**Квантова механіка**

**(групи експериментаторів – 30 год. лекцій)**

***Тема 1*. Експериментальні передумови створення квантової механіки – (2 год.)**

Досліди Резерфорда та ядерна модель атома. Серіальні закономірності атомних спектрів. Постулати Бора. Досліди Франка та Герца. Зовнішній фотоефект та ефект Комптона. Досліди з дифракції електронів. Гіпотеза де Бройля. Ідея Планка про квантування енергії осцилятора при випромінюванні та поглинанні електромагнітних хвиль.

***Тема 2*. Постулати квантової механіки – (4 год. )**

Роль вимірювання при дослідженні квантових систем. Квантовий постулат Бора. Оператори фізичних величин. Власні значення та власні функції оператора.

Хвильова функція системи. Рівняння Шрьодінгера. Оператор Гамільтона. Фізичний зміст хвильової функції. Рівняння неперервності.

Принцип суперпозиції квантових станів.

Явний вигляд операторів фізичних величин. Правила комутації операторів. Власні функції і власні значення операторів координати, імпульсу, проекції моменту імпульсу (кутового моменту) і квадрата кутового моменту. Орбітальне (азимутальне) і магнітне квантові числа. Парність стану.

Зміна середніх значень фізичних величин з часом. Квантові дужки Пуассона. Закони збереження в квантовій механіці. Зв’язок квантової і класичної механіки.

***Тема 3.* Співвідношення невизначеностей Гайзенберга – (2 год.)**

Умови одночасного передбачуваного (без дисперсії) вимірювання фізичних величин. Комутативність операторів фізичних величин. Співвідношення невизначеностей Гайзенберга для довільних некомутуючих операторів. Співвідношення невизначеностей для проєкцій імпульсу та координат, енергії та часу. Принцип доповнюваності Бора. Корпускулярно-хвильовий дуалізм.

***Тема 4*. Загальні властивості руху в потенціальному полі - (2 год.)**

Стаціонарне рівняння Шрьодінгера. Вільна частинка. Прямокутна потенціальна яма нескінченої та скінченої глибини. Проходження частинок через потенціальний бар’єр довільної форми. Коефіцієнт прозорості бар’єру.

***Тема 5.* Гармонічний осцилятор - (2 год.)**

Гармонічний осцилятор: а) хвильовий підхід; б) формалізм вторинного квантування, оператори народження і знищення-?, поняття вакуумного стану; в) когерентні стани.

***Тема 6*. Частинка у центрально-симетричному полі – (2 год.)**

Радіальна і кутова частини стаціонарного рівняння Шрьодінгера для частинки у центрально-симетричному полі. Орбітальне та магнітне квантові числа. Умови нормування хвильової функції для центрально-симетричного поля. Асимптотична поведінка радіальної частини хвильової функції на малих відстанях від ядра.

***Тема 7*. Електрон у кулонівському полі (воднеподібний іон) - (2 год.)**

Радіальна частина хвильової функції електрона в кулонівському полі. Головне квантове число. Енергія електрона у воднеподібному іоні. Кутовий та радіальний розподіл електронної густини в кулонівському полі. Полярні діаграми. Атомні орбіталі. Електронна оболонка та підоболонка. Електронна конфігурація.

***Тема 8*. Основи теорії збурень – (2 год.)**

Збурення, що не залежить від часу (невироджений та вироджений випадки). Поправки до хвильової функції та енергії системи у першому та другому порядку теорії збурень.

Ефект Штарка для атома водню. Поправка до енергії першого збудженого стану у першому порядку теорії збурень-?

Збурення, що залежать від часу. Золоте правило Фермі, його застосування.

***Тема 9*. Рівняння Дірака** **– (2 год.)**

Передбачення існування спіну, античастинок та фізичного вакууму. Релятивістська теорія атому водню, тонка і надтонка структура спектру атому водню, лембівський зсув у спектрі як прояв фізичного вакууму. Мюонний водень.

***Тема 10*. Спін електрона. Симетрія хвильової функції системи частинок. Обмінна взаємодія – (4 год.)**

Досліди Штерна і Герлаха. Спін електрона. Проєкція спіну на вибраний напрямок. Ферміони та бозони. Оператори спіну. Матриці Паулі. Гіромагнітне відношення для електрона. Магнітний момент електрона, магнетон Бора для електрона.

Принцип нерозрізненості однакових частинок. Симетрія хвильових функцій. Хвильова функція системи невзаємодіючих бозонів. Хвильова функція системи невзаємодіючих ферміонів. Детермінанти Слетера. Принцип Паулі. Обмінна взаємодія.

Атом гелію. Поправки до енергії основного стану (1s2) та першого збудженого стану (1s12s1) у першому порядку теорії збурень. Триплетні та синглетні стани. Обмінна взаємодія. Кулонівські та обмінні інтеграли. Орто- та парагелій.

***Тема 11*. Наближені методи опису багатоелектронних систем – (4 год.)** Варіаційний принцип. Метод Хартрі. Визначення одночастинкових хвильових функцій та енергій електронів в багатоелектронному атомі. Самоузгоджене поле. Потенціал самоузгодженого поля. Процедура розв’язку рівнянь Хартрі.

Врахування симетрії хвильової функції. Метод Хартрі-Фока. Обмінні інтеграли. Наближення ефективного обмінного потенціалу Слетера. Застосування методу Хартрі-Фока до опису системи електронів у кристалах та квантово-хімічних розрахунків.

Метод функціоналу густини (DFT – density functional theory). Теореми Хоенберга-Кона. Рівняння та потенціал Кона-Шема. Наближення локальної густини. Застосування DFT для розрахунку електронної структури конденсованої речовини та молекул.

Деякі програмні пакети, які реалізують методи Хартрі-Фока та DFT - GАMESS, ORCA, Gaussian**,** Accelrys Materials Studio (AMS), області їх застосування.

***Тема 12*.** **Теорія розсіяння – (2 год.)**

Пружне і непружне розсіяння. Борнівське наближення. Переріз розсіяння. Структурний фактор.