

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

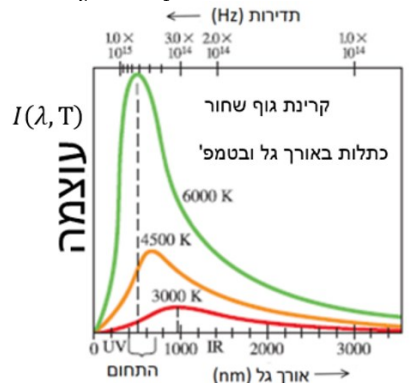
הדף מיועד לכל שימוש שאינו מסחרי ובפרט לשימוש מרצים, מורים, סטודנטים ותלמידים בקורסים שונים, ניתן לערוך את הדף אך יש להשאיר סימונים של אתר גול.

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' הנפלטים 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:

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:

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:

GOOL

תנאים ביצירת זוגות:

1. חייב להיווצר זוג בשביל שיתקיים שימור מטען

2. אנרגיית הפוטון שווה לאנרגיה 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.

דואליות גל חלקיק והאופי הגלי של החומר:

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

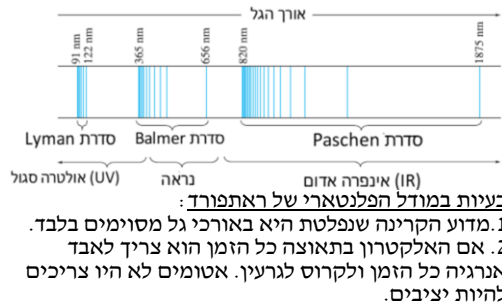
$p = mv$ לא יחסותי, $p = \gamma mv$ יחסותי

מודלים מוקדמים של האטום:

GOOL

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

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



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

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:

GOOL

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:

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 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:

GOOL

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:

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 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:

GOOL

פונקציית הגל, חלקיק חופשי: $\psi(x) = A \sin(kx)$

חבילת גלים: $\psi(x) = \sum A_n \sin(k_n x) + B_n \cos(k_n x)$

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):

GOOL

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

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

GOOL

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

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

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

פיזור

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

פתרון עבור אטום המימן

V
(
r
)
=

k
e

2

r

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

:

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

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

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

רדיוס בוהר:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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... ו-*l* ≤ *n* -1
m שלם ומקיים: -*l* ≤ *m* ≤ *l*

אורתוגונליות:

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

פונקציית ההסתברות הרדיאלית (צפיפות ההסתברות

למצא את האלקטרון במרחק *r* מהגרעין):

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

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

התנע הזוויתי:

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

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

גודל התנאי יכול להיות אפס בניגוד לגודל של בוהר.

את הכיוון נגזר באמצעות הגודל של *L*_z, משם אפשר

$$\cos \theta = \frac{L_z}{|L|}$$

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

גם הכיוון של וקטור התנע הזוויתי מקוונטט!

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

כללי מעבר: *n*_f > *n*_i. ב. *Δl* = *l*_f - *l*_i = ±1

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

מומנט מגנטי מסילתי ואפקט זימן הנורמאלי:

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

מומנט כוח על דיפול מגנטי

μ
:

{\displaystyle {\vec {\boldsymbol {\mu }}}:}

אנרגיה פוטנציאלית של דיפול מגנטי בשדה מגנטי:

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

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

*|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 הרצף:

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

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

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

GOOL

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 |}

:

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.

GOOL

זרם ההסתברות:

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

- זרם ההסתברות מתאפס כשפונקציות גל ממשיים.
- 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*):

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- עבור מדרגת פוטנציאל

$$E > U_0$$

וכאשר

- 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.

GOOL

פונקציית דלתא של דיראק

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

הגדרות הפונקציה:

$$\delta_a(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2} \quad \text{או} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \, dx = 1$$

כאשר a הולך לאפס.

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

פיזור מפונקציית דלתא:

$$\text{עבור } E < 0 \quad V(x) = -a\delta(x)$$

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

נקבל

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

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

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

עבור:

E
,
V
(
x
)
=
+
a
δ
(
x
)

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

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

E
>
0

{\displaystyle E>0}

.

GOOL

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:

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

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

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

דרגת הניוון מוגדרת לפי מספר המצבים הקוונטים שיש לאנרגיה.

GOOL

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.

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

- אם *Ψ*(*x*,0) מנורמלת אז *Ψ*(*x*,*t*) מנורמלת לכל *t*.

GOOL

אופרטורים

אם *ψ* = *λψ*, אז *ψ* היא פ"ע ו-*λ* הוא ע"ע.

$$\psi(x) = A e^{ikx}$$

פ"ע של אופרטור התנע:

$$\hbar k$$

הע"ע של אופרטור התנע:

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

פ"ע של אופרטור המיקום:

ע"ע: *a* (המיקום עצמו).

אופרטור ההמילטוניאן (מוודד את האנרגיה):

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

GOOL

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,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A} \Psi_1)^* \Psi_2 \, dx$$

או 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.

GOOL

הפירוש הסטטיסטי המוכלל

אם *φ_n* ו-*λ_n* הן הפ"ע והע"ע של האופרטור *Â* אז אפשר לרשום כל פונקציית גל בצורה:

כוח על דיפול מגנטי בשדה מגנטי לא אחיד:

מומנט דיפול מגנטי כתוצאה מתנועת האלקטרון סביב הגרעין:

μ
→

=

−

μ

B

ℓ
→

h

{\displaystyle {\vec {\mu }}=-{\frac {\mu _{B}}{h}}{\vec {\ell }}}

המנגנטון של בוהר:

μ

B

=

e
ℏ

2

m

e

=5.788⋅

10

−
5

eV

/

T

{\displaystyle \mu _{B}={\frac {e\hbar }{2m_{e}}}=5.788\cdot 10^{-5}eV/T}

האנרגיה הפוטנציאלית של המומנט המגנטי המסילתי עם שדה מגנטי חיצוני:

U
=

μ

B

ℓ
→

⋅

B
→

h

{\displaystyle U={\frac {\mu _{B}}{h}}{\vec {\ell }}\cdot {\vec {B}}}

 כאשר m הוא המספר הקוונטי של *L_z*.

תוספת לשינוי באנרגיה כתוצאה ממעבר בין הרמות

בעקבות **אפקט זימן**:

Δ

m

=
±
1,0
;

Δ

E

z

=

μ

B

B
Δ

m

{\displaystyle \Delta m=\pm 1,0\ ;\ \Delta E_{z}=\mu _{B}B\Delta m}

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

ספין ניסוי ושטרן גרלך: **GOOL**

תנייז כולל:

J
→

=

L
→

+

S
→

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

כאשר *L* תנייז מסילתי, *S* תנייז כתוצאה מהספין.

S גדולה - גודל התנייז מהספין. *s* קטנה - הספין של החלקיק, עבור אלקטרון *s* =

1
2

{\displaystyle {\frac {1}{2}}}

. עבור חלקיקים אחרים ערכי הספין הן כפולות שלמות של חצי

s
=
0,

1
2

,1,

3
2

, …

{\displaystyle s=0,{\frac {1}{2}},1,{\frac {3}{2}},\,\ldots }

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

S_z = *m_s*ℏ ‏ *s* < *m_s* < -*s* בקפיצות של 1 עבור אלקטרון:

m

s

=
−

1
2

,

1
2

{\displaystyle m_{s}=-{\frac {1}{2}},{\frac {1}{2}}}

מומנט מגנטי מהספין:

μ

s

=
−
g

μ

B

ℓ
→

h

{\displaystyle {\vec {\mu }}=-g{\frac {\mu _{B}}{h}}{\vec {\ell }}}

פקטור g, עבור אלקטרון 2 ≈ 2.0023 ...

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 תנייז מסילתי) האנרגיה גדלה.

ייצוג באמצעות אלגברה לינארית: GOOL
תכונות המכפלה הפנימית:

u | *v*⟩ = ⟨ *u* | *v*⟩* = סקלר

⟨ *v* | *v*⟩ תמיד ממשי גדול או שווה לאפס

אם ⟨ *v* | *v*⟩ = 0 אז | *v*⟩ = |0⟩

⟨ *v* | *v*⟩ = 0 אז | *v*⟩ = α | *v*⟩ + β | *k*⟩ < *v* | (α | *u* > + β | *k* >) = α ⟨ *v* | *u*⟩ + β ⟨ *v* | *k*⟩

הגדרת המכפלה הפנימית בפונקציות הגל:

⟨ *ψ*₁ | *ψ*₂⟩ = ∫_{−∞}[∞] *ψ*₁^{*} *ψ*₂ dx

נורמה:

||
v
||
=

√
⟨
v
|
v
⟩

{\displaystyle ||v||={\sqrt {\langle v|v\rangle }}}

מכפלה פנימית: ⟨ *ψ*₁ | *ψ*₂⟩ = ∑ α_{*i*}* β_{*i*} כאשר α_{*i*} ו-β_{*i*} הם המקדמים של פונקציות הגל באותו בסיס

אי שוויון שוורץ: GOOL
|⟨ *a* | *b*⟩|² ≤ ⟨ *a* | *a*⟩ ⟨ *b* | *b*⟩

זווית מוכללת בין וקטורים:

cos
⁡
θ
=

⟨
a
|
b
⟩

⟨
a
|
a
⟩
⟨
b
|
b
⟩

{\displaystyle \cos \theta ={\frac {\langle a|b\rangle }{\langle a|a\rangle \langle b|b\rangle }}}

אי שוויון המשולש: GOOL
|⟨ (*a*) + (*b*) |⟩| ≤ |⟨ *a* |⟩| + |⟨ *b* |⟩|
אופרטורים בייצוג אלגברי

אופרטורים מיוצגים באמצעות מטריצות:

Q
=

(

Q

11

Q

12

…

Q

1n

Q

21

Q

22

…

Q

2n

⋮

⋮

⋮

Q

n1

Q

n2

…

Q

nn

)

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

- האיבר *Q_{ij}* מעביר את הוקטור *e_j* לוקטור *e_i* (כפול סקלר כלשהו):

Q

i
j

=
⟨

e

i

|

Q
|

e

j

⟩

{\displaystyle Q_{ij}=\langle e_{i}|Q|e_{j}\rangle }

 שורה, *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:

⟨

ψ

1

|

Q
|

ψ

2

⟩
=
⟨

ψ

1

|

Q
|

ψ

2

⟩

{\displaystyle \langle \psi _{1}|\;Q|\psi _{2}\rangle =\langle \psi _{1}|\;Q|\psi _{2}\rangle }

⟨
Q
ψ
|
=
(
Q
|
ψ
)

†

=
⟨
ψ
|

Q
†

{\displaystyle \langle Q\psi |=({\vec {Q}}|\psi)^{\dagger }=\langle \psi |{\vec {Q}}^{\dagger }}

מטריצה משוחלפת:

A

T

=

(

A

11

A

21

…

A

n1

A

12

A

22

…

A

n2

⋮

⋮

⋮

A

1n

A

2n

…

A

nn

)

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

צמד הרמיטי:

A

†

=
(

A

∗

)

T

=

(

A

11

∗

A

21

∗

…

A

n1

∗

A

12

∗

A

22

∗

…

A

n2

∗

⋮

⋮

⋮

A

1n

∗

A

2n

∗

…

A

nn

∗

)

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

מטריצת יחידה:

I
=

(

1
0
…
0

0
1
…
0

⋮
⋮
⋮
⋮

0
0
…
1

)

=

∑

|

ϕ

n

⟩
⟨

ϕ

n

|

{\displaystyle I={\begin{pmatrix}1&0&\ldots &0\\0&1&\ldots &0\\\vdots &\vdots &\vdots &\vdots \\0&0&\ldots &1\end{pmatrix}}=\sum |\phi _{n}\rangle \langle \phi _{n}|}

כפל מטריצות:

C
=
A
⋅
B
⇒

C

m
n

=

∑

A

m
i

B

i
n

{\displaystyle C=A\cdot B\Rightarrow C_{mn}=\sum A_{mi}B_{in}}

כפל מטריצות הוא לא חילופי:

A
B
≠
B
A

{\displaystyle AB\neq BA}

יחס חילוף בין מטריצות:

[
A
,
B
]
=
A
B
−
B
A

{\displaystyle [A,B]=AB-BA}

מטריצה ההופכית:

A

A

−
1

=

A

−
1

A
=
I

{\displaystyle AA^{-1}=A^{-1}A=I}

מטריצה אוניטרית:

U

†

=

U

−
1

{\displaystyle U^{\dagger }=U^{-1}}

זהויות:

(
A
B

)

†

=

B

†

A

†

;

(
A
B

)

−
1

=

B

−
1

A

−
1

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

(

A

†

)

†

=
A
;
(
⟨

ψ

1

|

A

†

|

ψ

2

⟩

)

∗

=
⟨

ψ

2

|

A
|

ψ

1

⟩

{\displaystyle (A^{\dagger })^{\dagger }=A;\;(\langle \psi _{1}|{\hat {A}}^{\dagger }|\psi _{2}\rangle)^{*}=\langle \psi _{2}|{\hat {A}}|\psi _{1}\rangle }

(
A
B

)

T

=

B

T

A

T

;
⟨

ψ

1

|

A
|

ψ

2

⟩
=
⟨

A

†

ψ

1

|

ψ

2

⟩

{\displaystyle (AB)^{T}=B^{T}A^{T};\;\langle \psi _{1}|A\psi _{2}\rangle =\langle {\hat {A}}^{\dagger }\psi _{1}|\psi _{2}\rangle }

- **הגודל** של עי"ע של אופרטור אוניטרי הוא תמיד 1.
אופרטורים הרמיטים ואוניטרים הם אופרטורים נורמליים, כלומר:

[
A
,

A

†

]
=
0

{\displaystyle [A,A^{\dagger }]=0}

.

פונקציות של אופרטורים והפרופגטור GOOL
אם f(x) = ∑_n α_n xⁿ אז ניתן להגדיר

f
(

A
^

)
=

∑

n

α

n

A
^

n

{\displaystyle f({\hat {A}}=\sum _{n}\alpha _{n}{\hat {A}}^{n}}

אם ורק אם *A* אלכסונית ו-*a_i* הם הע"ע שלה
כלומר אם

A
^

=

(

a

1

0
0
0

0

a

2

0
0

0
0
.
0

0
0
0
.
0

)

{\displaystyle {\hat {A}}={\begin{pmatrix}a_{1}&0&0&0\\0&a_{2}&0&0\\0&0&.&0\\0&0&0&.\end{pmatrix}}

אז:

זהויות:
אם

[
A
^
,
B
^
]
=
0

{\displaystyle [{\hat {A}},{\hat {B}}]=0}

 אז

f
(

A
^

)

B
^

=

B
^

f
(

A
^

)

{\displaystyle {\hat {f}}({\hat {A}}){\hat {B}}={\hat {B}}f({\hat {A}})}

אם

[
A
^
,
B
^
]
=
c
I

{\displaystyle [{\hat {A}},{\hat {B}}]=cI}

 כאשר I היא מטריצת יחידה ו- c קבוע. אז

f
(

A
^

)

,
f
(

B
^

)

=
c

d
f
(
B
^
)

d
x

{\displaystyle [{\hat {A}},f({\hat {B}})]=c{\frac {df(B)}{dx}}}

אם f(x) ממשית (ואנליטית, כלומר ניתן לפתח אותה לטור) אז

f
^

(

A
^

)

=
f
(

A
^

)

{\displaystyle {\hat {f}}({\hat {A}})=f({\hat {A}})}

הפרופגטור:

|
Ψ
(
t
)
>
=
U
^

(
t
)
|
Ψ
(
0
)
>

{\displaystyle |\Psi (t)>={\hat {U}}(t)|\Psi (0)>}

U
^

(
t
)
=

∑

e

−

i

E

n

t
ℏ

|

E

n

⟩
<
<

E

n

|

=

e

−

i

ℏ

t

{\displaystyle {\hat {U}}(t)=\sum e^{-i{\frac {E_{n}}{\hbar }}t}|E_{n}\rangle <<E_{n}|=e^{-i{\frac {\hbar }{t}}}t}

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

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

a
^

|

ψ

n

⟩
=

n

|

ψ

n
−
1

⟩
;

a
^

=

(

m
ω

2
ℏ

)

1
2

(
x
^
+

i
m
ω

ℏ

p
^
)

{\displaystyle {\hat {a}}|\psi _{n}\rangle ={\sqrt {n}}|\psi _{n-1}\rangle \ ;\ \ {\hat {a}}={\bigg ({\frac {m\omega }{2\hbar }}\bigg)^{\frac {1}{2}}}\left ({\hat {x}}+{\frac {i}{m\omega }}{\hat {p}}\right)}

אופרטור ההעלאה (או יצירה):

a
^

†

=

(

m
ω

2
ℏ

)

1
2

(
x
^
−

i
m
ω

ℏ

p
^
)

{\displaystyle {\hat {a}}^{\dagger }={\bigg ({\frac {m\omega }{2\hbar }}\bigg)^{\frac {1}{2}}}\left ({\hat {x}}-{\frac {i}{m\omega }}{\hat {p}}\right)}

a
^

†

|

ψ

n

⟩
=

n
+
1

|

ψ

n
+
1

⟩

{\displaystyle {\hat {a}}^{\dagger }|\psi _{n}\rangle ={\sqrt {n+1}}|\psi _{n+1}\rangle }

H
^

=
ℏ
ω
(

a
^

†

a
^

+

1
2

)
=
ℏ
ω
(

a
^

a
^

†

−

1
2

)

{\displaystyle {\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)}

[

a
^

,

a
^

†

]
=
1
;

E

n

=
ℏ
ω
(
n
+

1
2

)

n
=
0,1,2...

{\displaystyle [{\hat {a}},{\hat {a}}^{\dagger }]=1\ ;\ E_{n}=\hbar \omega \left (n+{\frac {1}{2}}\right)\ n=0,1,2...\,}

ψ

0

(
x
)
=

(

m
ω

2
ℏ

)

1
4

e

−

m
ω

2
ℏ

x

2

π
ℏ

{\displaystyle \psi _{0}(x)={\bigg ({\frac {m\omega }{2\hbar }}\bigg)^{\frac {1}{4}}}e^{-{\frac {m\omega }{2\hbar }}x^{2}}{\sqrt {\pi \hbar }}}

ψ

n

=

1

n
!

(

a
^

†

)

n

ψ

0

=

(

m
ω

2
ℏ

)

1
4

1

2

n

n
!

e

−

m
ω

2
ℏ

x

2

H

n

[

(

m
ω

2
ℏ

)

1
2

x

]

{\displaystyle \psi _{n}={\frac {1}{\sqrt {n!}}}{\bigg ({\hat {a}}^{\dagger })^{n}}\psi _{0}={\bigg ({\frac {m\omega }{2\hbar }}\bigg)^{\frac {1}{4}}}{\frac {1}{\sqrt {2^{n}n!}}}e^{-{\frac {m\omega }{2\hbar }}x^{2}}H_{n}\left [{\bigg ({\frac {m\omega }{2\hbar }}\bigg)^{\frac {1}{2}}}x\right]}

H

0

(
y
)
=
1
;

H

2

(
y
)
=
−
2
(
1
−
2

y

2

)

{\displaystyle H_{0}(y)=1;\quad H_{2}(y)=-2(1-2y^{2})}

H

1

(
y
)
=
2
y
;

H

3

(
y
)
=
−
12
(
y
−

2
3

y

3

)

{\displaystyle H_{1}(y)=2y;\quad H_{3}(y)=-12\left (y-{\frac {2}{3}}y^{3}\right)}

תנ"ז מסילתי והספין: GOOL
התנייז בקואורדינטות כדוריות:

L
^

z

=
(
−
i
ℏ
)

∂

∂
ϕ

{\displaystyle {\hat {L}}_{z}=(-i\hbar){\frac {\partial }{\partial \phi }}}

L
^

x

=
−
i
ℏ
(
−
sin
⁡
ϕ

∂

∂
θ

−
cos
⁡
ϕ
cot
⁡
θ

∂

∂
ϕ

)

{\displaystyle {\hat {L}}_{x}=-i\hbar \left (-\sin \varphi {\frac {\partial }{\partial \theta }}-\cos \varphi \cot \theta {\frac {\partial }{\partial \phi }}\right)}

L
^

y

=
−
i
ℏ
(
cos
⁡
ϕ

∂

∂
θ

−
sin
⁡
ϕ
cot
⁡
θ

∂

∂
ϕ

)

{\displaystyle {\hat {L}}_{y}=-i\hbar \left (cos \varphi {\frac {\partial }{\partial \theta }}-\sin \varphi \cot \theta {\frac {\partial }{\partial \phi }}\right)}

L
^

2

=
−

ℏ

2

(

1
sin
⁡
θ

∂

∂
θ

sin
⁡
θ

∂

∂
θ

+

1

sin

2

⁡
θ

∂

∂

ϕ

2

)

{\displaystyle {\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)}

L
^

±

=

L
^

x

±
i

L
^

y

{\displaystyle {\hat {L}}_{\pm }={\hat {L}}_{x}\pm i{\hat {L}}_{y}}

L
^

+

L
^

−

=

L
^

x

2

+

L
^

y

2

+
ℏ

L
^

z

{\displaystyle {\hat {L}}_{+}{\hat {L}}_{-}={\hat {L}}_{x}^{2}+{\hat {L}}_{y}^{2}+\hbar {\hat {L}}_{z}}

L
^

−

L
^

+

=

L
^

x

2

+

L
^

y

2

−
ℏ

L
^

z

{\displaystyle {\hat {L}}_{-}{\hat {L}}_{+}={\hat {L}}_{x}^{2}+{\hat {L}}_{y}^{2}-\hbar {\hat {L}}_{z}}

יחסי החילוף של התנייז המסילתי:

[

L
^

x

,

L
^

y

]
=
i
ℏ

L
^

z

;

[

L
^

y

,

L
^

z

]
=
i
ℏ

L
^

x

{\displaystyle [{\hat {L}}_{x},{\hat {L}}_{y}]=i\hbar {\hat {L}}_{z}\ ;\ [{\hat {L}}_{y},{\hat {L}}_{z}]=i\hbar {\hat {L}}_{x}}

[

L
^

z

,

L
^

x

]
=
i
ℏ

L
^

y

;

[

L
^

+

,

L
^

−

]
=
2
ℏ

L
^

z

{\displaystyle [{\hat {L}}_{z},{\hat {L}}_{x}]=i\hbar {\hat {L}}_{y}\ ;\ [{\hat {L}}_{+},{\hat {L}}_{-}]=2\hbar {\hat {L}}_{z}}

[

L
^

z

,

L
^

±

]
=
±
ℏ

L
^

±

;

[

L
^

2

,

L
^

±

]
=
0

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

[

L
^

2

,

L
^

z

]
=
[

L
^

2

,

L
^

y

]
=
[

L
^

2

,

L
^

x

]
=
0

{\displaystyle [{\hat {L}}^{2},{\hat {L}}_{z}]=[{\hat {L}}^{2},{\hat {L}}_{y}]=[{\hat {L}}^{2},{\hat {L}}_{x}]=0}

L

±

Y

l

m

=
ℏ

√
l
(
l
+
1
)
−
m
(
m
±
1
)

Y

l

m
±
1

{\displaystyle L_{\pm }Y_{l}^{m}=\hbar {\sqrt {l(l+1)-m(m\pm 1)}}Y_{l}^{m\pm 1}}

מטריצות התנייז עבור l = 1:

L
^

x

=

ℏ

√
2

(

0
1
0

1
0
1

0
1
0

)

{\displaystyle {\hat {L}}_{x}={\frac {\hbar }{\sqrt {2}}}{\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}}\ ;\ l=1}

מטריצות התנייז עבור l = 1:

L
^

y

=

ℏ

√
2

(

0
i
0

−
i
0
i

0
−
i
0

)

{\displaystyle {\hat {L}}_{y}={\frac {\hbar }{\sqrt {2}}}{\begin{pmatrix}0&i&0\\-i&0&i\\0&-i&0\end{pmatrix}}\quad {\hat {L}}^{2}=\hbar ^{2}{\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}}

ספין - אותם יחסי חילוף כמו התנייז:

S_f = ℏ*m_s**f*
*S*²*f* = ℏ²*S*(*S* + 1)*f*
-*S* ≤ *m_s* ≤ *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:

m

s

=
±

1
2

{\displaystyle m_{s}=\pm {\frac {1}{2}}}

|

x

+

⟩
=

|

1
2

,

1
2

⟩

|
↑
⟩
;

|

x

−

⟩
=

|

1
2

,
−

1
2

⟩

≡
|
↓
⟩

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

S
^

z

=

ℏ
2

(

1
0

0
−
1

)

{\displaystyle {\hat {S}}_{z}={\frac {\hbar }{2}}{\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}}}

S
^

x

=

ℏ
2

(

0
1

1
0

)

{\displaystyle {\hat {S}}_{x}={\frac {\hbar }{2}}{\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}}}

S
^

y

=

ℏ
2

(

0
−
i

i
0

)

{\displaystyle {\hat {S}}_{y}={\frac {\hbar }{2}}{\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}}}

S
^

2

=

3
4

ℏ

2

(

1
0

0
1

)

{\displaystyle {\hat {S}}^{2}={\frac {3}{4}}\hbar ^{2}{\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}}}

S
^

±

=

S
^

x

±
i

S
^

y

{\displaystyle {\hat {S}}_{\pm }={\hat {S}}_{x}\pm i{\hat {S}}_{y}}

S
^

±

|

s
,

m

s

⟩
=
ℏ

√
s
(
s
+
1
)
−

m

s

(

m

s

±
1
)

|

s
,

m

s

±
1
⟩

{\displaystyle {\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
⟩
=
α
|

x

+

⟩
+
β
|

x

−

⟩

{\displaystyle |x\rangle =\alpha |x_{+}\rangle +\beta |x_{-}\rangle }

המ

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.