הגל

המרחבית של האלקטרונים להיות סימטרית ולקרב בין

האלקטרונים. המטען העודף של האלקטרונים כשהם

מתקרבים מושך את הגרעינים של האטומים ויוצר את

הקשר.

תורת ההפרעות ללא תלות בזמן וללא ניוון:

עבור המילטוניאן מהצורה $H = H_0 + H'$,

כאשר $H' \ll H_0$.

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

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

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

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