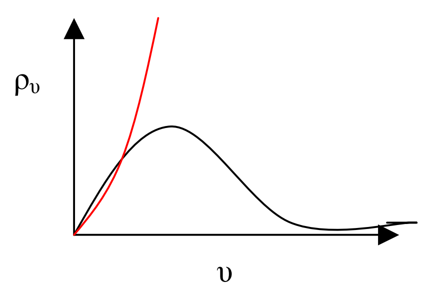
הקדמה:

אלקטרון, שהוא חלקיק קטן ביותר, קובע כמעט את כל תכונות החומר. כלומר:

1. מבנה האטום.
2. הקשר הכימי בין מולקולות.
3. מבנה המולקולה.
4. ריאקציות כימיות- גובה המחסום האנרגטי של התגובה, מנגנון הריאקציה.
5. זרם מולקולארי.
6. ספקטרוסקופיה- כלומר תכונות אופטיות של החומרים.

כל תורת האלקטרונים התחילה להתפתח בשנת 1897 ע"י מדען בשם תומפסון, אשר מדד את היחס בין מטען האלקטרון למסתו. האלקטרון שהוא חלקיק מיקרוסקופי, לא נשמע לחוקי המכאניקה הקלאסית. במילים אחרות, לא ניתן להסביר תצפיות ניסיוניות של אלקטרונים ע"י תורת המכאניקה הקלאסית. דבר זה בא לידי ביטוי לראשונה בתופעה הנקראת הקטסטרופה של האולטרא סגול.

המדען הראשון שהסביר ניסיון ובו החלקיקים "נשמעו" לחוקים חדשים היה פלנק. פלנק ניסה להסביר את ספקטרום תדירויות הקרינה האלקטרומגנטית של מוצק בתוך מיכל סגור. לבעיה זו קוראים בעיה של קרינת גוף שחור. בניסוי זה גילו כי ספקטרום הקרינה שונה מזה שהיה צפוי לפי התורה הקלאסית (המסומן בצבע האדום):



בהסתמך על התיאוריה של מקסוול שני מדענים בשם ריילי וג'ונס גזרו את הביטוי הקלאסי הבא:

$$\rho_{\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT$$

אך ביטוי זה לא יכול לנבא מה תהיה עוצמת הקרינה בתדירויות גבוהות. במילים אחרות ע"י ביטוי זה לא ניתן להסביר את התוצאה הניסיונית שקיבל פלנק.

פלנק מצא פיתרון לבעיה זו, ע"י כך שהוא הסביר כי גוף לא יכול לפלוט קרינה באופן רציף, אלא רק ביחידות שוות אנרגיה ל- hυ. דרך טובה יותר להגיד את הדברים האלו תהיה לומר כי יש קוונט של אנרגיה, כמות בדידה של אנרגיה, ובתדירות מסוימת לקרינה האלקטרומגנטית תהיה קוונטיזציה מסוימת.

ע"י ההנחות האלו הצליח פלנק לגזור ביטוי מדויק למתרחש:

$$\rho_\nu = \frac{8\pi h(\nu/c)^3}{e^{h\nu/kT}-1}$$

כאשר h נקרא קבוע פלנק. בגבול שבו $h\nu >> kT$ אנו מקבלים את הביטוי הבא:

$$\rho_\nu = 8\pi h\left(\frac{\nu}{c}\right)^3 e^{-h\nu/kT}$$

בגבול שבו $h\nu << kT$ וע"י פיתוח לטור טיילור אנו מקבלים את הביטוי הבא:

$$\rho_\nu = 8\pi h\left(\frac{\nu}{c}\right)^3 \frac{kT}{h\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT$$

וזהו בדיוק הביטוי הקלאסי. **הגבול הקלאסי מתקבל בטמפרטורות גבוהות ביחס לתדירות.** נרצה להראות כי תיאוריה זו של פלנק מסבירה גם את התיאוריה של בולצמן האומרת כי:

$$\int_0^\infty \rho_\nu d\nu \propto T^4$$

$$\int_0^\infty \frac{8\pi h(\nu/c)^3}{e^{h\nu/kT}-1}d\nu$$

נבצע החלפת משתנים: $\nu = \frac{kT}{h}x$ $\qquad x = \frac{h\nu}{kT}$

$$\int_0^\infty \left(\frac{8\pi h}{c^3}\left(\frac{kT}{h}\right)^3 x^3 \frac{1}{e^x-1}\right)\frac{kT}{h}dx = \frac{8\pi}{h^3c^3}k^4T^4\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}dx = BT^4$$

$$B = \frac{8\pi}{h^3c^3}k^4\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}dx$$

ניתן לראות כי B הוא קבוע שלא תלוי בטמפרטורה. באופן זה הראנו כי הנוסחה של פלנק מנבאה את ההתנהגות שבולצמן ראה.

היו ניסיונות נוספים שהראו את התופעה שהפוטונים באים באנרגיה מקוונטטת: לדוגמת הניסוי של האפקט הפוטואלקטרי. עפ"י התיאוריה הקלאסית של שדות קרינה , הפליטה של אלקטרון ממתכת תלויה בעוצמת הקרינה הפוגעת במתכת בניגוד לתוצאה ניסיונית שפליטת האלקטרון תלויה רק באנרגיה של הפוטון.

בשנת 1905 הסביר איינשטיין את התופעה ע"י פוטון הפוגע במתכת באנרגיה hv. הרעיון הוא שלקרינה אין רק עוצמה אלא גם אנרגיה וזהו למעשה היסוד של הקוונטיקה, שפוטון יכול להעביר אנרגיה.

בשנת 1909 רתרפורד ערך ניסוי פיזור של חלקיקי α (He^{++}) מעלה מתכתי. מניסיון זה רתרפורד הציע מבנה לאטום ובו גרעין חיובי שסביבו יש אלקטרונים שליליים. זהו ניסיון נוסף המלמד אותנו על ממבנה האטום. אך ידוע כי מודל זה אינו נכון שכן זו תמונה עפ"י התיאוריה הקלאסית.

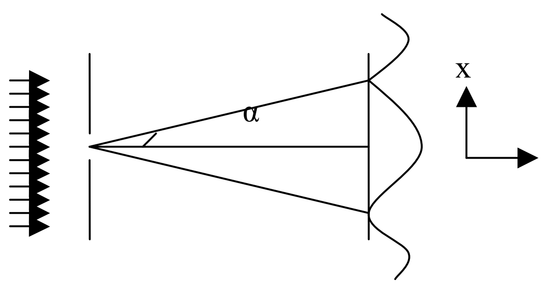
בור הציע מודל קצת יותר משופר למבנה זה של האטום (בשנת 1913). במודל זה האלקטרון סובב סביב הגרעין אולם הוא מוגבל לנוע במעגלים באנרגיה מסוימת.

למעשה בכל הניסויים האלו גילו שתי תופעות שלא ניתן להסבירם והם הקוונטיזציה והדואליות של החומר. דה ברולי אמר שהאלקטרון הוא גם חלקיק וגם גל. למעשה הוא אמר שיש בין אורך הגל λ לתנע של החלקיק:

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{mv}}$$

בשנת 1928 היה ניסיון של דוויסון וגמנט של פיזור אלקטרונים ממשטח מתכתי ואכן הם ראו אפקט התאבכות , כלומר אפקט שניתן לייחסו אך ורק לגלים. אם חלקיקים מתנהגים כמו גלים יש צפיפות הסתברות למצוא את הגל במקום מסוים, וכתוצאה מכך ניתן לגזור ביטוי הנקרא עקרון אי הוודאות של אייזנברג. הרעיון של אייזנברג אמר שלא ניתן לדעת בוודאות את התנע הליניארי ואת מיקום החלקיק בעת ובעונה אחת.

הניסוי שערך אייזנברג כדי להראות עיקרון זה היה ניסוי של עקיפה בסדק. בניסוי זה אלומת אור עם חלקיקים בעלי תנע P בכיוון ציר Y, עוברת דרך חריץ. התמונה המתקבלת מניסוי זה היא תמונת התאבכות, בניגוד לתאוריה הקלאסית שהיינו אמורים לקבל תמונה רציפה.



רוחב הסדק הוא W. אייזנברג רצה לחשב את מכפלת אי הוודאויות: $\Delta P_x \Delta x = ?$. השגיאה במיקום יכולה להיות כרוחב הסדק ולכן:

$\Delta x = w$. רכיב התנע בכיוון ציר Y: $p_y = p\cos\alpha$. רכיב התנע בכיוון ציר X: $p_x = p\sin\alpha$.

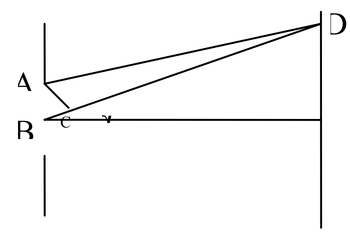
מכיוון שהחלקיקים מתפזרים בכיוון ציר X התנע המקסימלי יהיה $p_x = p\sin\alpha$, והמינימלי היה $p_x = -p\sin\alpha$. ומכאן ניתן לומר כי: $\Delta P_x = \frac{1}{2}(P_{\max} - P_{\min}) = P\sin\alpha$.

$$\Delta P \Delta x = wp\sin\alpha$$

$$\lambda = \frac{h}{P} \qquad \Rightarrow P = \frac{h}{\lambda}$$

$$\Delta P \Delta x = w\frac{h}{\lambda}\sin\alpha$$

נבנה את המערכת כך שנקבל התאבכות הורסת בנקודה D:



$$\overline{AD} = \overline{CD}$$

$$\overline{BC} = 1/2\lambda$$

$$\frac{\overline{BC}}{0.5w} = \sin\alpha$$

$$\Rightarrow \overline{BC} = 1/2w\sin\alpha$$

$$\Rightarrow w\sin\alpha = \lambda$$

$$\Rightarrow \mathbf{\Delta P \Delta x = h}$$

וזה בדיוק עקרון אי הוודאות של אייזנברג.

קיבלנו שני עקרונות פיסיקליים חדשים:

1. קוונטיזציה.
2. דואליות (האלקטרון הוא גם חלקיק וגם גל)

לשם השלמת התמונה אנו זקוקים לחוק/משוואה, שתתאר את התכונה הגלית של החלקיקים, כלומר אנו זקוקים למשוואת גלים אשר צריכה להתאים הן לתאוריה והן לניסיון. אנו נתמקד בתאוריה של שרדינגר שפיתח משוואה המשרתת את המטרה שלנו. קיימות שתי משוואות שרדינגר:

1. משוואת שרדינגר התלויה בזמן- שכמעט ולא ניגע בה בקורס זה.
2. משוואת שרדינגר הבלתי תלויה בזמן- המשוואה הסטציונרית.

את משוואת שרדינגר לא ניתן לגזור, אולם ניתן לפתח אותה משיקולים פיזיקלים. ניתן לכתוב את הפתרון למשוואת שרדינגר באופן הבא:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) = A\sin(kx+\alpha)\sin(\omega t+\beta)$$

כאשר k זהו מספר הגל והוא שווה ל- $2\pi/\lambda$, ו- λ זהו אורך הגל. כמו כן ω זוהי התדירות הזוויתית.

כעת נגזור את שני אגפי המשוואה פעמיים לפי המקום:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = Ak\cos(kx+\alpha)\sin(\omega t+\beta)$$
$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -Ak^2\sin(kx+\alpha)\sin(\omega t+\beta) = -k^2\Psi(x,t)$$

עפ"י דה ברולי: $\lambda = \frac{h}{P}$ ומכאן:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -k^2\Psi(x,t) = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\Psi(x,t) = -\left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 P^2\Psi(x,t)$$
$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{P^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

עפ"י חוק שימור האנרגיה:

$$E = T + V = \frac{P^2}{2m} + V$$
$$\Rightarrow P^2 = 2m(E-V)$$

נציב קשר זה במשוואה שקיבלנו עבור הגל:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2}2m(E-V)\Psi(x,t)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = (E-V)\Psi(x,t)$$

נסדר את המשוואה ונקבל את משוואת שרדינגר עבור בעיית חלקיק שנע במימד אחד:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$$

עבור המקום ניתן גם לרשום את המשוואה עבור בעיה תלת מימדית:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right) + V\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)$$

או בצורה המקוצרת:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,y,z) + V\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)}$$

משוואה זו זהה לחלוטין למשוואת שימור האנרגיה הקלאסית:

$$E = T + V = \frac{P^2}{2m} + V$$

$$P \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$P^2 \to -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

הרעיון של שרדינגר היה לקחת את חוק שימור האנרגיה ולצרף אליו את עקרונות הדואליות. טענות:

1. משוואת שרדינגר היא משוואת ערך עצמי, כלומר מהצורה $\hat{O}\Psi = \lambda\Psi$, כאשר האופרטור שלה הוא ההמילטוניאן אופרטור האנרגיה: $\boxed{\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla} + \hat{V}}$. כתוצאה מכך שמשוואת שרדינגר היא משוואת ערך עצמי יש לה פתרונות רבים. את הפתרונות מסמנים ב- Ψ_n ואלו נקראות פונקציות עצמיות או מצבים עצמיים. E_n אלו הערכים העצמיים.

2. פונקציית הגל Ψ יכולה להיות פונקציה מרוכבת.

3. המכפלה בין פונקציה הגל Ψ בצמודה שלה נותנת את צפיפות ההסתברות למצוא את החלקיק במרווח קטן או בכתיבה מתמטית $\Psi^*(x)\Psi(x)dx = \rho$.

4. כדי שמכפלה הנ"ל תבטא את צפיפות ההסתברות Ψ צריכה להיות פונקציה מנורמלת, כלומר צריך להתקיים השוויון הבא: $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$. כדי שאפשר יהיה לנרמל את Ψ, פונקציה זו צריכה להתנהג בנימוס. הכוונה היא לפונקציה רציפה, סופית, חד ערכית ואינטגרבילית.

5. שתי פונקציות עצמיות שונות של אותו האופרטור Ψ_m, Ψ_n כאשר $m \neq n$, אורטוגונליות, כלומר:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_n^*(x)\Psi_m(x)dx = \delta_{nm}$$

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$