УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
16 января 2025 года

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Квантовая механика**
по направлению подготовки:
03.03.01 «Прикладные математика и физика»
физтех-школа: **ФРКТ**

кафедра: **теоретической физики им. Л.Д. Ландау**
курс: 3
семестр: 6

лекции – 30 часов
Дифф. зачет – 6 семестр
практические (семинарские)
занятия – 30 часов

ВСЕГО АУДИТОРНЫХ ЧАСОВ — 60
Самостоятельная работа – 30 часов

Программу и задание составил к.ф.-м.н., доцент
М. Г. Иванов

Программа принята на заседании
кафедры теоретической физики им Л.Д.Ландау
21 декабря 2024 года

Заведующий кафедрой
д.ф.-м.н.
Э. Т. Ахмедов

1. Введение

Явления, указывающие на необходимость квантовой механики. Атомный масштаб физических величин. Волна де Бройля. Состояние и наблюдаемая — основные понятия квантовой кинематики. Амплитуда вероятности. Принцип суперпозиции. Теория измерений (проекционный постулат и правило Борна). Операторы наблюдаемых и симметрий. Среднее наблюдаемой. Эволюция замкнутой системы.

2. Уравнение Шредингера

Операторы координаты, импульса и энергии (гамильтониан). Каноническое квантование. Плотность вероятности и плотность потока вероятности. Уравнение непрерывности. Оператор производной наблюдаемой по времени. Коммутаторы и скобки Пуассона. Интегралы движения. Теоремы Эренфеста. Стационарные состояния и стационарное уравнение Шредингера. Вариационный принцип.

3. Квантовая кинематика

Базис в гильбертовом пространстве. Понятия вектора состояния и пространства состояний. Обозначения Дирака. Система собственных векторов оператора физической величины. Нормировка собственных векторов дискретного и непрерывного спектра. Условие полноты (разложение единичного оператора). Унитарные преобразования. Координатное, импульсное и энергетическое представления. Условие одновременной измеримости физических величин. Полный набор коммутирующих операторов. Соотношение неопределенности.

4. Динамика замкнутой системы

Общее решение задачи Коши для уравнения Шредингера в случае, когда гамильтониан системы не зависит от времени. Оператор эволюции. Представления Шредингера и Гейзенберга. Уравнение Гейзенберга для операторов физических величин.

5. Одномерное движение

Общие свойства одномерного движения. Невырожденность дискретного спектра, осцилляционная теорема. Движение свободной частицы, волновой пакет. Отражение от потенциальной стенки. Прохождение через и отражение от потенциального барьера, унитарность. Движение в периодическом потенциале, зонный спектр.

6. Гармонический осциллятор

Повышающий $\hat{b}^{+}$ и понижающий $\hat{b}$ операторы. Нахождение энергетического спектра и векторов стационарных состояний гармонического осциллятора исходя из коммутационных соотношений. Когерентные состояния.

7. Орбитальный момент импульса

Операторы орбитального момента импульса частицы $\hat{\mathbf{l}}$ и его квадрата $\hat{\mathbf{l}}^2$ в декартовых и сферических координатах. Оператор конечных вращений. Коммутационные соотношения для операторов момента. Сферические гармоники.

8. Собственные значения и собственные функции операторов момента импульса

Нахождение собственных значений и построение общей системы собственных векторов операторов $\hat{j}_z$ и $\hat{\mathbf{j}}^2$ исходя из коммутационных соотношений. Целые и полуцелые значения момента. Переход к координатному представлению (построение сферических гармоник) для целых j. Спин частицы. Матрицы Паули.

9. Задача двух тел

Разделение переменных в квантово-механической задаче двух тел. Гамильтониан в сферических координатах. Разделение радиальной и угловых переменных в стационарном уравнении Шредингера. Уравнение для радиальной функции. Граничные условия для связанных состояний. Полный набор коммутирующих операторов. Радиальное и орбитальное квантовые числа и квантовое число проекции момента. Кратность вырождения уровней.

10. Атом водорода

Атомная система единиц. Энергии и волновые функции стационарных состояний дискретного спектра водородоподобного атома. Главное квантовое число. Кулоновское вырождение.

11. Квазиклассическое приближение

Волновая функция, описывающая одномерное движение в квазиклассическом приближении. Критерий применимости квазиклассического приближения. Принцип соответствия. Классически разрешенная и запрещенная области, точки поворота. Условие сшивки квазиклассических решений по разные стороны от точки поворота. Условие квантования Бора–Зоммерфельда. Фазовый объем, приходящийся на одно состояние, и плотность состояний. Вероятность туннелирования через потенциальный барьер.

12. Квантовые корреляции

Описание объединения двух квантовых систем. Теорема о невозможности клонирования квантового состояния. Протокол квантового распределения криптографических ключей BB84. Неравенство Белла и его нарушение в квантовой механике. Квантовая телепортация. Квантовое вычисление на примере алгоритма Гровера.

Литература

Основная

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — Москва : Физматлит, 2017.
2. *Мессиа А.* Квантовая механика. — Москва : Наука; Т.1, 1978; Т.2, 1979.
3. *Белоусов Ю.М.* Квантовой механика. Нерелятивистская теория. — Москва : МЦНМО, 2023.
4. *Киселев В.В.* Квантовая механика. — Москва : МЦНМО, 2009.
5. *Белоусов Ю.М., Бурмистров С.Н., Тернов А.И.* Задачи по теоретической физике. — Долгопрудный : Интеллект, 2022.
6. *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. — Москва : УРСС, 2001.

Дополнительная

1. *Дирак П.А.М.* Принципы квантовой механики. – Москва : Наука, 1979.
2. *Белоусов Ю.М., Кузнецов В.П., Смилга В.П.* Катехизис. Руководство по математике для начинающих изучать теоретическую физику: учеб. пособие. — Москва : МФТИ, 2005.
3. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики. — Санкт-Петербург : Лань, 2004.
4. *Елютин П.В., Кривченков В.Д.* Квантовая механика. — Москва : Физматлит, 2001.
5. *Давыдов А.С.* Квантовая механика. — Санкт-Петербург : БХВ-Петербург, 2011.
6. *Шифф Л.* Квантовая механика. — Москва : ИЛ, 1959.

Методически рекомендованная

1. *Барабанов А.Л.* Лекции по квантовой механике: учеб. пособие : В 2-х частях. — Москва : МФТИ, 2005. `https://old.mipt.ru/education/chair/theoretical_physics/biblio/qm-barabanov.php`
2. *Иванов М.Г.* Как понимать квантовую механику. — Москва, Ижевск : РХД, 2015. `https://old.mipt.ru/students/organization/mezhpr/biblio/q-ivanov.php`
3. *Абрикосов А.А. мл.* «Кванты» за ночь? Конспект–справочник версия 0.2. `https://old.mipt.ru/education/chair/theoretical_physics/biblio/kvanty-za-noch-abrikosov/`

Упражнения

Первое задание

1.$^{\mathbf{C}}$ Найти эрмитово сопряженные и обратные операторы для операторов пространственной инверсии $\hat{I}$ и трансляции $\hat{T}_a$.

2.$^{\mathbf{C}}$ Найти собственные значения и собственные функции операторов пространственной инверсии $\hat{I}$ и трансляции $\hat{T}_a$.

3.$^{\mathbf{C}}$ Вычислить действие на волновую функцию оператора $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{I}\varphi}$.

4.$^{\mathbf{C}}$ Выразить оператор трансляции $\hat{T}_a$ через оператор импульса $\hat{p}$.

5.* В каких задачах и упражнениях могут использоваться операторы $\hat{I}$ и $\hat{T}_a$?

6. Вычислить действие на волновую функцию оператора

$$\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{p}}}\,U(\hat{\boldsymbol{r}})\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{p}}}.$$

7. Показать, что $\hat{A}\hat{A}^+$ — эрмитов оператор и $\langle\hat{A}\hat{A}^+\rangle \geqslant 0$.

8. Доказать равенство коммутаторов

$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}].$$

Доказать с помощью полученного равенства правило Лейбница для производной от произведения операторов $\frac{d(\hat{B}\hat{C})}{dt}$.

9. Вычислить $[U(\hat{x}),\hat{p}]$, $\qquad [U(\hat{x}),\hat{p}^2]$, $\qquad [\hat{x}, f(\hat{p})]$.

10.* Доказать справедливость разложения

$$\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\hat{B}\,\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}} = \hat{B} + \xi[\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}\,\xi^2[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] + \ldots$$

11.$^{\mathbf{C}}$ Эрмитов оператор с дискретным спектром $\hat{f}(\lambda)$ зависит от параметра λ. Собственные значения $f_n(\lambda)$ и собственные векторы $|\psi_n(\lambda)\rangle$ этого оператора также зависят от λ. Доказать теорему Гельмана–Фейнмана:

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial\lambda} = \Big\langle\psi_n(\lambda)\Big|\frac{\partial\hat{f}(\lambda)}{\partial\lambda}\Big|\psi_n(\lambda)\Big\rangle.$$

12.* Вычислить коммутатор $[\hat{b}, f(\hat{b}^\dagger)]$.

13.$^{\mathbf{C}}$ Пользуясь операторами рождения и уничтожения, вычислить средние значения и дисперсии координаты и импульса, а также средние значения операторов $\hat{x}^4$ и $\hat{x}^{2k+1}$, $\hat{p}^4$ и $\hat{p}^{2k+1}$ в n-м стационарном состоянии гармонического осциллятора. Обсудите величину $\langle\hat{x}^2\rangle\langle\hat{p}^2\rangle$ в связи с соотношением неопределенностей.

14.$^{\mathbf{C}}$ Найти операторы рождения и уничтожения для гармонического осциллятора в представлении Гейзенберга.

15.* Для каких гамильтонианов $\langle x(t)\rangle$ и $\langle p(t)\rangle$ точно описываются классическими уравнениями Гамильтона?

Второе задание

16.$^{\mathbf{C}}$ Вычислить коммутаторы

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\pm], \quad [\hat{l}_+, \hat{l}_-], \quad [\hat{l}_\alpha, \hat{x}_\beta], \quad [\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta], \quad [\hat{l}_\alpha, \hat{\boldsymbol{r}}^2], \quad [l_\alpha, \hat{\boldsymbol{p}}^2],$$

$$[\hat{l}_\alpha, (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})], \quad [\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta\hat{p}_\gamma], \quad [\hat{l}_\alpha, f(\hat{r})], \quad [\hat{l}_z, f(\hat{\rho})], \quad \hat{\rho}^2 = \hat{x}^2 + \hat{y}^2.$$

17.$^{\mathbf{C}}$ Доказать равенства

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta = \hat{1}\delta_{\alpha\beta} + \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma,$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}) + \mathrm{i}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot[\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}],$$

где $\boldsymbol{a}$ и $\boldsymbol{b}$ — векторы, $[a_\alpha, \sigma_\beta]{=}0$.

18. Вычислить $\sigma_\pm^2$ и $[\sigma_\pm, \sigma_\alpha]$.

19.$^{\mathbf{C}}$ Вычислить действие на спинор оператора $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\,\phi/2}$, $|\mathbf{n}| = 1$.

20. Для $j = 1$ записать матрицы $\hat{\boldsymbol{j}}^2$, $\hat{j}_\alpha$, $\hat{j}_\pm$ и найти собственные векторы для $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ и $\hat{j}_z$. Пусть $\mathbf{n}$ — единичный вектор. Найти собственные значения и собственные векторы матрицы $(\hat{\boldsymbol{j}}\cdot\boldsymbol{n})$.

21.$^{\mathbf{C}}$ Пусть функции $Y_{1x}(\theta,\phi)$, $Y_{1y}(\theta,\phi)$ и $Y_{1z}(\theta,\phi)$ — p-орбитали («гантельки» из учебника химии) ориентированные по осям x, y и z соответственно. Выразить их через $Y_{1m}(\theta,\phi)$ $(m = 0, \pm1)$. Проверить ортонормированность.

Задачи

Первое задание

1.$^{\mathbf{C}}$ Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в потенциальном ящике:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ +\infty, & x < 0 \cup x > a. \end{cases}$$

Вычислить средние значения и дисперсии координаты и импульса, $\langle\hat{x}\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle$, δx^2 и δp^2, для n-го стационарного состояния. Найти фазовый объем, приходящийся на одно квантовое состояние.

2.* Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний для свободной частицы на отрезке длины a с периодическими граничными условиями со сдвигом фазы:

$$\psi(0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi(a), \quad ,\psi'(0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi'(a), \quad \alpha \in \mathbb{R}.$$

Для стационарных состояний вычислить средние $\langle\hat{x}\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle$. Найти фазовый объем, приходящийся на одно квантовое состояние. Выполняется ли соотношение $\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m}$? Почему?

3. Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний в потенциальной яме:

$$a) \qquad V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| < a, \quad V_0 > 0, \\ 0, & |x| > a, \end{cases}$$

$$b) \qquad V(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0, \\ -V_0, & 0 < x < a, \quad V_0 > 0, \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

4.$^{\mathbf{C}}$ а) Найти энергию и волновую функцию связанного состояния частицы в поле:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\alpha}{m}\,\delta(x).$$

Вычислить средние значения и дисперсии координаты и импульса в связанном состоянии.
б) Найти коэффициенты прохождения и отражения.
в) Вычислить вероятность “ионизации” связанного состояния при мгновенном изменении параметра ямы с α_0 до α_1.
г) Найти волновую функцию связанного состояния в импульсном представлении.

5. Найти коэффициенты прохождения и отражения частицы:
а) для прямоугольной потенциальной ступеньки;
б) для прямоугольного потенциального барьера;
в) для прямоугольной потенциальной ямы.

6.$^{\mathbf{C}}$ Найти уровни энергии и волновые функции связанных состояний частицы в поле:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\alpha}{m}\Big(\delta(x+a) + \delta(x-a)\Big).$$

Рассмотреть предел $\alpha a \gg 1$ и эволюцию начального состояния, отвечающего волновой функции частицы, связанной в левой яме. Определить вероятность обнаружить частицу в той же яме в момент времени t и частоту осцилляций.

7.$^{\mathbf{C}}$ Найти разрешенные зоны энергии частицы, движущейся в потенциальном поле:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2\alpha}{m}\sum_{n=-\infty}^{n=+\infty}\delta(x - n\,a).$$

Рассмотреть предельные случаи: а) $\alpha a \gg 1$ (сильная связь),
б) $\alpha a \ll 1$ (слабая связь). Найти закон дисперсии для первой зоны и вычислить эффективную массу частицы при малых значениях квазиимпульса.

8.* Рассмотреть вопрос о существовании связанного сферически симметричного состояния частицы в сферически симметричной потенциальной яме в пространстве одного, двух (качественно в импульсном представлении для мелкой ямы) и трех измерений.

9.$^{\mathbf{C}}$ Найти волновую функцию, минимизирующую соотношение неопределенностей для координаты и импульса: $\delta x \cdot \delta p = \frac{\hbar}{2}$.

10.* Пусть в момент $t = 0$ состояние свободной частицы массы m описывается волновой функцией $\psi_0(x)$ такой, что $\langle\hat{x}\rangle = x_0$, $\langle\hat{p}\rangle = p_0$, а произведение неопределенностей координаты и импульса принимает минимальное значение. Найти, как будет меняться во времени волновая функция частицы $\psi(x,t)$ и плотность вероятности $|\psi(x,t)|^2$.

11.$^{\mathbf{C}}$ Найти уровни энергии трехмерного изотропного гармонического осциллятора и кратности их вырождения, разделяя переменные в декартовых координатах. Обсудить связь задачи с моделью ядерных оболочек и получить значения магических чисел 2, 8, 20.

12. Рассмотреть когерентные состояния одномерного гармонического осциллятора:

$$\hat{b}|\psi_z\rangle = z|\psi_z\rangle, \quad \langle\psi_z|\psi_z\rangle = 1, \quad z \in \mathbb{C}.$$

а) Найти среднюю энергию, $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$.
б) Вычислить распределение по числу квантов.
в) Вычислить $\psi_z(Q)$.
г*) Найти временную эволюцию $\psi(t)$, если $\psi(0) = \psi_z$.
д*) Найти $\langle x(t)\rangle$, $\langle p(t)\rangle$, $\langle \delta x^2(t)\rangle$, $\langle \delta p^2(t)\rangle$

Второе задание

13.$^{\mathbf{C}}$ Найти средние значения компонент момента импульса в состоянии $|l,m\rangle$:

$$\langle\hat{l}_x\rangle, \quad \langle\hat{l}_y\rangle, \quad \langle\hat{l}_x\hat{l}_y\rangle, \quad \langle\hat{l}_y\hat{l}_x\rangle, \quad \langle\hat{l}_x^2\rangle = \langle\hat{l}_y^2\rangle.$$

14.$^{\mathbf{C}}$ Найти собственные значения и собственные спиноры для оператора $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ проекции спина на ось $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}/r$. Вычислить вероятность того, что спинор с проекцией на ось z, равной $1/2$, находится в собственных состояниях $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$.

15.$^{\mathbf{C}}$ Отрицательно заряженный мюон находится в связанном стационарном состоянии. В момент времени $t = 0$, когда "включается" магнитное поле $\mathbf{B}$, направленное под углом θ к оси z, спиновое состояние мюона описывается функцией $|\chi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Какой функцией $|\chi(t)\rangle$ описывается спиновое состояние мюона во все последующие моменты времени в представлении Шредингера? Как выглядит оператор спина мюона $\hat{\mathbf{s}}(t)$ в представлении Гайзенберга? Найдите вектор поляризации мюона $\mathbf{P}(t) = 2\langle\chi|\hat{\mathbf{s}}|\chi\rangle$ как функцию времени, пользуясь представлениями Шредингера и Гайзенберга. Какое движение совершает в пространстве вектор $\mathbf{P}(t)$? Меняется ли во времени его длина?

16.$^{\mathbf{C}}$ Найти уровни энергии трехмерного изотропного гармонического осциллятора и кратности их вырождения, разделяя переменные в сферических координатах. Определить пространственную четность состояний.

17.* Записать стационарное уравнение Шредингера для атома водорода в импульсном представлении. Найти волновую функцию основного состояния в импульсном представлении.

18.$^{\mathbf{C}}$ Найти средние значения для nl-состояний атома водорода
а) $1/r$, $1/r^2$, $1/r^3$ и $\mathbf{p}^2$ используя теоремы Эренфеста и Гельмана–Фейнмана и вириала;
б*) $1/r$, r, r^2 используя рекурсивное отношение Крамерса.

19.$^{\mathbf{C}}$ Атом водорода находится в стационарном состоянии с главным квантовым числом $n = 2$. Найти максимальное значение дипольного момента атома $\mathbf{d} = \langle\psi|(-e)\mathbf{r}|\psi\rangle$ и волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$, описывающую состояние с максимальным электрическим дипольным моментом.

20.$^{\mathbf{C}}$ Вычислить в квазиклассическом приближении уровни энергии и собственные функции:

а) гармонического осциллятора,
б) частицы в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0, \\ \dfrac{m\omega^2 x^2}{2}, & x > 0. \end{cases}$$

21.$^{\mathbf{C}}$ В квазиклассике найти коэффициент проникновения через потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & 0 < x < a, \\ \dfrac{2Ze^2}{x}, & x > a, \end{cases}$$

в пределе $a \ll 2Ze^2/E$. Обсудить связь с элементарной теорией α-распада и получить закон Гейгера–Неттола.

22. Вычислить в квазиклассическом приближении уровни энергии и собственные функции частицы в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0, \\ F\,x, & x > 0. \end{cases}$$

23. Частица совершает финитное движение в одномерном потенциале $U(x)$; E_n – энергии стационарных состояний. Воспользовавшись квазиклассическим приближением, найдите изменения δE_n энергий стационарных состояний при малом изменении потенциала $U(x) \to$ $\to U(x) + \delta U(x)$.

Задачи со значком $^{\mathbf{C}}$ рассматриваются на семинаре, знаком * отмечены дополнительные задачи повышенной сложности.

1-я контрольная работа – вторая декада марта

ЗАДАНИЕ 1 (срок сдачи 17.03 – 22.03.2025 года)

2-я контрольная работа – вторая декада мая

ЗАДАНИЕ 2 (срок сдачи 12.05 – 17.05.2025 года)