

ПРОГРАММА И ЗАДАНИЯ

по дисциплине «Квантовая механика (часть 2)»

кафедра теоретической физики им. Л. Д. Ландау

Направление подготовки:

03.03.01 «Прикладные математика и физика»

IV курс

7 семестр

Программу и задания составил:

доц., к.ф.-м.н. М. Г. Иванов

1. Стационарная теория возмущений

Первое и второе приближения стационарной теории возмущений. Критерий применимости. Стационарное возмущение вырожденных уровней дискретного спектра. Секулярное уравнение. Правильные волновые функции нулевого приближения. Эффект Штарка в атоме водорода. Функция Грина стационарного уравнения Шрёдингера и теория возмущений для непрерывного спектра.

2. Нестационарная теория возмущений

Представление взаимодействия. Оператор эволюции в представлении взаимодействия. Вероятность перехода. Переходы под влиянием возмущения, действующего в течение конечного времени. Переходы под влиянием периодического возмущения в состояния дискретного и непрерывного спектра. “Золотое правило” Ферми. Переходы под влиянием постоянного возмущения. Адиабатические и внезапные возмущения. Квазистационарные состояния.

3. Сложение моментов импульса

Сложение моментов. Коэффициенты Клебша–Гордана. Сложение спинов $\frac{1}{2}$, триплетные и синглетные состояния.

4. Заряд во внешнем электромагнитном поле

Уравнение Клейна–Фока–Гордона. Уравнение Дирака для свободной частицы. Плотности вероятности и потока вероятности для дираковской частицы. Спин и полный момент количества движения. Состояния с положительными и отрицательными энергиями. Уравнение Дирака для заряженной частицы в электромагнитном поле. Градиентная инвариантность уравнения Дирака. Уравнение Паули. Собственный магнитный момент электрона. Спин-орбитальное взаимодействие. Движение заряженной частицы в постоянном и однородном магнитном поле, уровни Ландау.

5. Тождественные частицы

Перестановочная симметрия системы тождественных частиц. Бозоны и фермионы. Детерминант Слэтера. Принцип Паули. Разделение координатной и спиновой частей волновой функции системы тождественных частиц. Связь симметрии координатной части волновой функции системы с полным спином.

6. Атом гелия

Атом гелия. Пара- и ортосостояния. Обменное взаимодействие.

7. Сложный атом

Вариационный принцип, вычисление энергии основного состояния. Приближение центрального поля. Электронная конфигурация. Учёт остаточного межэлектронного взаимодействия. Термы. Правила Хунда. Тонкая структура уровней. Правило интервалов Ланде. Сложный атом во внешнем магнитном поле. Эффекты Зеемана и Пашена-Бака.

8. Теория рассеяния

Постановка задачи рассеяния. Оптическая теорема. Упругое рассеяние. Амплитуда и сечение рассеяния. Функция Грина задачи рассеяния. Интегральное уравнение задачи рассеяния. Приближение Борна. Критерии применимости борновского приближения. Метод парциальных волн. Фазы рассеяния. Выражение амплитуды рассеяния через фазы рассеяния. Рассеяние медленных частиц, длина рассеяния. Рассеяние быстрых частиц. Рассеяние тождественных частиц. Резонансное рассеяние.

9. Основы теории излучения

Квантование свободного электромагнитного поля. Гамильтониан и состояния поля. Вероятность поглощения и излучения. Электрическое дипольное излучение. Правила отбора для электрического дипольного излучения. Магнитное дипольное и электрическое квадрупольное излучения. Рассеяние фотонов.

10. Матрица плотности и теория измерений

Чистые и смешанные состояния. Матрица плотности. Частичный след. Среднее по смешанному состоянию. Временная эволюция матрицы плотности замкнутой системы. Селективные и неселективные измерения. Неравенство Белла и его нарушение. Квантовый эффект Зенона.

Список литературы

Основная

1. Ландау Л. Д. Теоретическая физика : в 10 томах. Том 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория : учебник / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под редакцией Л. П. Питаевского. - 6-е изд., стереотип. - Москва : Физматлит, 2021.
2. Белоусов Ю. М. Курс квантовой механики. Нерелятивистская теория: учеб. пособие для вузов / Ю. М. Белоусов ; М-во образования Рос. Федерации, Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т. - М. : Изд-во МФТИ, 2006.
3. Галицкий В. М. Задачи по квантовой механике : в 2 ч. Ч. 1: учеб. пособие для вузов / В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. - 3-е изд., испр. и доп. - М. : Едиториал УРСС, 2001.
4. Белоусов Ю. М. Задачи по теоретической физике : учебное пособие / Ю. М. Белоусов, С. Н. Бурмистров, А. И. Тернов. - 2-е изд. Долгосрочный : Интеллект, 2022.

Дополнительная

1. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики = Principles of quantum mechanics / П. А. М. Дирак ; пер. с 4-го англ. изд. Ю. Н. Демкова, Г. Ф. Друкарева ; под ред. и с предисл. В. А. Фока. - Москва : Наука, 1979.
2. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики : учебное пособие / Д. И. Блохинцев. - 7-е изд., стереотип. - Санкт-Петербург : Лань, 2022.
3. Киселев В. В. Квантовая механика : Курс лекций / В. В. Киселев. - 2-е изд., перераб. и доп. Москва : МЦНМО, 2023.
4. Тернов А. И. Основы релятивистской квантовой механики : [учебное пособие] / А. И. Тернов. - Москва : МЦНМО, 2024.
5. Аллилуев С. П. Квантовая теория сложного атома и квантовая теория излучения : учеб. пособие для вузов / С. П. Аллилуев ; М-во высш. и сред. спец. обр. РСФСР ; Моск. физ.-техн. ин-т (гос. ун-т) М. : МФТИ, 1984.

Методически рекомендованная

1. Барабанов А.Л. Лекции по квантовой механике: учеб. пособие : В 2-х частях. — Москва : МФТИ, 2015. 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://mgivanov.ru/knigi/q-ivanov.pdf>

3. *Иванов М.Г.* Квантовая механика. Часть 2. (Электронный конспект)
<https://mgivanov.ru/quant.html>
4. *Абрикосов А.А. м.л.* «Кванты» за ночь? Конспект-справочник версии 0.2. https://old.mipt.ru/education/chair/theoretical_physics/biblio/kvanty-za-noch-abrikosov/

УПРАЖНЕНИЯ

1. Разложите в ряд по степеням λ оператор $\hat{G} = (\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1}$.
2. Найдите функцию Грина свободной частицы в одномерном случае. Используя эту функцию, найдите энергию связанного состояния частицы в потенциале $V(x) = -(\hbar^2 \alpha_0/m)\delta(x)$.
3. Найдите решения уравнения Дирака для свободного электрона.
4. Покажите, что уравнение Дирака инвариантно относительно калибровочного преобразования электромагнитного поля. Как при этом преобразуется волновая функция?
- 5.* Выведите формулу для плотности тока вероятности электрона в магнитном поле.
6. Вычислите средние значения операторов $(\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{s}})$, $(\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{j}})$ и $(\hat{\mathbf{j}}\hat{\mathbf{s}})$ в состоянии $|l, s, j, m_j\rangle$.
7. Используя понижающий оператор $\hat{S}_-$, постройте собственные функции операторов $\hat{\mathbf{S}}^2$ и $\hat{S}_z$ двух бозонов со спинами $s_1 = s_2 = 1$ ($\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$, $\hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$).
8. Вычислите следующие матричные элементы для атома водорода:

$$\langle 2p|\hat{x}|1s\rangle, \quad \langle 2p|\hat{y}|1s\rangle, \quad \langle 2p|\hat{z}|1s\rangle.$$

Какие правила отбора они определяют?

9. То же, но для матричных элементов

$$\langle 2p|\hat{p}_x|1s\rangle, \quad \langle 2p|\hat{p}_y|1s\rangle, \quad \langle 2p|\hat{p}_z|1s\rangle.$$

10. Докажите справедливость коммутационного соотношения

$$\left[\hat{\mathbf{L}}^2, \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{d}_\alpha\right]\right] = 2\left(\hat{\mathbf{L}}^2\hat{d}_\alpha + \hat{d}_\alpha\hat{\mathbf{L}}^2\right) - 4\left(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{d}}\right)\hat{L}_\alpha,$$

где $\hat{d}_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, 3$) – составляющие оператора дипольного момента атома, а $\hat{\mathbf{L}}$ – оператор полного орбитального момента ($\hbar = 1$). Используя

это соотношение, выведите правила отбора по орбитальному моменту для дипольных переходов в атоме.

ЗАДАЧИ

1.^C Возмущённый осциллятор. Используя стационарную теорию возмущений, найдите поправки к уровням энергии линейного гармонического осциллятора под действием следующих возмущений:

$$(a) \hat{V} = \alpha \hat{x}, \quad (б) \hat{V} = A \hat{x}^3, \quad (в) \hat{V} = B \hat{x}^4.$$

2. Неточечное ядро. Найдите смещение уровня энергии основного состояния атома водорода, обусловленное конечным размером ядра. Примите, что ядро представляет собой равномерно заряженный по объёму шар радиуса r_0 .

3.^C Поляризуемость водорода. Вычислите электрическую поляризуемость атома водорода в основном состоянии.

4.^C Эффект Штарка. Исследуйте расщепление в однородном электрическом поле уровня энергии атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ (эффект Штарка). Как зависит энергия расщепления от величины поля? Найдите правильные волновые функции нулевого приближения.

5. Возбуждение при β -распаде. В результате β -распада ядра атома трития образуется ион ${}^3\text{He}^+$. Вычислите вероятности того, что этот ион окажется: (а) в основном состоянии; (б) на первом возбужденном уровне. Каково отношение этих вероятностей?

6. Нестационарное возмущение. Найдите вероятность перехода между состояниями дискретного спектра под действием возмущений:

$$(a) \hat{V}(t) = \hat{V}_0 e^{-t^2/\tau^2}, \quad (б) \hat{V}(t) = \frac{\hat{V}_0}{2} \left(1 + \frac{2}{\pi} \arctg \frac{t}{\tau} \right).$$

7.^C (He)пересечение уровней. Уровни энергии невозмущенной системы зависят от параметра λ и при некотором значении λ_0 два уровня энергии пересекаются: $E_1^{(0)}(\lambda_0) = E_2^{(0)}(\lambda_0)$. В начальный момент времени система находится на первом уровне в состоянии $\psi_1^{(0)}$. Определите вероятность найти систему в состоянии $\psi_2^{(0)}$ в момент времени t , если на систему накладывается постоянное возмущение $\hat{V}$, причем

$V_{11} = V_{22} = 0$, но $V_{12} = V_{21}^* \neq 0$.

8.^C Прецессия спина в циркулярно поляризованном поле. На мюон, покоящийся в однородном магнитном поле $\mathbf{B} \parallel z$, падает циркулярно поляризованное радиочастотное поле $\mathbf{b}(t) \perp \mathbf{B}$. Найдите зависимость от времени спиновой функции $|\chi(t)\rangle$ и поляризации мюона $\mathbf{P}(t) = \langle \chi(t) | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \chi(t) \rangle$, если в начальный момент $|\chi(0)\rangle = |+\rangle$.

9.* Фаза Берри. Покоящийся мюон помещен в магнитное поле $\mathbf{B}(t)$, медленно прецессирующее вокруг оси z , составляя с ней постоянный угол θ . Найдите зависимость от времени спиновой функции $|\chi(t)\rangle$ и поляризации $\mathbf{P}(t)$ мюона, если в начальный момент времени его состояние $|\chi(0)\rangle$ определяется положительной проекцией спина на направление магнитного поля. Покажите, что $\mathbf{P}(t)$ следует за направлением магнитного поля. Покажите, что за один полный оборот вектора магнитного поля спиновая функция приобретает фазу, пропорциональную телесному углу, который охватывает вектор $\mathbf{B}(t)$ (фаза Берри).

10. Уровни Ландау. Исследуйте стационарные состояния бесспиновой частицы с зарядом e и массой m в постоянном и однородном магнитном поле $\mathbf{B}$. Найдите уровни энергии (уровни Ландау) и кратности их вырождения, считая, что движение частицы ограничено большим объемом V . Решите задачу в декартовых и цилиндрических координатах.

11.^C Сверхтонкое расщепление. Найдите величину сверхтонкого расщепления основного состояния атома водорода. Вычислите длину волны излучения, испускающегося при переходе между расщепленными подуровнями.

12.* Тонкое расщепление. Найдите величину тонкого расщепления состояния атома водорода с главным квантовым числом n и орбитальным квантовым числом l . Выразите величину этого расщепления в атомных единицах энергии. Нарисуйте схему расщепленных уровней с $n = 3$.

13.^C Тожественные частицы. Найдите уровни энергии и волновые функции стационарных состояний двух невзаимодействующих тождественных частиц в потенциальном ящике

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

если этими частицами являются: (а) ферми-частицы со спинами $s = 1/2$; (б) бозе-частицы со спинами $s = 0$; (в) бозе-частицы со

спинами $s = 1$. Чему равна в каждом из этих случаев энергия основного состояния N частиц? **Определите кратности одночастичных уровней и всех полученных уровней энергии.**

14. Вариационный метод для водорода. Вычислите энергию основного состояния атома водорода из вариационного принципа. В качестве пробных функций возьмите:

(а) $\psi(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-r/a)$;

(б) $\psi(r) = (\pi b^2)^{-3/4} \exp(-r^2/2b^2)$.

Определите параметры a и b .

15.* Вариационный метод для гелия. Найдите, пользуясь вариационным методом, энергию основного состояния гелиеподобного атома с зарядом ядра Z . В качестве пробной функции возьмите:

(а) $\psi(r_1, r_2) \sim e^{-\alpha(r_1+r_2)}$;

(б) $\psi(r_1, r_2) \sim e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} + e^{-\beta r_1 - \alpha r_2}$.

В случае (б) воспользуйтесь численной процедурой минимизации среднего значения гамильтониана по параметрам α и β . Используя полученные результаты, установите, существует ли стабильный ион водорода H^- .

16. Правила Хунда. Пользуясь правилами Хунда, определите значения квантовых чисел L , S и J в основных состояниях следующих атомов: (а) кремния, (б) фосфора, (в) серы, (г) ванадия, (д) кобальта, (е) церия. Для случаев “а”, “б” и “в” найдите все термы. Запишите спектроскопические символы полученных состояний.

17.^С Силы Ван-дер-Ваальса. Используя второй порядок стационарной теории возмущений, определите, как зависит энергия взаимодействия от расстояния R между:

(а) атомом и ионом ($\sim 1/R^4$);

(б) двумя атомами ($\sim 1/R^6$).

18.^С Эффект Зеемана. Желтый дублет натрия соответствует оптическим переходам ${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$ и ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$. Исследуйте расщепление этого дублета в слабом и сильном магнитных полях. Сравните полученные картины расщепления линий натрия с расщеплениями синглетной линии кадмия, отвечающей переходу ${}^1D \rightarrow {}^1P$.

19. Рассеяние как возмущение. С помощью “золотого правила” Ферми получите формулу для дифференциального сечения упругого рассеяния в борновском приближении.

20. Борновское рассеяние. Найдите в борновском приближении

дифференциальные и полные сечения рассеяния частицы в полях:

$$(a) \quad V(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-\kappa r}, \quad (б) \quad V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

В случае (а) покажите, что в пределе $\kappa \rightarrow 0$ дифференциальное сечение принимает вид резерфордского сечения рассеяния заряженной частицы на отталкивающем кулоновском центре. Запишите критерии применимости борновского приближения для рассматриваемых случаев.

21. Рассеяние медленных частиц на сфере. Найдите полное сечение рассеяния медленных частиц на сферически-симметричной прямоугольной потенциальной яме и сферически-симметричном прямоугольном потенциальном барьере. В случае барьера исследуйте предельный случай непроницаемой сферы. В случае ямы определите, при каких соотношениях между глубиной U_0 и радиусом R ямы полное сечение намного превышает геометрическое значение πR^2 (резонансное рассеяние) и, наоборот, обращается в ноль (эффект Рамзауэра).

22.* Рассеяние быстрых частиц на сфере. Найдите полное сечение рассеяния быстрых частиц ($ka \gg 1$) на непроницаемой сфере радиуса a . Обсудите характер зависимости от угла рассеяния θ дифференциального сечения упругого рассеяния. Воспользуйтесь численной процедурой для установления зависимости фаз рассеяния δ_l от орбитального момента l для $ka = 10$.

23.^C Рассеяние тождественных частиц. Выразите дифференциальное сечение рассеяния:

(а) α -частиц на α -частицах,

(б) протонов на протонах

через амплитуду рассеяния двух точечных заряженных частиц друг на друге.

24. Распад ${}^8\text{Be}^*$. Может ли распасться на две α -частицы нестабильное ядро ${}^8\text{Be}^*$, находящееся в состоянии с полным угловым моментом $J = 1$?

25. Эффект Мессбауэра. Определите вероятность процесса, при котором ядро, связанное гармоническим потенциалом, останется в основном состоянии после испускания γ -кванта.

26.^C Спонтанное излучение. Найдите угловое распределение фотонов, излучающихся в переходе $|2p\rangle \rightarrow |1s\rangle$ атома водорода, и время

жизни $|2p\rangle$ состояния. Выразите это время в атомных единицах времени.

27. Нейтрон в магнитном поле. Нейтрон находится в однородном магнитном поле $\mathbf{B}_0 \parallel z$. Определите время жизни состояния с проекцией спина на направление поля $m_s = +1/2$. Получите численное значение времени жизни для $B_0 = 1$ кГс. Какова поляризация излучаемого фотона в зависимости от направления вылета?

28. Фотоэффект. Найдите сечение фотоэффекта на атоме водорода под действием плоской монохроматической волны с частотой ω для случая $\hbar\omega \gg I$, где I – потенциал ионизации атома. Сравните результаты вычислений при классическом и квантовом описаниях падающей электромагнитной волны.

Примерный срок сдачи первого задания: 19.10 – 24.10.2026 года.

Примерный срок сдачи второго задания: 14.12 – 19.12.2026 года.

СПРАВОЧНЫЙ МАТЕРИАЛ

Общие сведения

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = \hat{x}_\alpha \hat{p}_\beta - \hat{p}_\beta \hat{x}_\alpha = i\hbar \delta_{\alpha\beta} \quad \text{— в любом представлении!}$$

$$\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = 1,055 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$$

Уравнение Шрёдингера (общий случай!):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad \text{— временное,} \quad \hat{H} \psi = \mathcal{E} \psi \quad \text{— стационарное.}$$

Оператор эволюции (для гамильтониана не зависящего от времени):

$$\hat{U}_t = e^{-i \frac{\hat{H} t}{\hbar}}, \quad \hat{U}_t |\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0 + t)\rangle.$$

Типичный гамильтониан: $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$.

Гамильтониан для частицы в электромагнитном поле:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}, t))^2}{2m} + q \phi(\vec{r}, t).$$

$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$ — обобщённый импульс, $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}, t)$ — кинематический импульс (соответствует $m\vec{v}$).

Элементарный заряд: $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл = $4,8 \cdot 10^{-10}$ ед.СГС.

Массы электрона, протона, нейтрона (m_p, m_n в атомных ядрах другие):

$$m_e = 511 \text{ кэВ}, \quad m_p = 938,3 \text{ МэВ}, \quad m_n = 939,6 \text{ МэВ}.$$

Координатное и импульсное представления

$$\hat{x}_\alpha \psi(\vec{r}) = x_\alpha \psi(\vec{r}), \quad \hat{p}_\alpha \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \psi(\vec{r}),$$

$$\hat{x}_\alpha \psi(\vec{p}) = +i\hbar \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \psi(\vec{p}), \quad \hat{p}_\alpha \psi(\vec{p}) = p_\alpha \psi(\vec{p}),$$

$$\psi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{r}_0 \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \quad \psi_{\vec{p}_0}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \vec{p}_0 \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}_0),$$

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{e^{\frac{i(\vec{r}, \vec{p})}{\hbar}}}{(2\pi)^{3/2}} = \underbrace{\langle \vec{r} |}_{\langle \psi_{\vec{r}} |} \underbrace{|\vec{p}\rangle}_{\psi_{\vec{p}}},$$

$$\psi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int \frac{e^{-\frac{i(\vec{r}, \vec{p})}{\hbar}}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad \psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle = \int \frac{e^{\frac{i(\vec{r}, \vec{p})}{\hbar}}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\vec{p}) d^3\vec{p}.$$

$\psi(\vec{p})$ — фурье-образ $\psi(\vec{r})$, можно было бы обозначить $\tilde{\psi}(\vec{p})$, но физики считают, что аргумента $\vec{p}$ достаточно.

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* = \int \phi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r} = \int \phi^*(\vec{p}) \psi(\vec{p}) d^3\vec{p}.$$

Гармонический осциллятор

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \hbar\omega \left(\underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega}}_{\frac{\hat{P}^2}{2}} + \underbrace{\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}}_{\frac{\hat{Q}^2}{2}} \right) = \hbar\omega (\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2}),$$

$$\hat{b} = \frac{\hat{Q} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{b}^+ = \frac{\hat{Q} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}, \quad [\hat{b}, \hat{b}^+] = 1, \quad \hat{P} = -i\frac{\partial}{\partial Q},$$

$$\underbrace{\hat{H} |n\rangle}_{|\psi_n\rangle} = \mathcal{E}_n |n\rangle, \quad \langle n_1 | n_2 \rangle = \delta_{n_1 n_2}, \quad \mathcal{E}_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\hat{b}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{b}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,$$

$$\hat{b}^+ \hat{b}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \hat{b} \hat{b}^+|n\rangle = (n+1)|n\rangle, \quad |0\rangle = |\psi_0\rangle \neq 0.$$

Моменты импульса

$$\hat{j}_\alpha = \hat{l}_\alpha + \hat{s}_\alpha, \quad \hat{\vec{l}} = \frac{1}{\hbar} [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}], \quad \hat{s}_\alpha — \text{спин (матрицы } (2s+1) \times (2s+1))$$

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 = \hat{j}_- \hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z, \quad \hat{j}_\pm = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y = \hat{j}_\mp^\dagger,$$

$$\begin{aligned}
[\hat{j}_\alpha, \hat{j}_\beta] &= i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{j}_\gamma, \quad [\hat{j}^2, \hat{j}_\alpha] = 0, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hat{j}_\pm, \quad [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_z, \\
\hat{j}^2|j, m_j\rangle &= j(j+1)|j, m_j\rangle, \quad \hat{j}_z|j, m_j\rangle = m_j|j, m_j\rangle, \\
j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots, \quad m_j = \underbrace{-j, -j+1, \dots, +j}_{2j+1 \text{ значение}},
\end{aligned}$$

Для орбитального момента (для $\vec{l}$) j всегда целое и обозначается l , для спинового часто (электроны, протоны, нейтроны, нейтрино и др.) $j = \frac{1}{2}$ и обозначается s .

$$\begin{aligned}
\hat{j}_+|j, m_j\rangle &= \frac{\sqrt{(j+m+1)(j-m)}}{\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j+1)}}|j, m_j+1\rangle, \\
\hat{j}_-|j, m_j\rangle &= \frac{\sqrt{(j-m+1)(j+m)}}{\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j-1)}}|j, m_j-1\rangle.
\end{aligned}$$

Спин $\frac{1}{2}$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$\hat{s}_\alpha = \frac{1}{2}\sigma_\alpha, \quad \sigma_\alpha\sigma_\beta = \hat{1}\delta_{\alpha\beta} + i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma.$$

$$\chi_+ = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \chi_- = \underbrace{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle}_s, \underbrace{|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle}_{m_s} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle = |\downarrow\rangle.$$

Орбитальный момент

$$\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad \hat{l}_\pm = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right),$$

$$\hat{l}_x = -i \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right), \quad \hat{l}_y = -i \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right),$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \underbrace{\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}}_{\Delta_{\theta\varphi} = -\hat{l}^2}.$$

Сферические гармоники

$|l, m_l\rangle$ в координатном представлении: $Y_{lm_l}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m_l \rangle$ (фазовые множители выбраны согласно курсу Ландау и Лифшица)

$$\langle l', m'_l | l, m_l \rangle = \int Y_{l'm'_l}^*(\theta, \varphi) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \underbrace{d\Omega}_{\sin \theta d\theta d\varphi} = \delta_{l'l} \delta_{m'_l m_l}.$$

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10}(\theta, \varphi) = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta), \quad Y_{2,\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm 2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}.$$

Атом водорода

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \text{ \AA}, \quad \mathcal{E}_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{me^4}{\hbar^2} = -\frac{1}{2n^2} \frac{e^2}{a_B} = -\frac{\text{Ry}}{n^2},$$

$$\text{Ry} = 13,6 \text{ эВ}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad l = 0, 1, \dots, n-1, \quad m_l = \underbrace{-l, \dots, +l}_{2l+1 \text{ значение}}$$

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = Y_{lm_l}(\theta, \varphi) R_{nl}(r).$$

Уровни энергии вырождены по l, m_l, m_s ($m_s = \pm \frac{1}{2}$) с учётом спина кратность вырождения — $2n^2$.

Радиальные волновые функции (обезразмеренные)

$$R_{10} = 2e^{-r}, \quad R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-r/2} (1 - \frac{r}{2}), \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-r/2} r.$$

Буквенные обозначения для орбитального момента l :

$$0 = s, \quad 1 = p, \quad 2 = d, \quad 3 = f, \quad 4 = g, \quad \text{далее по алфавиту.}$$

Квазиклассика

$p(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}$ — квазиклассический импульс, не оператор!

Критерий применимости: $\left| \frac{\partial \lambda}{\partial x} \right| = \left| \frac{\hbar p'}{p^2} \right| \ll 1, \quad \lambda(x) = \frac{\hbar}{p(x)}.$

Квазиклассическая волновая функция:

$$\psi(x) = \frac{c_+}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int^x p(x_1) dx_1 \right) + \frac{c_-}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x_1) dx_1 \right)$$

Правило квантования Бора–Зоммерфельда

$$\Gamma(E_n) = \oint p(x) dx = 2 \int_a^b p(x) dx = 2\pi\hbar(n + \epsilon),$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, \quad V(a) = V(b) = E_n.$$

ϵ зависит от поведения потенциала вблизи точек поворота a и b . Обычно (потенциал растёт плавно) $\epsilon = \frac{1}{2}$, бесконечновысокая стенка с одной стороны — $\epsilon = \frac{3}{4}$, бесконечновысокие стенки с обеих сторон — $\epsilon = 1$.

$\Gamma(E_n)$ — фазовая площадь. $\Delta\Gamma = \Gamma(E_{n+1}) - \Gamma(E_n) = 2\pi\hbar$.

Проницаемость потенциального барьера (вероятность туннелирования, формула Гамова)

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx\right) \ll 1 \quad \text{— внутри барьера } p(x) \text{ мнимое!}$$

Стационарная теория возмущений

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}, \quad \hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = \mathcal{E}_n^{(0)} \psi_n^{(0)}, \quad \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = \delta_{mn}.$$

$$\hat{H} \psi_n = \mathcal{E}_n \psi_n, \quad \langle \psi_n^{(k>0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 0.$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \varepsilon \psi_n^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_n^{(2)} + \dots, \quad \mathcal{E}_n = \mathcal{E}_n^{(0)} + \varepsilon \mathcal{E}_n^{(1)} + \varepsilon^2 \mathcal{E}_n^{(2)} + \dots$$

$$\mathcal{E}_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle, \quad \mathcal{E}_n^{(2)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)}},$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} |\psi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)}}.$$

Для вырожденного спектра нужны *правильные волновые функции нулевого приближения* ϕ_{nk} ($\hat{V}_n$ надо диагонализировать).

$$\hat{H}_0 \psi_{ni}^{(0)} = \mathcal{E}_n^{(0)} \psi_{ni}^{(0)}, \quad \hat{P}_n = \sum_i |\psi_{ni}^{(0)}\rangle \langle \psi_{ni}^{(0)}|, \quad \hat{V}_n = \hat{P}_n \hat{V} \hat{P}_n.$$

$$V_{ij}^n = \langle \psi_{ni}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{nj}^{(0)} \rangle, \quad \phi_{nk}^{(0)} = \sum_j c_{nkj} \psi_{nj}^{(0)},$$

$$\det(V_{ij}^n - \mathcal{E}_{nk}^{(1)} \delta_{ij}) = 0, \quad \sum_i (V_{ij}^n - \mathcal{E}_{nk}^{(1)} \delta_{ij}) c_{nkj} = 0$$

Представление взаимодействия

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad \hat{U}_0(t) = e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}, \quad \hat{A}_B(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{A}_B(t) \hat{U}_0(t).$$

$$\psi_B(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \psi_B(t) = \underbrace{\hat{U}_0^\dagger(t) \hat{U}(t)}_{\hat{U}_B(t)} \psi_B(0), \quad i\hbar \frac{\partial \psi_B}{\partial t} = \hat{V}_B(t) \psi_B.$$

Нестационарная теория возмущений (первый порядок)

$$\hat{U}_B^{(1)}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_B(t_1) dt_1.$$

$$\hat{H}_0|i\rangle = E_i|i\rangle, \quad \hat{H}_0|f\rangle = E_f|f\rangle, \quad (\hat{H}_0 + \hat{V}(t = +\infty))|f_1\rangle = (E_f + \delta E_f)|f_1\rangle.$$

$$\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar}(E_f - E_i).$$

Две постановки задачи: (а) возмущение включилось и выключилось, найти вероятность перехода между состояниями $|i\rangle$ и $|f\rangle$, (б) возмущение включилось и осталось включённым, найти вероятность перехода между состояниями $|i\rangle$ и $|f_1\rangle$.

$$p_{fi}^{(1)} = \left| \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{fi}(t_1 - t_0)} \frac{\partial V_{fi}(t_1)}{\partial t_1} dt_1 \right|^2, \quad f \neq i \text{ (оба случая)}.$$

Золотое правило Ферми (вероятность перехода в единицу времени в непрерывный спектр) (а) для постоянного возмущения $\hat{V}$

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) d\nu_f$$

(б) для периодического возмущения $\hat{V}(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{i\omega t}$

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d\nu_f + \frac{2\pi}{\hbar} |F_{if}|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) d\nu_f.$$

Заряд во внешнем электромагнитном поле

Добавить потенциальную энергию в скалярном потенциале и удлинить импульсы:

$$\hat{H}_0 \rightarrow \hat{H}_0 + q\varphi(t, \mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathbf{P}} + \frac{q}{c} \mathbf{A}(t, \mathbf{r}).$$

$\hat{\mathcal{P}}$ — кинематический импульс ($m\mathbf{v}$ в нерелятивистском случае),
 $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$ — обобщённый (канонический) импульс.

Сложные атом

Терм

$^{2S+1}L_J$, например 5P_3 означает $S = 2$, $L = 1$, $J = 3$.

Для сложного атома энергия электрона лучше нумеруются суммой $N = n + l = n_r + 2l + 1$. При равном значении $N = n + l$ меньшую энергию имеет состояние с меньшим n . (Этим объясняется периодический закон.)

Для нахождения основного состояния:

Правила Хунда:

- (1) при заданной электронной конфигурации максимизируем S ,
- (2) потом при заданном S максимизируем L .

Правило Ланде (иногда 3-е правило Хунда): если заполнено до половины оболочки, то $J = |L - S|$, иначе $J = L + S$.

Теория рассеяния

$$\psi(r \rightarrow \infty) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi).$$

$$d\sigma = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

Амплитуда рассеяния в борновском приближении:

$$f_{\text{Борн}}(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r},$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}' = |\mathbf{k}| (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$$

Условия применимости борновского приближения:

$$ka \lesssim 1: \quad V \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2} \right)^{-1} \ll 1; \quad ka \gg 1: \quad \frac{1}{ka} V \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2} \right)^{-1} \ll 1.$$

Здесь V — характерный потенциал, a — характерное расстояние.

Оптическая теорема (связывает полное сечение всех процессов с амплитудой упругого рассеяния вперёд):

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0).$$

Теория излучения

Векторный потенциал излучения в ящике объёма V (гайзенберговское представление для свободного поля или представление взаимодействия для поля, взаимодействующего с веществом)

$$\hat{\mathbf{A}}_{\Gamma,V}(t, \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} + \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+ e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \right).$$

В дипольном приближении

$$\hat{\mathbf{A}} \approx \hat{\mathbf{A}}_a \approx \sum_{\omega_{\mathbf{k}} \approx \omega_{\text{пер.}}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda} + \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+ \right).$$

Вероятность спонтанного дипольного излучения в единицу времени

полная: $W_{fi} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{if}^3}{\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2$, по углам: $dW_{fi} = \frac{\omega_{if}^3}{2\pi\hbar c^3} |(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*, \mathbf{d}_{fi})|^2 d\Omega$.

Правила отбора по чётности:

$$P_f = -P_i,$$

для базиса $|S, M_S; L, M_L\rangle$:

$$\Delta S = \Delta M_s = 0, \quad \Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta M_L = 0, \pm 1;$$

для базиса $|S, L; J, M_J\rangle$:

$$\Delta S = 0, \quad \Delta L = 0, \pm 1, \quad \Delta J = 0, \pm 1, \quad \Delta M_J = 0, \pm 1.$$

Переход $L_i = L_f = 0$ запрещён.

Подписано в печать 17.06.2025. Формат $60 \times 84^1/16$.

Усл. печ. л. 0,75. Уч.-изд. л. 0,6. Тираж 60экз. Заказ № .

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

тел.: +7(495)408-58-22, e-mail: rio@mipt.ru

Отдел оперативной полиграфии «Физтех-полиграф»

141700, Моск. обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

тел.: +7(495)408-84-30, e-mail: polygraph@mipt.ru