

# Конспект з квантової механіки

Андрій Жугаєвич (azh@lanl.gov)

14 лютого 2012 р.

<b>I</b>	<b>Принципи квантової механіки</b>	<b>4</b>
1	Математичний апарат квантової механіки . . . . .	4
2	Фізичні принципи квантової механіки . . . . .	5
<b>II</b>	<b>Одночастинкове рівняння Шредингера</b>	<b>8</b>
3	Одночастинкове рівняння Шредингера . . . . .	8
3.1	Координатне представлення . . . . .	8
3.2	Стационарне рівняння Шредингера . . . . .	8
3.3	Імпульсне представлення . . . . .	10
3.4	Гаусів пакет . . . . .	10
4	Точні розв'язки рівняння Шредингера у просторі довільної розмірності . . . . .	10
4.1	Вільна частинка . . . . .	10
4.2	Потенціальний ящик . . . . .	11
4.3	Сферично симетричний потенціал . . . . .	11
4.4	Гармонічний осцилятор . . . . .	12
5	Одновимірне рівняння Шредингера: спектр . . . . .	13
5.1	Прямокутна яма . . . . .	13
5.2	Дельта-яма . . . . .	14
5.3	Взаємодія двох потенціальних ям . . . . .	15
5.4	Кусково-інтегровні потенціали . . . . .	15
6	Одновимірне рівняння Шредингера: проходження бар'єру . . . . .	16
6.1	Загальна теорія . . . . .	16
6.2	Прямокутний бар'єр . . . . .	17
6.3	Резонансне тунелювання і квазістационарні рівні . . . . .	18
7	Частинка в центральному полі: спектр . . . . .	18
7.1	Оператор моменту імпульсу . . . . .	18
7.2	Сферична яма . . . . .	19
7.3	Кулонівський потенціал . . . . .	19
8	Частинка в центральному полі: задача розсіювання . . . . .	20
8.1	Загальні поняття . . . . .	20
8.2	Розсіювання на сфері . . . . .	21
9	Частинка в періодичному потенціалі . . . . .	21
9.1	Загальна теорія . . . . .	21
9.2	Модель Кроніга-Пені . . . . .	23
10	Спін . . . . .	24
<b>III</b>	<b>Наближені методи</b>	<b>26</b>
11	Квазікласичне наближення . . . . .	26
12	Варіаційний метод . . . . .	27
13	Стационарна теорія збурень . . . . .	28
14	Нестационарна теорія збурень . . . . .	29
14.1	Обмежені в часі збурення . . . . .	30
14.2	Збурення з обмеженою зміною в часі . . . . .	30
14.3	Періодичне збурення. Нерезонансний випадок . . . . .	31
14.4	Періодичне збурення. Випадок резонансу . . . . .	32
14.5	Переходи в неперервному спектрі . . . . .	32

<b>IV Багаточастинкові системи</b>	<b>33</b>
15 Багаточастинкові системи: загальна теорія . . . . .	33
16 Система електронів . . . . .	34
16.1 Детермінант Слейтера . . . . .	34
16.2 Вторинне квантування: ортонормований базис . . . . .	35
16.3 Вторинне квантування: неортогональний базис . . . . .	37
16.4 Спін-орбіталі . . . . .	37
16.5 Метод Хартрі–Фока . . . . .	39
16.6 Метод Хартрі–Фока у випадку незалежного від спіну гамільтоніану . . . . .	40
16.7 Метод Хартрі–Фока для спарованих електронів . . . . .	41
<b>V Чисельні методи</b>	<b>43</b>
17 Чисельні методи: загальна теорія . . . . .	43
18 Метод лінійної комбінації базисних функцій . . . . .	43
18.1 Базис гаусових орбіталей . . . . .	44
18.2 Метод лінійної комбінації атомних орбіталей в методі Хартрі–Фока . . . . .	45
18.3 Наближення нульового диференційного перекриття . . . . .	46
<b>VI Фізичні моделі</b>	<b>48</b>
19 Взаємодія квантових систем з електромагнітним полем . . . . .	48
19.1 Рівняння Паулі . . . . .	48
19.2 Випромінювання і поглинання електромагнітних хвиль . . . . .	48
20 Двоатомна молекула . . . . .	49
21 Дворівнева система . . . . .	50
21.1 Осциляції Рабі . . . . .	50
21.2 Формула Ландау–Зенера . . . . .	52
Література . . . . .	54
<b>Література</b>	<b>54</b>

# Задачі до курсу квантової механіки

Андрій Жугаєвич (zhugayevych@univ.kiev.ua)

9 березня 2011 р.

1	Математичний апарат квантової механіки . . . . .	1
3	Задачі загального характеру . . . . .	1
4	Рух вільної частинки . . . . .	2
5	Одновимірне рівняння Шредингера: спектр . . . . .	2
6	Одновимірне рівняння Шредингера: проходження бар'єру . . . . .	3
7	Тривимірне рівняння Шредингера: спектр . . . . .	4
8	Частинка в центральному полі: задача розсіювання . . . . .	5
9	Частинка в періодичному потенціалі . . . . .	5
12	Квазікласичне наближення . . . . .	5
13	Варіаційний метод . . . . .	6
14	Стаціонарна теорія збурень . . . . .	6
15	Нестационарна теорія збурень . . . . .	7
20	Метод лінійної комбінації базисних функцій . . . . .	7
22	Взаємодія квантових систем з електромагнітним полем . . . . .	7
24	Двоатомна молекула . . . . .	7
	Розв'язки . . . . .	8

## §1. Математичний апарат квантової механіки

1. (3) Знайти оператори, спряжені до операторів  $x$ ,  $\frac{d}{dx}$ ,  $x \frac{d}{dx}$ ,  $\frac{d^n}{dx^n}$ ,  $\exp(a \frac{d}{dx})$ .
2. (5) Знайти комутатори: а)  $[r_i, p_j]$ ,  $[p_i, p_j]$ ; б)  $[L_i, L_j]$ ,  $[r_i, L_j]$ ,  $[p_i, L_j]$ ,  $[L^2, \mathbf{L}]$ ,  $[p^2, \mathbf{L}]$ ; в)  $[U(\mathbf{r}), \mathbf{p}]$ ,  $[U(r), \mathbf{L}]$ .
3. (5) Знайти власні значення і власні функції операторів імпульсу і кінетичної енергії.
4. (10) Показати, що оператор трансляції має вигляд  $\exp(a \frac{d}{dx})$ . Довести його унітарність. Знайти власні значення і власні функції. Узагальнити на багатовимірний випадок.
5. (5) Нехай  $(E, \psi)$  – власний елемент оператора  $H$ , який залежить від параметра  $\lambda$ . Показати, що  $\partial E / \partial \lambda = \langle \psi | \partial H / \partial \lambda | \psi \rangle$ .

## §3. Задачі загального характеру

1. (10) Довести, що для гамільтоніану  $H = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{x})$  виконується співвідношення  $\langle n | \mathbf{p} | n' \rangle = i m \omega_{nn'} \langle n | \mathbf{x} | n' \rangle$ .
2. (10) Показати, що сила з якою частинка діє на вертикальну стінку, розташовану в деякій точці, дорівнює  $|\psi|^2 \delta U$ , де  $\delta U$  – стрибок потенціалу в цій точці. Показати також, що у випадку нескінченно високої стінки цей вираз зведеться до  $\frac{\hbar^2}{2m} \psi'^2$ .
3. (3) Показати, що потік імовірності для частинки в стані з хвильовою функцією  $A\psi_1 + B\bar{\psi}_1$  є сумою двох протилежних потоків.
4. (3) Показати, що в одновимірному випадку потік імовірності для частинки в стаціонарному стані не залежить від координати.
5. (5) Оцінити характерні енергії електрона в атомі за розміром останнього.
6. (20) Для двох заданих станів  $\psi_i$  і  $\psi_f$  знайти незалежний від часу гамільтоніан, який переводить один стан у другий за найшвидший час, за умови, що різниця між найбільшим і найменшим власними значеннями гамільтоніану дорівнює  $\hbar\omega$ .