שיעור 7 : פיתוח מבנה אטום המימן באמצעות משוואת שרדינגר

<u>משוואת שרדינגר בקואורדינטות כדוריות</u>

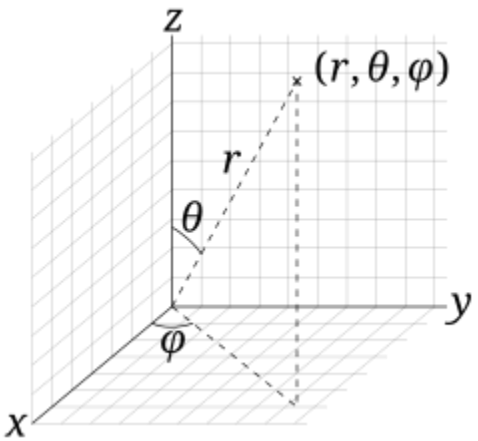
בהרבה בעיות בפיסיקה הפוטנציאל תלוי אך ורק במרחק r, לכן לבעיה קיימת סימטריה כדורית.
לדוגמא: פוטנציאל חשמלי באטום המימן:

$$U(x,y,z) = U(r) = -\frac{ke^2}{r} = -\frac{ke^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

בבעיות מסוג זה נוח במיוחד להשתמש בקואורדינטות כדוריות, המתאימות ישירות לסימטריה של המערכת. כתוצאה מן הסימטריה הכדורית,

משוואת שרדינגר בקואורדינטות כדוריות ניתנת להפרדת משתנים.

דבר המפשט באופן משמעותי את פתרון הבעיה.



<u>תזכורת קוארדינטות כדוריות:</u>

r – המרחק של הנקודה במרחב מהראשית.

θ – הזווית בין r לציר ה z.

φ – הזווית בין ההיטל של r על מישור xy לבין ציר הx.

בקואורדינטות כדוריות משוואת שרדינגר הינה (בגלל הלפלסיאן):

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(r)\big)\Psi = 0$$

נחפש פתרון מהצורה $\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$.

למה ?

1. כי אם יש פתרון כזה אז כדאי שנדע מהו והוא יותר פשוט ממצב שלא ניתן להפריד
2. בדרך כלל הכוח אצלנו תלוי רק ב r ולכן אין סיבה שתהיה תלוית בין המרחק לזווית

נציב לתוך המשוואה, נחלק את שתי צידי המשוואה ב$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$

ז"א לדוגמא : $\frac{\partial\Psi}{\partial r} = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)\frac{\partial R(r)}{\partial r}$ ואם מחלקים ב $\Psi(r,\theta,\varphi)$

מקבלים: $\frac{\Theta(\theta)\Phi(\varphi)}{R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)}\frac{\partial R(r)}{\partial r} = \frac{1}{R(r)}\frac{\partial R(r)}{\partial r}$ וכך גם לשאר

$$\frac{1}{r^2R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta\,\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta\,\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(r)\big) = 0$$

נכפיל ב $r^2\sin^2\theta$, נעביר אגפים ונקבל:

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2} = \frac{-\sin^2\theta}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) - \frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) - \frac{2m}{\hbar^2}r^2\sin^2\theta\,\big(E - V(r)\big)$$

קיבלנו צד אחד שתלוי רק בφ וצד שני תלוי רק בr, θ . לכן שני הצדדים חייבים להיות שווים לקבוע. נקרא לקבוע $-m_\ell^2$. נקבל:

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2} = -m_\ell^2$$

$$\frac{-\sin^2\theta}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) - \frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) - \frac{2m}{\hbar^2}r^2\sin^2\theta\,\big(E - V(r)\big) = -m_\ell^2$$

נחלק ב$\sin^2\theta$, נעביר אגפים ונקבל:

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}r^2\big(E - V(r)\big) = \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right)$$

קיבלנו צד אחד שתלוי רק בθ וצד שני תלוי רק בr . לכן שני הצדדים חייבים להיות שווים לקבוע. נקרא לקבוע λ .

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}r^2\big(E - V(r)\big) = \lambda \qquad (1)$$

$$\frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) = \lambda \qquad (2)$$

ממשוואה 2 : (3) $\frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\right) = 0$

וממשוואה 1: (4) $\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}r^2\left(E-V(r)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\lambda\right)=0$

נציב: $u(r)\equiv rR(r)$ ואז $R(r)\equiv\frac{u(r)}{r}$ ואז: $\frac{\partial R(r)}{\partial r}=\frac{r\frac{\partial u(r)}{\partial r}-u(r)}{r^2}$

נציב במשוואה 4 : $\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{r\frac{\partial u(r)}{\partial r}-u(r)}{r^2}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}r^2\left(E-V(r)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\lambda\right)=0$

$$\frac{r}{u(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u(r)}{\partial r}-u(r)\right)+\frac{2m}{\hbar^2}r^2\left(E-V(r)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\lambda\right)=0$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u(r)}{\partial r}-u(r)\right)=\frac{\partial r}{\partial r}\frac{\partial u(r)}{\partial r}+r\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}-\frac{\partial u(r)}{\partial r}=r\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}$$

$$\frac{r}{u(r)}r\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}r^2\left(E-V(r)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\lambda\right)=0$$

נכפיל ב $u(r)$ ונחלק ב r^2 ונקבל :

$$\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(r)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\lambda\right)u(r)=0$$

קיבלנו בסה"כ שלוש משוואות שכל אחת עבור משתנה אחד.

1. $\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(r)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\lambda\right)u(r)=0$
2. $\frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\right)=0$
3. $\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}=-m_\ell^2$

נשים לב שהמשוואות 2,3 עבור θ,φ לא משתנות מבעיה לבעיה (כל זמן שיש סימטריה כדוריות $V=V(r)$) במשוואת הללו אין תלות במסת החלקיק ולא בפוטנציאל. לכן הפתרונות שלהן הם אוניברסליים ללא תלות בבעיה.

"בבעיה עם סימטריה כדורית, אנחנו מפרידים בין 'איפה זה נמצא '(רדיוס) לבין 'איך זה נראה ')זוויות .(הראינו שהמשוואות של הזוויות הן קבועות בטבע. לכן, כל החלקיקים ביקום שנמשכים למרכז יסתדרו באותן תבניות גיאומטריות (אורביטלים), ורק המרחק שלהם מהמרכז ישתנה בהתאם למסה שלהם ולעוצמת הכוח".

נפתור משוואה משוואה :

משוואה *3* : זו המשוואה הכי קלה. היא שואלת: "איך הגל משתנה כשמסתובבים סביב הגרעין."?

הפתרון: פונקציה מחזורית כמו

$$\Phi(\varphi) = Ae^{im_\ell \varphi}$$

התוצאה פונקציית הגל Ψ מתארת את ההסתברות למצוא את האלקטרון. בנקודה מסוימת במרחב נניח בזווית $\varphi = 0$ חייב להיות ערך אחד ויחיד להסתברות.

אם נתחיל בנקודה $\varphi = 0$ ונשלים סיבוב שלם של 360 מעלות אנחנו חוזרים בדיוק לאותה נקודה פיזית במרחב .לכן, פונקציית הגל חייבת לקבל שם את אותו הערך שהיה לה בהתחלה.

התנאי המתמטי הוא $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$:

$$e^{im_\ell \varphi} = e^{im_\ell(\varphi+2\pi)}$$

נחלק את שני האגפים ב: $e^{im_\ell \varphi}$ ונקבל : $e^{i2\pi m_\ell} = 1$ הווה אומר : $2\pi m_\ell = 2\pi n$

ז"א הערך m_ℓ חייב לקבל ערכים שלמים חיובים או שליליים $m_\ell = 0, \pm1, \pm2, \ldots$

לערך זה קוראים המספר הקוונטי המגנטי

המספר m_ℓ קובע את ה**כיוון** של הסיבוב ביחס לציר מסוים (בדרך כלל ציר *z*)

קוראים לו מספר קוונטי מגנטי כי רק בנוכחות שדה מגנטי ניתן לזהות את הכיוון הזה (לא נאריך יותר)

את מקדם הקבוע ניתן לקבל מנרמול. ההסתברות לקבל את החלקיק בכל φ (ללא תלות בr, θ) צריך להיות 1:

$$\int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 = \int_0^{2\pi} \left|Ae^{im_\ell \varphi}\right|^2 d\varphi = 2\pi A^2 => A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im_\ell \varphi}$$

נעבור למשוואה 2

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\right)=0$$

כדי להתמודד עם המשוואה הזו אנחנו צריכים להיפתר מהפונקציה הטריגו'

נעשה החלפת משתנים $x=\cos\theta$. מכיוון ש θ רצה בין 0 ל π אז x ירוץ בין 1 ל -1

כמו כן ע"פ זהות: $sin^2\theta=1-\cos^2\theta=1-x^2$ כמו כן

$$\frac{\partial x}{\partial\theta}=\frac{\partial cos\theta}{\partial\theta}=-sin\theta$$

כעת נעשה משהו שדומה לנגזרת של פונקציה מורכבת אבל בעולם האופרטורים

אבל כדי שתבינו מאיפה זה בא נתחיל ללא האופרטור

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}=\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta}=\frac{\partial x}{\partial\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial x}$$

עכשיו נוריד הפונקציה Ψ כדי שזה יהפוך לאופרטור

$$\frac{\partial}{\partial\theta}=\frac{\partial x}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial x}=-sin\theta\frac{\partial}{\partial x}$$

עכשיו נציב בתוך החלק במשוואה

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\right)=0$$

$$\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}=\sin\theta\cdot\left(-sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}\right)=-sin^2\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}=-(1-x^2)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}$$

עכשיו נסתכל על כל החלק הצהוב במשוואה :

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\right)=0$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\cdot\underbrace{(-sin\theta)\frac{\partial}{\partial x}}_{\frac{\partial}{\partial\theta}}\left(-(1-x^2)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left((1-x^2)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}\right)$$

נציב במשוואה המקורית ונקבל :

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left((1-x^2)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}\right)+\left(\lambda-\frac{m_\ell^2}{1-x^2}\right)=0$$

נכפיל ב: $\Theta(\theta)$ ונקבל :

$$\frac{\partial}{\partial x}\left((1-x^2)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}\right)+\left(\lambda-\frac{m_\ell^2}{1-x^2}\right)\Theta(\theta)=0$$

בשלב הזה צריך לראות שיש לנו בעיה במכנה של $\frac{m_\ell^2}{1-x^2}$ כי שם הפתרון יכול להתפוצץ עבור $x = \pm 1$.

איך פותרים את הבעיה הזו ?

ברור שאם ייוצר מצב ש: $\left(\frac{m_\ell^2}{1-x^2}\right)\Theta(\theta)$ יוצא בקצוות אפס לחלק לאפס אז נהיה במצב טוב ולכן מחלקים את הפונקציה $\Theta(\theta)$ למכפלה של שני חלקים כאשר חלק אחד מוודא שהקטבים לא מתפוצצים כך שהחלק הזה מתאפס בקצוות ואז כאשר החלק הזה מוכפל ב $\frac{m_\ell^2}{1-x^2}$ אין פה חלוקה באפס אלא אפס לחלק לאפס וזה כבר משהו שניתן לקבל .

אז ההצעה שלנו היא לפונקציה : $\Theta(\theta) = (1-x^2)^{\frac{|m_\ell|}{2}} \cdot H(x)$

מהיכן הגיע המעריך ?

אם לא היינו לוקחים את המעריך ומשאירים רק $\Theta(\theta) = 1 - x^2$

המשוואה הדיפרנציאלית המלאה עבור $\Theta(x)$ (כאשר $x = \cos\theta$) היא:

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right] + \left(\lambda - \frac{m_\ell^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0$$

כאשר אנחנו מתקרבים מאוד לקטבים ($x \to 1$ או $x \to -1$), הביטוי $1 - x^2$ הופך להיות **שואף לאפס** (מספר קטנטן).

במצב כזה, האיבר $\frac{m_\ell^2}{1-x^2}$ הופך להיות **עצום** (שואף לאינסוף), והוא "חונק" ומעלים לחלוטין את הקבוע λ שלידו.

לכן, ממש קרוב לקטבים, המשוואה הדיפרנציאלית האסימפטוטית (המקורבת) הופכת להיות:

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} - \frac{m_\ell^2}{1-x^2}\Theta \approx 0$$

נניח שהיינו מנחשים פתרון פשוט עם חזקת 1 כפי שהצעת: $\Theta(x) = (1-x^2)^1$.
בוא נגזור אותו פעמיים כדי לראות אם הוא מסוגל לאזן את המשוואה:

נגזרת ראשונה: $\frac{d\Theta}{dx} = -2x$

נגזרת שנייה: $\frac{d^2\Theta}{dx^2} = -2$

נציב את הנגזרות האלו לתוך המשוואה האסימפטוטית (ונבדוק מה קורה כש-$x \to 1$):

$$(1-x^2)(-2) - 2x(-2x) - \frac{m_\ell^2}{1-x^2}(1-x^2) \approx 0$$

$$(-2+2x^2) + 4x^2 - m_\ell^2 \approx 0$$

כשנשאיף את $x \to 1$, נקבל:

$$0 + 4 - m_\ell^2 \approx 0 \implies m_\ell^2 = 4$$

המלכוד: הניחוש הזה יעבוד **רק** אם המספר הקוונטי המגנטי שלנו הוא בדיוק $m_\ell = \pm 2$.

נניח שהפונקציה היא : $\Theta(\theta) = (1-x^2)^\alpha$

כאשר α הוא פרמטר שנרצה למצוא.

אם נגזור את הביטוי הכללי הזה ונציב אותו חזרה למשוואה הדיפרנציאלית (תוך שמירה רק על האיברים הדומיננטיים ביותר שמתפוצצים בקצב של $\frac{1}{1-x^2}$), נקבל שהאיזון של המשוואה דורש שיתקיים הקשר הבא בין המקדמים:

$$4\alpha^2 = m_\ell^2$$

נחלץ את α על ידי הוצאת שורש משני אגפי המשוואה:

$$2\alpha = |m_\ell| \implies \alpha = \frac{|m_\ell|}{2}$$

אז ההצעה שלנו היא לפונקציה : $\Theta(\theta) = (1-x^2)^{\frac{|m_\ell|}{2}} \cdot H(x)$

בהצעה הזו כאשר מתקרבים לקטבים ז"א $x \to \pm 1$ אז $\Theta(\theta) \to 0$.

עכשיו נעבור לחלק השני $H(x)$.

נשתמש בפירוק של הפונקציה לטור חזקות סביב *x=0* .

בשיטה זו לא משנה כמה הפונקציה $H(x)$ מסובכת או מוזרה, אם היא פונקציה חלקה ורציפה, אנחנו יכולים להציג אותה בתור סכום (אינסופי פוטנציאלית) של פולינומים פשוטים.

$$H(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5 \cdots$$

ועכשיו המטרה שלנו היא למצוא את אברי הטור

איך עושים את זה ? גוזרים פעם אחת ופעמיים ואז מציבים במשוואה ואז מוצאים את המקדמים.

גזירה ראשונה : $H'(x) = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3 + 5a_5x^4 \cdots$

גזירה שנייה : $H''(x) = 2a_2 + 6a_3x + 12a_4x^2 + 20a_5x^3 \cdots$

נציב במשוואה המקורית במקום $\Theta(\theta)$ את $H(x)$ ונוכל למצוא את המקדמים

$$\frac{\partial}{\partial x}\left((1-x^2)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}\right) + \left(\lambda - \frac{m_\ell^2}{1-x^2}\right)\Theta(\theta) = 0$$

ובשלב הראשון נניח ש: $m_\ell = 0$

כמו נראה שאם מציבים את *H* אז בסוגרים הראשונים יש נגזרת של מכפלה ואז מקבלים :

$$(1-x^2)\mathrm{H}''(x) - 2x\mathrm{H}'(x) + \lambda H(x) = 0$$

$$\mathrm{H}''(x) - x^2\mathrm{H}''(x) - 2x\mathrm{H}'(x) + \lambda H(x) = 0$$

ניקח רק את האברים שכבר כתבנו וננסה להכליל מהם

$$\begin{aligned}2a_2 + 6a_3x + 12a_4x^2 + 20a_5x^3 - x^2(2a_2 + 6a_3x + 12a_4x^2 + 20a_5x^3)\\ - 2x(a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3) + \lambda(a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4)\\ = 0\end{aligned}$$

נראה מהם המקדמים של כל אחת מהחזקות של *x*

x^0 : $2a_2 + \lambda a_0$

x^1: $6a_3 - 2a_1 + \lambda a_1$

x^2: $12a_4 - 6a_2 + \lambda a_2$

נציע נוסחה הבאה למקדמים עבור x^k: $(k+2)(k+1)a_{k+2} - k(k+1)a_k + \lambda a_k$

בעצם כדי שהפולינום יהיה שווה לאפס יש לדאוג שכל חזקה של *x* תהיה שווה לאפס ולכן יש לדרוש

$$(k+2)(k+1)a_{k+2} - k(k+1)a_k + \lambda a_k = 0$$

ז"א : $a_{k+2}\frac{k(k+1)-\lambda}{(k+2)(k+1)}a_k$

מכיוון שלא יכול להיות שהמקדמים יגדלו לאינסוף כי אז הפונקציה *H* תתבדר

$$H(x) = 1 + x^2 + x^4 + x^6 + x^8 + \dots$$

מה קורה לפונקציה הזו כשאנחנו רוצים לדעת מה הערך שלה בקטבים של האטום, כלומר בנקודה $x = 1$?
בוא נציב $x = 1$:

$$H(1) = 1 + 1^2 + 1^4 + 1^6 + 1^8 + \cdots = 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + \cdots = \infty$$

אז צריך לקטוע את הטור. נעשה את זה ע"י כך שנאמר שהחל ממקום מסוים הטור מתאפס .

ז"א $k_{max}(k_{max}+1) - \lambda = 0$ ולכן אם הנקודה שבה הטור נעצר היא $k_{max} = l$

אז $\lambda = \ell(\ell+1)$

נחזור חזרה למשוואה ולפתרונות שקיבלנו :

המשוואה היתה : $\frac{\partial}{\partial x}\left((1-x^2)\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial x}\right) + \left(\lambda - \frac{m_\ell^2}{1-x^2}\right)\Theta(\theta) = 0$

והפתרון המוצע היה : $\Theta(\theta) = (1-x^2)^{\frac{|m_\ell|}{2}} \cdot H(x)$

עבור $m_\ell = 0$: $\Theta(\theta) = (1-x^2)^{\frac{|0|}{2}} \cdot H(x) = H(x)$

קיבלנו שניתן לקבל פולינומים לפי ה ℓ שנבחר.

נראה שתי דוגמאות חשובות

אם ניקח $\ell = 1$: אז : $\lambda = \ell(\ell+1) = 1(1+1) = 2$

ונקבל ש: $a_{1+2}\frac{1(1+1)-2}{(1+2)(1+1)}a_1 = 0$. ז"א יש רק את האיבר a_1 : $H(x) = a_1 x = a_1 cos\theta$

אם ניקח $\ell = 2$:ראשית נמצא $\lambda = \ell(\ell+1) = 2(2+1) = 6$

נציב $k = 0$ ואח"כ $k = 2$

$k = 0$: $a_{0+2}\frac{0(0+1)-6}{(0+2)(0+1)}a_0 = -3a_0$

נציב עכשיו $k = 2$: $a_{2+2}\frac{2(2+1)-6}{(2+2)(2+1)}a_0 = 0$

שזה מה שציפינו שעבור *k=l* תהיה קטיעה של הפולינום

אז מה הפונקציה : $H(x) = a_0 - 3a_0 cos^2\theta = a_0(1 - 3cos^2\theta)$

אלה פולינומי לג'נדר מדרגה ראשונה ושנייה

ואם היינו בוחרים $\ell = 0$

1. ערך ה-λ שלנו הוא: $\lambda = 0(0+1) = \mathbf{0}$.
2. החלק המדעך הוא: $(1-x^2)^{\frac{0}{2}} = \mathbf{1}$ (כלומר, אין דיעוך בקטבים, המדעך לא משפיע).

עכשיו נציב $\lambda = 0$ בנוסחת הנסיגה המקורית שלנו כדי לראות איך נראה הטור הזוגי ($a_1 = 0$):

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1) - 0}{(k+1)(k+2)} a_k \implies a_{k+2} = \frac{k(k+1)}{(k+1)(k+2)} a_k$$

בוא נציב את האבן הראשונה, $k = 0$:

$$a_2 = \frac{0(0+1)}{(0+1)(0+2)} a_0 = \frac{0}{2} a_0 = \mathbf{0}$$

מכיוון ש-$a_2 = 0$, אז לפי "חוק הדומינו" כל שאר המקדם הבאים בטור הזוגי ($a_4 , a_6 , a_8 \ldots$) הופכים מיד לאפס!

הטור כולו נעצר מיד אחרי האיבר הראשון, ונשארנו רק עם:

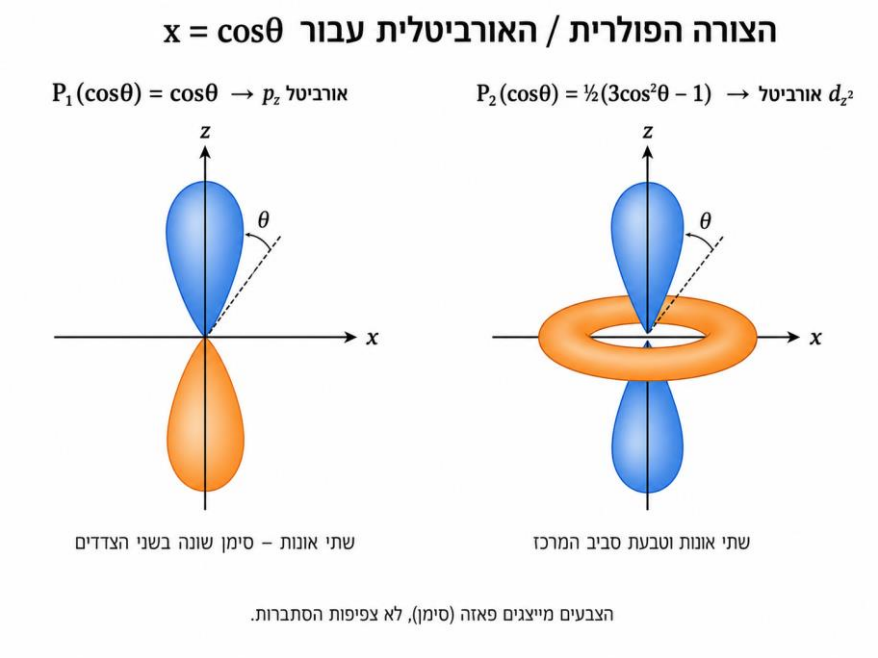
$$H(x) = a_0$$

ומה כאשר $m_\ell \neq 0$?

כאשר מפתחים את המשוואה עבור המקרה הכללי שבו המספר הקוונטי המגנטי אינו אפס ($m_\ell = 0$), פונקציית הגל בקצוות דורשת מאיתנו להגדיר מראש את הפתרון כפונקציה מהצורה $\Theta(x) = (1-x^2)^{\frac{|m_\ell|}{2}} \cdot H(x)$. בשל נוכחותו של האיבר ההתחלתי הזה, הגזירה של מכפלת הפונקציות משנה באופן מהותי את משוואת הדיפרנציאל עבור $H(x)$, וכתוצאה מכך משתנה גם נוסחת הנסיגה של המקדמים. בנוסחת הנסיגה המוכללת החדשה, הערך $|m_\ell|$ נשאר "תקוע" בתוך המונה לצד האינדקס k, כך שאיבר המונה מתאפס וקוטע את הטור אך ורק כאשר מתקיים התנאי:
$\lambda = (k + |m_\ell|)(k + |m_\ell| + 1)$. מכיוון שהקבוע הפיזיקלי מוגדר כ-$\lambda = l(l+1)$, אנו מקבלים באופן מיידי את חוק ההכללה הקוונטי: $l = k_{\max} + |m_\ell|$. מאחר שאינדקס הקטיעה $k_{\max}$ חייב להיות מספר שלם חיובי או אפס, השוויון הזה כובל ומגביל את שני המספרים הקוונטיים יחד, וקובע כי המספר הלווייני l תמיד חייב להיות גדול או שווה לערכו המוחלט של המספר המגנטי ($l \geq |m_\ell|$).

כאן לחלק שמדעיך את הפונקציה תהיה משמעות אבל יש שם עוד נגזרת פנימית שלא נעשה עכשיו .

צריך לזכור שאם $m_\ell = \pm 1$ אז יש שינוי בצורה של הפולינום – לא הראנו אבל יש גם סיבוב



2. למה המכפלה ב-$e^{i\varphi}$ מזיזה אותנו מציר Z לציר X ו-Y?

כשאנחנו נמצאים ב-$m_\ell = 0$, פונקציית הגל היא $\cos\theta$. במערכת צירים כדורית, הקשר בין הקואורדינטות הוא ש-$z = r\cos\theta$. לכן האורביטל הזה (p_z) נעול לחלוטין על ציר z.

ברגע ש-$m_\ell = 1$, הפונקציה של θ הופכת ל-$\sin\theta$, והיא מוכפלת בחלק של φ מתוך התמונה השנייה שלך:

$$\sin\theta \times e^{i\varphi} = \sin\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi) = \sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi$$

עכשיו נסתכל על הגדרת מערכת הצירים הכדורית (איך עוברים מזוויות לצירים x, y, z):

- $x = r\sin\theta\cos\varphi$
- $y = r\sin\theta\sin\varphi$

תראה איזה קסם: החלק הממשי של המכפלה ($\sin\theta\cos\varphi$) הוא בדיוק הנוסחה של **ציר** x, והחלק המדומה ($\sin\theta\sin\varphi$) הוא בדיוק הנוסחה של **ציר** y!

המכפלה ב-$e^{i\varphi}$ לקחה את פונקציית הגל, "תלשה" אותה מציר z (כי אין לנו יותר קוסינוס θ), ופרסה אותה לרוחב על מישור הרצפה (xy).

נעבור עכשיו למשוואה שעוסקת במיקום : $\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(r)-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\lambda\right)u(r)=0$

נציב את קבוע ההפרדה $\lambda=\ell(\ell+1)$**, ואת הפוטנציאל עבור אטום המימן** $V=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ **:**

$$\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\ell(\ell+1)\right)u(r)=0$$

$$\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}+\frac{2me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0 r}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)u(r)=0$$

מכיוון U **תלויה רק ב** r **נחליף את צורת הנגזרת**

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}+\frac{2me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0 r}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)u(r)=0$$

נסמן : $\rho=2\kappa r\ ,\ \ \kappa\equiv\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$

כמו כן : $\frac{du}{dr}=\frac{\mathrm{du}}{d\rho}\frac{\mathrm{d}\rho}{dr}=2\kappa\frac{\mathrm{du}}{d\rho}$

ולכן : $\frac{\mathrm{d}^2u}{dr^2}=\frac{d}{dr}\left(2\kappa\frac{\mathrm{du}}{d\rho}\right)=2\kappa\frac{d}{dr}\frac{\mathrm{du}}{d\rho}=2\kappa\frac{d}{d\rho}\frac{\mathrm{du}}{dr}=4\kappa^2\frac{d^2\mathrm{u}}{d\rho^2}$

ונציב : $4\kappa^2\frac{d^2\mathrm{u}}{d\rho^2}+\left(\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{-\kappa^2}+\frac{2me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0\frac{\rho}{2\kappa}}-\frac{\ell(\ell+1)}{\left(\frac{\rho}{2\kappa}\right)^2}\right)u(r)=0$

ונחלק ב: $4\kappa^2$: $\frac{d^2\mathrm{u}}{d\rho^2}+\left(-\frac{1}{4}+\frac{me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0\kappa}\frac{1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)u(r)=0$

נגדיר: $\rho_0=\frac{me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0\kappa}$ ונציב : $\frac{d^2\mathrm{u}}{d\rho^2}=\left(\frac{1}{4}-\frac{\rho_0}{\rho}+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)u(r)$

נחפש פתרון פיסיקאלי בקצוות ז"א לא מתבדר:

נתחיל מ $\rho=2\kappa r\to\infty$ שזה רחוק מאד מהגרעין

שם ניתן להציג את המשוואה באופן הבא $\frac{d^2\mathrm{u}}{d\rho^2}=\frac{u(\rho)}{4}$

הפתרון הוא : $u(\rho)=Ae^{-\frac{\rho}{2}}+Be^{\frac{\rho}{2}}$ כדי שהפונקציה לא תתבדר באינסוף *B=0*.

נמשיך ל $\rho=2\kappa r\to 0$ שזה קרוב מאד לגרעין

שם ניתן להציג את המשוואה באופן הבא $\frac{d^2u}{d\rho^2} = \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}u(\rho)$

ננסה פתרון מהצורה : $u(\rho) = C\rho^S$. נגזור פעמיים: $\frac{d^2u}{d\rho^2} = s(s-1)C\rho^{S-2}$

ונציב במשוואה : $s(s-1)C\rho^{S-2} = \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}C\rho^S$

$$s(s-1)C\rho^{S-2} = \ell(\ell+1)C\rho^{S-2}$$

$$s(s-1) = \ell(\ell+1)$$

1. פתיחת המשוואה וסידור איברים

נתונה לנו המשוואה:

$$s(s-1) = \ell(\ell+1)$$

נפתח את הסוגריים בשני האגפים:

$$s^2 - s = \ell^2 + \ell$$

נשווה לאפס על ידי העברת כל האיברים לאגף שמאל:

$$s^2 - s - \ell^2 - \ell = 0$$

כעת, נסדר את האיברים בצורה חכמה כדי שיהיה קל לעשות פירוק לקבוצות:

$$(s^2 - \ell^2) - (s + \ell) = 0$$

2. הפירוק האלגברי (נוסחת כפל מקוצר)

נשתמש בנוסחת הפרש ריבועים המפורסמת ($A^2 - B^2 = (A-B)(A+B)$) על הסוגריים השמאליים:

$$(s-\ell)(s+\ell) - 1 \cdot (s+\ell) = 0$$

שים לב שיש לנו עכשיו גורם משותף בולט: $(s+\ell)$. נוציא אותו מחוץ לסוגריים:

$$(s+\ell)\Big[(s-\ell) - 1\Big] = 0$$

נפשט את מה שבתוך הסוגריים המרובעים:

$$(s+\ell)(s-\ell-1)=0$$

הפתרונות הם: $s=-\ell,\ell+1$

כדי שהפתרון לא יתבדר בראשית הצירים הפתרון השלילי נפסל ונשארנו עם $s=\ell+1$

$$u(\rho)=C\rho^{\ell+1}$$

ולכן הפונקציה כולה תהיה מהצורה :

$$u(\rho)=\rho^{\ell+1}e^{-\frac{\rho}{2}}v(\rho)$$

כדי להציב במשוואה עלינו לגזור פעם ופעמים :

$$u'(\rho)=(\ell+1)\rho^{\ell}e^{-\frac{\rho}{2}}v(\rho)-\frac{1}{2}\rho^{\ell+1}e^{-\frac{\rho}{2}}v(\rho)+\rho^{\ell+1}e^{-\frac{\rho}{2}}\frac{dv}{d\rho}$$

$$=\rho^{\ell}e^{-\frac{\rho}{2}}\left[\left((\ell+1)-\frac{\rho}{2}\right)v+\rho\frac{dv}{d\rho}\right]$$

$$u''(\rho)=\rho^{\ell}e^{-\frac{\rho}{2}}\left\{\left(\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}-(\ell+1)+\frac{\rho}{4}\right)v+[2l+2-\rho]\frac{dv}{d\rho}+\rho\frac{d^2v}{d\rho^2}\right\}$$

נציב את הנגזרת השניה ואת הפונקציה המקורית לתוך המשוואה

$$\frac{d^2\mathrm{u}}{d\rho^2}=\left(\frac{1}{4}-\frac{\rho_0}{\rho}+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)u(r)$$

ונחלק ב: $\rho^{\ell}e^{-\frac{\rho}{2}}$

$$\left\{\left(\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}-(\ell+1)+\frac{\rho}{4}\right)v+[2l+2-\rho]\frac{dv}{d\rho}+\rho\frac{d^2v}{d\rho^2}\right\}-\left(\frac{1}{4}-\frac{\rho_0}{\rho}+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)\rho v=0$$

$$\left\{\left(\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}-(\ell+1)+\frac{\rho}{4}\right)v+[2l+2-\rho]\frac{dv}{d\rho}+\rho\frac{d^2v}{d\rho^2}\right\}-\left(\frac{\rho}{4}-\rho_0+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}\right)v=0$$

נארגן את מקדמי v ביחד : $\left(\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}-(\ell+1)+\frac{\rho}{4}\right)-\left(\frac{\rho}{4}-\rho_0+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}\right)=\rho_0-(\ell+1)$

$$\rho\frac{d^2v}{d\rho^2}+[2l+2-\rho]\frac{dv}{d\rho}+(\rho_0-\ell-1)v=0$$

שוב נשתמש בפיתוח לטור חזקות:

$$v(\rho) = \sum_{0}^{\infty} a_k \rho^k$$

$$\frac{dv}{d\rho} = \sum_{0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1}$$

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} = \sum_{0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2}$$

נציב במשוואה:

$$\rho \sum_{0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2} + [2l+2-\rho] \sum_{0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1} + (\rho_0 - \ell - 1) \sum_{0}^{\infty} a_k \rho^k = 0$$

בכל מקום שיש ρ מחוץ לסוגרים נכניס אותו

$$\sum_{0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-1} + \sum_{0}^{\infty} [2l+2] k a_k \rho^{k-1} - \sum_{0}^{\infty} k a_k \rho^k + (\rho_0 - \ell - 1) \sum_{0}^{\infty} a_k \rho^k = 0$$

עכשיו אנחנו תקועים עם החזקות השונות : ρ^{k-1}, ρ^k

נעשה הזזת אינדקסים : נציב $m = k - 1$ ולכן $k = m + 1$ נציב בטור הראשון :

$$\sum_{-1}^{\infty} (m+1) m a_{m+1} \rho^m$$

נציב בטור השני

$$\sum_{-1}^{\infty} [2l+2](m+1) a_{m+1} \rho^m$$

מכיוון שהאיבר $m = -1$ מתאפס בשני הטורים אז נתחיל מ $m = 0$ ואז נחליף חזרה ל k

$$\sum_{0}^{\infty} k(k+1) a_{k+1} \rho^k + \sum_{0}^{\infty} [2l+2](k+1) a_{k+1} \rho^k - \sum_{0}^{\infty} k a_k \rho^k + (\rho_0 - \ell - 1) \sum_{0}^{\infty} a_k \rho^k = 0$$

נאחד את כל הטורים תחת ρ^k :

$$\sum_{0}^{\infty} \{[k(k+1) + (2l+2)(k+1)] a_{k+1} + (\rho_0 - \ell - 1 - k) a_k\} \rho^k = 0$$

$$\sum_{0}^{\infty}\{[(2l+2+k)(k+1)]a_{k+1}+(\rho_0-\ell-1-k)a_k\}\rho^k=0$$

כדי שהפולינום יתאפס צריך שהמקדם של החזקה יתאפס לכל ערך של k .

$$[(2l+2+k)(k+1)]a_{k+1}+(\rho_0-\ell-1-k)a_k=0$$

וכך מתקבלת נוסחת הנסיגה

$$a_{k+1}=\frac{-(\rho_0-\ell-1-k)}{(2l+2+k)(k+1)}a_k=\frac{\ell+1+k-\rho_0}{(2l+2+k)(k+1)}a_k$$

כעת נבדוק מה קורה כאשר K שואף לאינסוף ?

אנחנו רוצים לוודא שהסדרה מתכנסת ולא מתבדרת

עבור k שואף לאינסוף זו נוסחת נסיגה שמתנהגת כמו

$$a_{k+1}=\frac{k}{k^2}a_k=\frac{1}{k}a_k$$

ז"א המקדם שואף לאפס אבל מה קורה לסדרה ?

$$\upsilon(\rho)=\sum_{0}^{\infty}a_k\rho^k$$

קל להראות שעבור k שואף לאינסוף האקספוננט מבדר את הטור ולכן למרות שהמקדם מתכנס וקטן עדין הטור מתבדר

מכיוון שהטור עוסק בהסתברות למצוא אלקטרון במקום אז זה בלתי אפשרי כי יצא שההסתברות למצוא אלקטרון מאד רחוק מהגרעין תהיה אינסופית ולכן חייבים לקטוע את הטור .

נסמן את האיבר האחרון בטור שאחריו כל המקדמים שווים לאפס כ: k_{max}

$$\ell+1+k_{max}-\rho_0=0$$

$$\rho_0=k_{max}+\ell+1$$

מכיוון שלפי מה שעשינו בעבר ℓ הוא מספר שלם לא שלילי וכן k_{max}

נגדיר: $n\equiv k_{max}+\ell+1$

n : הוא מספר שלם חיובי , וכן מכיוון ש: $k_{max}\geq 0$ אז : $n\geq\ell+1$

ועכשיו נישאר לסכם : $\rho_0=n$ וכן בתחילת הדרך הגדרנו ש: $\rho_0=\frac{me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0\kappa}$ וכן $\kappa\equiv\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$n=\frac{me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0\kappa}$$

$$n^2 = \left(\frac{me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0\kappa}\right)^2 = \left(\frac{me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2mE}\right)$$

$$E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

נמשיך לצורה של פונקציית הגל R

קודם מצאנו שנוסחת הנסיגה היא

$$a_{k+1} = \frac{\ell + 1 + k - n}{(2l + 2 + k)(k + 1)} a_k$$

לא נסביר מדוע אבל המקדמים הללו משויכים למשפחות פולינומי לגר המצומדים

$$\upsilon(\rho) = \sum_0^\infty a_k \rho^k = L_{n+l}^{2l+1}$$

הזיהוי הזה מאפשר לנו שלא להמשיך לעבוד עליהם אלא להשתמש בפתרונות שכבר מצאו עבורינו אבל לא נאריך בזה .

נחזור ל: κ . קודם קיבלנו ש: $n = \frac{me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0\kappa}$

ולכן יוצא ש: $\kappa = \frac{me^2}{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{n}$ ואם בודקים את ערכי הקבועים מקבלים ש: $\kappa = \frac{1}{a_0 n}$

$$a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10} m$$

והרי $\rho = 2\kappa r$ לכן : $\rho = \frac{2r}{a_0 n}$

נרכיב עכשיו את פונקציית העזר

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\frac{\rho}{2}} \upsilon(\rho) \to u(r) = \left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^{\ell+1} \cdot e^{-\frac{r}{a_0 n}} \cdot L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right)$$

ועכשיו נחזור לפונקציה המקורית : $u(r) \equiv rR(r)$

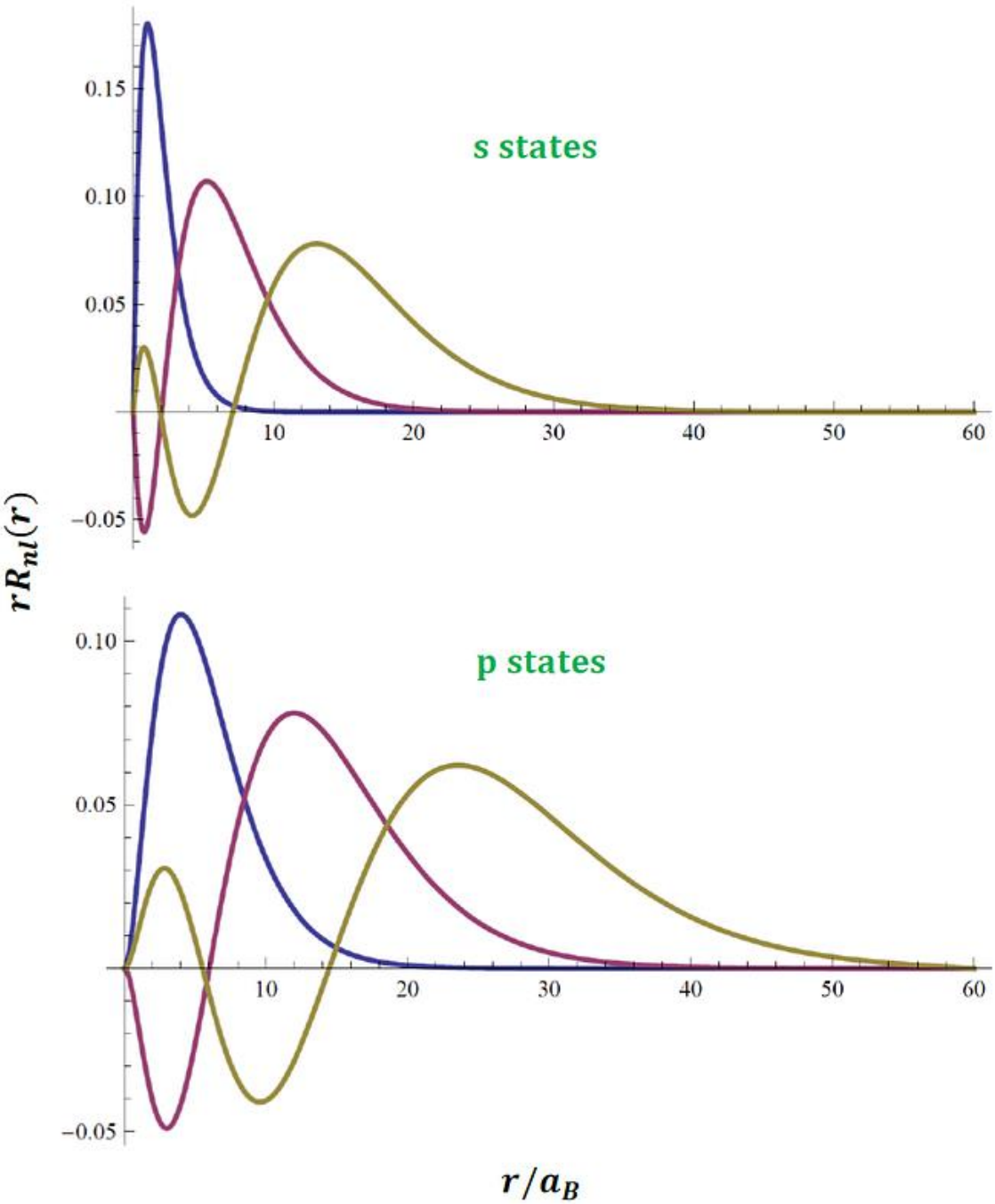
$$R_{n,l}(r) = \frac{u(r)}{r} = \left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^{\ell} \cdot e^{-\frac{r}{a_0 n}} \cdot L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right)$$

נוסיף קבוע נירמול כי $\int_0^\infty \left|R_{n,l}(r)\right|^2 r^2 dr = 1$

ולסיכום :

$$R_{n,l}(r) = N_{n,l}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^{\ell} \cdot e^{-\frac{r}{a_0 n}} \cdot L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right)$$

Radial Wavefunctions Plots: $r\,R_{nl}(r)$



א. החלק הרדיאלי: $R_{n,\ell}(r)$

מתאר את ההתנהגות של האלקטרון ככל שמתרחקים מהגרעין:

$$R_{n,\ell}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]}} \cdot \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{\ell} \cdot e^{-\frac{r}{na_0}} \cdot L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

כאשר $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ הוא רדיוס בוהר, ו-$L_{n+\ell}^{2\ell+1}$ הוא פולינום לאגר המצומד.

ב. החלק הזוויתי (ההרמוניות הכדוריות): $Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi)$

מתאר את ההסתברות המרחבית ואת הצורה הגיאומטרית של האורביטל:

$$Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \cdot P_{\ell}^{m}(\cos\theta) \cdot e^{im\phi}$$

כאשר P_{ℓ}^{m} הוא פולינום לז'נדר המצומד (שנובע ממשוואה *2* בתמונה הראשונה שלך).

עכשיו נמשיך לתנע הזויתי

האנרגיה הכוללת של האלקטרון שנע סביב הגרעין מורכבת משלשה חלקים:

1. אנרגיה פוטנציאלית
2. אנרגיה קינטית בגלל הסיבוב רחוק מהגרעין
3. אנרגיה קינטית שנובעת מהיכולת להתקרב לגרעין (שייך רק בקוונטים ולא במודל בוהר)

$$E = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$$

כשהתחלנו לדבר על משוואת שרדינגר באטום המימן כתבנו: $\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi$

שזה אומר שאופרטור האנרגיה הוא : $\hat{E} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$ נהוג לקרוא לאופקטור הזה המילטוניאן

ולסמנו ב H : $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$

כאשר עובדים במערכת כדורית הלפלסיאן שווה ל:

$$\nabla^2 = \underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{\text{Radial Part}} + \underbrace{\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]}_{\text{Angular Part}}$$

אם נציב את הפיצול הזה לתוך אופרטור ההמילטוניאן $\hat{H}$, נקבל:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right] - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] + V(r)$$

ניזכר במה שכתבנו קודם על האנרגיה

$$E = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$$

ונוכל להגדיר את אופרטור התנע הזוויתי :

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

והרי בתחילת השיעור אמרנו ש:

$$\frac{1}{\Theta(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\right) = 0$$

נכפיל את כל המשוואה ב: $-\hbar^2\Theta(\theta)$ ונפתח סוגריים :

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) - \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)\right] = \lambda\hbar^2\Theta(\theta)$$

ז"א : $\hat{L}^2\Theta(\theta) = \lambda\hbar^2\Theta(\theta)$

מכאן יוצא שהערך העצמי של $\hat{L}^2$ הוא $\lambda\hbar^2$ והרי $\lambda = l(l+1)$

ומכאן ש: $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

כעת נדבר על אופרטור התנע הזויתי סביב ציר *Z*

תנע קווי קשור לנגזרת לפי המקום באופן הבא $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

ובהתאם ניתן לצפות שתנע זוויתי יהיה בצורה דומה

וכאשר מדובר על תנע זויתי סביב ציר *Z* ז"א במישור *Y-X* אז התנע יהיה ביחס לזווית $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$

אם עכשיו נפעיל את האופרטור הזה על הפונקציה נקבל את התנע הזויתי על ציר *Z*

$$\hat{L}_z\,\Phi(\phi) = L_z\,\Phi(\phi) \implies -i\hbar\frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} = L_z\,\Phi(\phi)$$

כבר ראינו שהפתרון של משוואה זו הוא :

$$\Phi(\phi) = Ae^{i\frac{L_z}{\hbar}\phi}$$

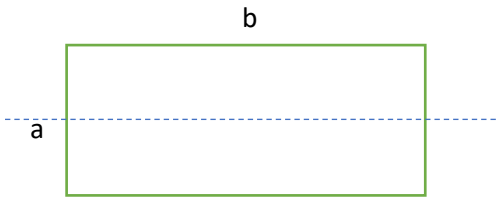
הפעלת תנאי השפה המחזורי של המרחב ($\Phi(\phi+2\pi) = \Phi(\phi)$) מובילה לדרישה:

$$e^{i\frac{L_z}{\hbar}2\pi} = 1 \implies \frac{L_z}{\hbar} = m \implies L_z = m\hbar \quad (m = 0, \pm1, \pm2, \ldots)$$

וכן יש לסכם ש:

$$\hat{L}_z^2 = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

אפקט זימן



נניח שיש לולאת זרם הנראית כמו מלבן הנמצאת בתוך שדה מגנטי

הלולאה נמצאת במישור *Y-X* וחופשיה לנוע סבב ציר *X*

הלולאה נמצאת בתוך שדה מגנטי המכוון בכיוון *Z*

השדה המגנטי מפעיל כוחות על הצלעות באורך *b* המקבילות לציר הסיבוב והכוח שווה ל: $F = IbB$

מכיוון שהכוח מסובב את המסגרת ניתן לייחס לכוח הזה מומנט כוח סביב הציר

$$\tau = r \times F = 2 \cdot \frac{a}{2} IbBsin\theta = IABsin\theta = \mu \times B$$

כאשר $\vec{\mu} = I\vec{A}$

כמו כן $\mu = IA = \frac{-e}{T} \cdot \pi r^2 = \frac{-ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{-evr}{2}$ כאשר $T = \frac{v}{2\pi r}$

נחליף את vr ב$\frac{L}{m_e}$ כאשר L הוא התנע הזוויתי האורביטלי של האלקטרון אזי: $\vec{\mu} = \frac{-e\vec{L}}{2m_e}$

במכניקה ניתן להגדיר עבודה עבור תנועה סיבובית $dW = \tau \cdot d\theta = -\mu Bsin\theta d\theta$

נגדיר דיפול מגנטי שמכוון בניצב לכיוון השדה המגנטי ושם אנרגיה הפוט' שווה אפס אז :

$$W = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\theta} -\mu Bsin\theta d\theta = \mu Bcos\theta \Big|_{\frac{\pi}{2}}^{\theta} = \mu Bcos\theta$$

והרי $W = -\Delta U$ לכן $\Delta U = -\mu Bcos\theta = -\mu \cdot B$

$$\mu = IA = \frac{e}{T} \cdot \pi r^2 = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{evr}{2}$$

כאשר $T = \frac{v}{2\pi r}$ זהו זמן מחזור הסיבוב (קלאסי) של האלקטרון סביב הגרעין, v היא מהירות הסיבוב של האלקטרון וr זהו רדיוס המסלול של האלקטרון.

נחליף את vr ב$\frac{L}{m_e}$ כאשר L הוא התנע הזוויתי האורביטלי של האלקטרון אזי: $\vec{\mu} = \frac{e\vec{L}}{2m_e}$

$$\vec{\mu} = \frac{e\vec{L}}{2m_e} = \frac{e}{2m_e}\left(L_x, L_y, L_z\right)$$

$$\Delta U = -\mu \cdot B = \frac{e}{2m_e}\left(L_x, L_y, L_z\right) \cdot \left(B_x, B_y, B_z\right)$$

ואם נכוון את השדה לאורך ציר אחד ציר *Z*

$$\Delta U = -\mu \cdot B = -\frac{e}{2m_e}\left(L_x, L_y, L_z\right) \cdot (0,0,B_z) = -\frac{eL_zB_z}{2m_e} = -\mu_z B_z$$

והרי קיבלנו קודם ש: $L_z = m\hbar$ אז אם נגדיר $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$

אז $\Delta U = -\frac{em\hbar B_z}{2m_e} = -\mu_B m B_z$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 5.788 \cdot 10^{-5}\,\frac{eV}{T}$ המגנטון של בוהר .

כאשר שמים לולאת זרם כזו בשדה מגנטי $\vec{B}$, השדה המגנטי מפעיל מומנט סיבוב על הדיפול.

$$E = E_0 - \frac{e}{2m_e}BL_z = E_0 - \frac{e\hbar}{2m_e}Bm_\ell$$

וצריך לזכור ש: m_ℓ יכול לקבל 1,3,5 עורכים וכן הלאה בהתאם לאורביטל

אז מה קורה ?

אם האלקטרון נמצא ברמה הראשונה אז *m=0* ולכן שדה מגנטי לא ישפיע עליו

אם האלקטרון נמצא ברמה 2 אז עבור *l=1* ללא שדהמגנטי האלקטרונים מסתובבים איך שבה להם במרחס ללא ציר מועדף . אבל אם מופעל שדה לדוגמא בכיוון *Z* אז יהיו שלשה כיוונים שהדיפול יתארגן ביחס אליהם כאשר *m=0,1,-1*

חשוב לציין שכיוונים אלה לא מתלכדים עם ציר Z

1. ההסבר המתמטי (מתוך המשוואות שלך)

נחזור לרגע להוכחה שפתרת קודם. ראינו שני דברים:

1 גודל וקטור התנע הזוויתי הכולל הוא: $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$

2 ההיטל המקסימלי שלו על ציר z (עבור $m = \ell$) הוא: $L_z = \ell\hbar$

בוא נשווה ביניהם עבור רמת האנרגיה שדיברנו עליה ($\ell = 1$):

אורך הווקטור הכולל: $L = \sqrt{1(1+1)}\,\hbar = \sqrt{2}\,\hbar \approx 1.41\hbar$

ההיטל המקסימלי על ציר z: $L_z = 1\hbar$

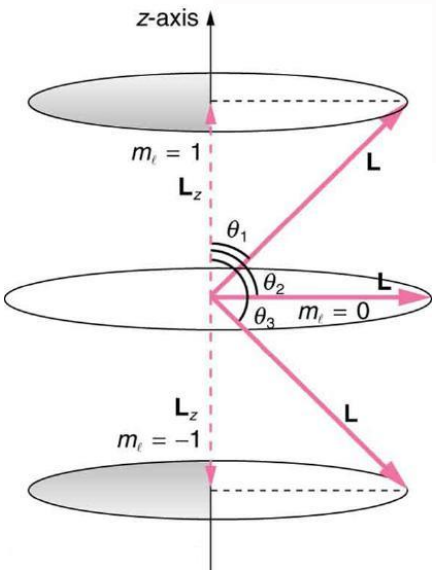
שים לב למלכוד: **ההיטל ($1\hbar$) קטן מהאורך הכולל של וקטור ($1.41\hbar$)**! כדי שווקטור יצביע **בדיוק** לאורך ציר z, ההיטל שלו על הציר חייב להיות שווה לאורך המלא שלו (כמו שווקטור באורך 5 יצביע בדיוק על ציר z רק אם הרכיב שלו הוא $z = 5$). מכיוון ש-$\ell\hbar$ תמיד קטן מ-$\sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$, הווקטור לעולם לא יכול להתיישר לחלוטין עם הציר.

2. הזווית המינימלית במרחב

אנחנו יכולים אפילו לחשב במדויק את הזווית הכי קרובה לציר z שהאלקטרון יכול להגיע אליה. לפי טריגונומטריה פשוטה:

$$\cos\theta_{min} = \frac{L_z}{L} = \frac{\ell\hbar}{\sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

הזווית שנותנת קוסינוס של $\frac{1}{\sqrt{2}}$ היא **בדיוק 45 מעלות**.



במצב זה ניתן לראות שעבור אותה רמת אנרגיה יש פיצול שניתן לראות אותו בניתוח ספקטרוקופי

ניסוי סטרן גרלך

מה ייקרה אם ניקח אלומת אטומי מימן שמכוונת בכיוון אחד ונקרין אותם על לוח שיכול לתעד את הפגיעות שלהם . לכאורה יהיה כתם אחד כי אין להם סיבה לסטות .

אם ניקח אלומה כזו ונכניס אותה לשדה מגנטי ונדאג שכולם יהיו ברמת היסוד ז"א *m=0* . לכאורה יהיה עדיין כתם אחד כי אין דיפול מגנטי .

אז סטרן וגרלך עשו עוד משהו הם יצרו שדה מגנטי לא אחיד ועדיין האטומים ברמת היסוד.

$$U = -\mu \cdot B \approx -\mu_z B_z$$

בפיזיקה, כוח (F) מוגדר כמינוס הגרדיאנט (הנגזרת המרחבית) של האנרגיה הפוטנציאלית:

$$F_z = -\frac{\partial U}{\partial z}$$

נציב את האנרגיה הפוטנציאלית המגנטית לתוך הגדרת הכוח:

$$F_z = -\frac{\partial}{\partial z}(-\mu_z B_z)$$

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

לכאורה יש שתי אפשרויות

1. ציפיה קלאסית כל האלקטרונים מתסובבים באטומים בכיוונים שונים ולכן יהיה רצף של דיפולים מגנטים ולכן השדה יפעיל כוח שונה על כל דיפול לפי הזווית ולכן יהיה פס מרוח
2. ציפיה קוונטית : מומנט מגנטי נוצר רק כאשר *l>0* ולכן נצפה לכתם אחד כמו קודם

בפועל הם ראו שתי כתמים אחד למעלה ואחד למטה וכלום לא היה במרכז

ספין – ניסוי סטרן גרלך (S.G)

עד כה ראינו שהאלקטרון נע סביב הגרעין ולכן יש לו דיפול מגנטי

אבל הניסוי הבא הראה שהאלקטרון גם סובב סביב עצמו – ספין

כאשר מומנט דיפול מגנטי נמצא בשדה מגנטי לא אחיד פועל עליו כוח קווי. כאשר השדה המגנטי הינו בכיוון ציר z והוא משתנה לאורך ציר z אזי:

$$F_z = \vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{B}}{dz} = \mu_z \frac{dB}{dz}$$

עבור האלקטרון באטום נקבל:

$$F_z = \frac{-eL_z}{2m_e}\frac{dB}{dz}$$

קלאסית L_z יכול לקבל כל ערך בין $-L$ ל$+L$ (היטל של L על ציר z).

לכן אם שולחים אלומת חלקיקים דרך שדה מגנטי כזה, לאחר השדה החלקיקים יתפזרו כל אחד לפי הזווית בין כיוון המומנט המגנטי שלו לציר z ולכן נקבל אזור רציף של חלקיקים על המסך.

לעומת זאת, לפי ההסבר הקוונטי L_z מקוונטט: $L_z = m_\ell \hbar$. ולכן נראה רק מס' כתמים בודדים על המסך. אולם עבור $m_\ell = 0$ אנחנו מצפים שיהיה כתם אחד בלבד

הניסוי בוצע ונראו על המסך 2 כתמים בלבד. כלומר היו לאלקטרונים באטומים שתי אפשריות עבור L_z.

הספין:

לאלקטרון (וכן גם לחלקיקים אחרים) יש תנע זוויתי פנימי הנקרא ספין $\vec{S}$.

התנע הזוויתי הכולל הינו: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

גם הספין הזה שנובע מאותה משוואה דיפרציאלית אמור להיות מהצורה $\ell(\ell+1)$

ומכיוון שראינו שיש מצב שבו יש שני מצבים אז במקרה הזה $s(s+1)$.

קודם היו לנו 1,3,5 מצבים שמתאימים למשוואה $2\ell+1$ ולכן הספין של האלקטרון מתאים למשוואה $2s+1=2$ ז"א למס' קוונטי $s=\frac{1}{2}$

רכיב הספין בכיוון ציר z יכול לקבל שני ערכים $m_s = \pm\frac{1}{2}$.

כלומר גודל הספין של אלקטרון הינו: $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$

היטל הספין על ציר מוגדר הינו: $S_z = m_s\hbar = \pm\frac{\hbar}{2}$ (נקרא ספין חצי).

לכן בניסוי $S.G$ התקבלו 2 כתמים על המסך.

חלקיקים עם ספין חצי נקראים פרמיונים (לדוגמא אלקטרונים $s = \frac{1}{2}$)

<u>המשמעות הפיזיקלית של התוצאות</u>

ראשית, קיבלנו שהאנרגיה מקוונטטת - E תלויה רק ב- n והערכים תואמים לערכי האנרגיה של בוהר.

פונ' הגל Ψ תלויה ב3 המספרים הקוונטים n, ℓ, m , ורושמים אותה $\Psi_{n\ell m}$

כיוון שעבור n מסוים, ℓ ו m מקבלים מספר ערכים אפשריים הרי זה אומר שיש ניוון - האלקטרון יכול לשבת בכמה פונקציות גל באותה אנרגיה.

- **השלב הראשון (n):** אתה בוחר את רמת האנרגיה הראשית ($n = 1, 2, 3, \ldots$).
- **השלב השני (ℓ):** לפי ה-n שבחרת, נקבעים ערכי ה-ℓ המותרים (מאפס ועד $n - 1$).
- **השלב השלישי (m_ℓ):** לפי ה-ℓ שבחרת, נקבעים ערכי ה- m_ℓ המותרים (מ-$-\ell$ ועד $+\ell$).
- **השלב הרביעי (m_s):** ללא תלות באף מספר מעליו, לכל מצב קוונטי יש תמיד בדיוק שתי אפשרויות לספין ($+1/2$ או $-1/2$).

דרגת הניוון תלויה בערך של n למשל אם $n = 1$ אז $\ell, m = 0$, ולכן יש רק מצב 1 - Ψ_{100}

אך אם $n = 2$ הרי שאפשרי $\ell, m = 0$, וכן אפשרי $m = -1,0,1$ $\ell = 1$

ולכן עבור $n = 2$ יש ניוון 4 - Ψ_{200} $\Psi_{2,1,-1}$ Ψ_{210} Ψ_{211}

מצבים עם $\ell = 0$ מסומנים s

מצבים עם $\ell = 1$ מסומנים p

מצבים עם $\ell = 2$ מסומנים d

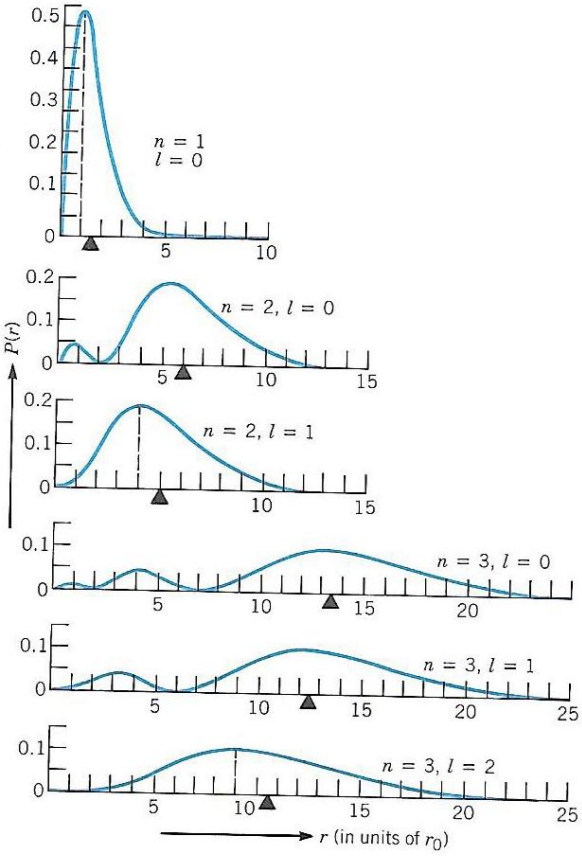
מצבים עם $\ell = 3$ מסומנים f

המספר ℓ - מספר זה נקרא המספר הקוונטי האורביטלי כי ℓ מייצג את הערך של התנע הזוויתי $\vec{\ell}$ של האטום.

המספר m_ℓ - ההיטל של התנע הזוויתי על ציר z מקיים $\ell_z = m_\ell\hbar$, כלומר ההיטל מקוונטט – יכול לקבל רק ערכים בדידים. ערכי m_ℓ האפשריים נותנים את ההיטלים האפשריים, וזאת בניגוד לפיסיקה הקלאסית, שבה ההיטל יכול לקבל כל ערך המקיים $\ell \le \ell_z \le \ell$.

תכונות של פונ' הגל האטומית

רואים ש $p(r)$ משתנה עם r – המרחק מהגרעין, ומקבלת מקסימום ב r כלשהו התלוי בפונקצית הגל.



ציר ה - x הוא ביחידות של r_0 - הרדיוס של האורביטל הנמוך ביותר של מודל בוהר.

נשים לב שלאלקטרון ברמה $n = 1$ יש ממוצע r של בערך r_0

לאלקטרון ברמה $n = 2$ יש ממוצע r של בערך $5r_0$ וכו'.

כלומר לאלקטרונים ברמה $n = 2$ יש הסתברות גבוהה יותר להמצא מחוץ לאזור שבו יימצא האלקטרון ב $n = 1$.

וכן אלקטרון ברמה $n = 3$ יימצא באופן הסתברותי מחוץ לאזור בו יימצאו האלקטרונים של רמה $n = 2$ ו $n = 1$

אך לאלקטרון ברמה $n = 2$ באורביטל $\ell = 0$ יש הסתברות קטנה להיות בתוך האיזור שבו מצוי אלקטרון ברמה $n = 1$. כלומר להיות קרוב לגרעין.

דבר זה נכון פחות עבור האורביטל $\ell = 1$ באותה רמה $n = 2$

כנ"ל לגבי 3 המצבים ב $n = 3$:

לאלקטרון ב $n = 3$ $\ell = 0$ יש סיכוי קטן להיות בתוך איזור שבו נמצאים האלקטרונים של $n = 2$ ו $\ell = 1$.

לאלקטרון ב $n = 3$ $\ell = 1$ יש סיכוי להיות באזור שבו $n = 2$ אך לא בזה של $n = 1$.

לאלקטרון ב $n = 3$ $\ell = 2$ אין את התכונה הזאת.

המסקנות הן שעבור n מסוים לאלקטרונים עם תנע זוויתי ℓ נמוך יש יותר סיכוי להיות יותר קרוב לגרעין מאשר לאלקטרון עם ℓ גבוה יותר.

במקרה של אטום המימן לדבר הנ"ל אין חשיבות כי לכל ה - ℓ אותה אנרגיה - יש ניוון.

אך במקרה של אטומים מרובי אלקטרונים יש לדבר הנ"ל חשיבות מרובה כי זה יסביר מדוע למצבים באותה רמה n , המצויים באורביטלות שונות (ℓ שונה) יש אנרגיות שונות. נראה את החשיבות של זה לעניין הטבלה המחזורית בהמשך.

הטבלה המחזורית

עקרון האיסור של פאולי

רמת האנרגיה הנמוכה ביותר נקראת רמת היסוד. עבור אטום המימן רמה זו מאופיינת ע"י הפונקציה שיש לה את המספרים הקוונטיים $n = 1,\ \ell = 0\ ,m_\ell = 0\ ,\ m_s = \pm\frac{1}{2}$

באטומים מרובי אלקטרונים לא כל האלקטרונים יושבים ברמת היסוד. עקרון האיסור של פאולי אומר ש- 2 אלקטרונים לא יכולים לשבת באותו מצב קוונטי (המאופיין ע"י אותם מס' קוונטים).

התכונות של היסודות השונים הן מחזוריות. כך למשל ל - H (מימן), Li (ליתיום), Na (נתרן) וכו' יש תכונות משותפות. כך גם He(הליום), Ne (ניאון), Ar (ארגון).

אם מתעלמים לרגע מהבלוק המרכזי של הטבלה, הטבלה מחולקת ל8 קבוצות. לכל טור יש אותן תכונות כימיות ואופטיות. תכונות אלו נובעות מהקונפיגרציות של האלקטרונים, לכל האטומים באותה קבוצה יש אותה קונפיגורציה.

בנוסף לחלוקה לקבוצות הקשורה לעמודות בטבלה, יש גם את השורות של הטבלה. התכונות הכימיות של היסודות משתנות בצורה משמעותית כשהולכים בטבלה משמאל לימין באותה שורה.

קיימים שני עקרונות מנחים בעניין הקונפיגורציות האטומיות של היסודות, והם המסבירים את ההתנהגות הכימית שלהן:

1. לפי עקרון האיסור של פאולי עבור כל תת קליפה ℓ יש $2 \cdot (2\ell + 1)$ אלקטרונים. תת קליפה היא אוסף המצבים עם אותו n ואותו ℓ .
   לכן, בתת קליפה $\ell = 0$ (s) יכולים לשבת 2 אלקטרונים.
   בתת קליפה $\ell = 1$ (p) יכולים לשבת 6 אלקטרונים.
   בתת קליפה $\ell = 2$ (d) יכולים לשבת 10 אלקטרונים.
2. מצב היסוד של אטום הוא כזה שבו סך האנרגיה מינימלית.
   לאטומים מרובי אלקטרונים האנרגיה מושפעת מהאינטראקציה של האלקטרונים עם הגרעין שמטענו Ze ומהאינטראקציה בין האלקטרונים בינם לבין עצמם.
   אין פתרון מדויק לקונפיגורציות השונות , אך תוצאות אינטואיטיביות יכולות להתקבל:
3. האנרגיה הכללית של אלקטרון באטום מרובה אלקטרונים נעשית פחות שלילית ככל ש – n עולה. הפרשי האנרגיות הולכים וקטנים עם הגידול ב - n.

ההסבר לכך הוא שככל ש- n גדל פונ' הגל נותנת הסתברות גבוהה יותר להימצאות האלקטרון ב r - ים גדולים יותר, וממילא אנרגית הקשר הולכת וקטנה. עבור n מסוים- ככל ש - ℓ קטן יותר הוא בעל האנרגיה הנמוכה יותר. אמנם באטום המימן יש ניוון ב - ℓ-ים השונים, אך לאטומים מרובי אלקט' זה כבר לא כך. ההסבר לכך הוא שכפי שראינו ב ℓ-ים הנמוכים לאלקטרון יש סיכוי להיות קרוב יותר לגרעין. ואז זה אומר שהוא מרגיש משיכה ממש גבוהה לגרעין. ב - ℓ גבוה יותר כיוון שכמעט אין הסתברות להיות קרוב לגרעין, הרי שמרגישים מיסוך מצד כל האלקטרונים הפנימיים, ולכן האלקטרון

עם ℓ גבוה לא מרגיש את כל Z הפרוטונים בגרעין אלא אפקטיבית מרגיש פחות משיכה וממילא האנרגיה שלו גבוהה יותר.