МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет"

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ

Декан ФЕН НГУ, профессор

_______________ Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

Физика (квантовая механика) для химиков

Модульная программа лекционного курса, семинаров, коллоквиумов и самостоятельной работы студентов

Курс 2–й, IV семестр

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов II курса факультета естественных наук, направление «химия». В состав пособия включены: программа курса лекций, структура курса и правила ИКИ, программа коллоквиумов по квантовой механике, методические указания к выполнению заданий. Кроме того, приведен набор задач для самостоятельной работы студентов с использованием учебной литературы и персонального компьютера и даны примеры вариантов контрольных работ, коллоквиумов и задач, предлагавшихся на экзамене за прошлые годы.

Составители

проф. Пуртов П. А., доц. Замураев В. П.

УМК подготовлен в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ»

Содержание

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Физика (Квантовая механика)» является частью математического и естественнонаучного цикла ООП (базовая часть) по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», квалификация (степень) «бакалавр». Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой Общей физики.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с квантовомеханическими явлениями, областями их экспериментального и технического применения, в том числе и в смежных областях знания и приборостроения и иного промышленного производства (в химии, медицине, биологии и т. д.).

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника общекультурных компетенций: ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9, ОК-13, ОК-14.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, семинарские занятия, контрольные работы, коллоквиумы, домашние задания, консультации, сдача экзаменов, самостоятельная работа студента.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль. Прохождение студентами курса проходит с использованием системы ИКИ (индивидуального кумулятивного индекса). В течение семестра студенты проходят следующие контрольные точки: пишут две контрольные работы, сдают 6 коллоквиумов, готовят и сдают шесть домашних заданий. Домашние задания нацелены на то, чтобы привить студенту навыки самостоятельного изучения физических явлений. Кроме того, преподаватель оценивает уровень подготовки студента к каждому семинарскому занятию. Все контрольные точки оцениваются баллами, и к концу семестра каждый студент набирает некоторую сумму баллов, которая при преодолении заранее определенного барьера (см. стр. 23 и далее) может привести к получению им итоговой оценки «автоматом» (от «удовлетворительно» до «отлично»). Не прохождение обязательной контрольной точки студентом является причиной не допуска к экзамену, и как следствие, его не аттестации по всему курсу.

Итоговый контроль. Итоговую оценку за учебный семестр студент может получить на письменном экзамене в конце семестра, где он имеет возможность либо повысить оценку, полученную им «автоматом», либо получить любую положительную (или неудовлетворительную) оценку в случае отсутствия у него «оценки-автомата» по результатам системы ИКИ.

Общая трудоемкость дисциплины «Физика» (за четыре семестра) составляет 18 зачетных единиц. Всего 648 академических часов.

Программой дисциплины «Физика (Электродинамика)» предусмотрены 48 часов лекционных, 36 часов семинарских занятий, 20 часов прохождения контрольных точек в течение семестра (включая домашние задания), 72 часа самостоятельной работы студентов и 4 часа на экзамен, итого 180 часов, 5 зачетных единиц.

1. Цели освоения дисциплины

Курс «Физика (Квантовая механика)» является одним из разделов четырех семестрового курса общей физики для студентов специальности «Химия» ФЕН НГУ. Задачами этого большого курса являются: овладение химиками фундаментальными основами части естествознания, отнесенными к изучаемому разделу физики; подготовка к восприятию последующих общих и специальных курсов, требующих знаний физики. Исходя из этих задач, в своем построении курс «Физика (Квантовая механика)» опирается на классическую учебную литературу с выверенными подходами.

На лекциях даются основные представления о квантовомеханических явлениях, областях их экспериментального и технического применения, в том числе и в смежных областях знания и приборостроения и иного промышленного производства (в химии, медицине, биологии и т. д.). На семинарских занятиях студенты учатся использовать методологию предмета для решения различных задач теоретического плана, для выработки у студентов умения формулировать постановку задач, их физическое и математическое описание и последующее решение. В курсе лекций приводятся данные о физических свойствах изучаемых систем и явлений, что позволяет студенту составить представление об общих принципах их влиянии на процессы в твердых телах, электрохимии, органической и неорганической химии, включая экологические аспекты.

<u>Основной целью освоения дисциплины является</u> усвоение студентами основных положений квантовой механики, умение пользоваться ими и на этой основе – понимания студентами сложных физических задач и проблем.

По окончании изучения указанной дисциплины студент должен

- **иметь представление о том, что лежит в основе теории квантовой механики и ориентироваться в соответствующей учебной и научной литературе;**
- **знать основные понятия и законы квантовой механики и методы решения задач;**
- **уметь решать сравнительно несложные задачи по квантовой механике.**

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Физика (Квантовая механика)» является частью математического и естественнонаучного цикла ООП, базовая часть, по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», уровень подготовки – «бакалавр».

Дисциплина «Физика (Квантовая механика)» опирается на следующие дисциплины данной ООП:

- основные главы элементарной физики;
- математический анализ;
- высшая алгебра;
- теория вероятности и математическая статистика;
- физика (механика);
- физика (электродинамика);
- практикум по физической оптике;
- аналитическая химия;
- органическая химия;
- биохимия;
- основы компьютерной грамотности (навыки обращения с ПК).

Результаты освоения дисциплины «Физика (Квантовая механика)» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- физика (термодинамика и статистическая физика);
- атомный практикум;
- оптическая спектроскопия;
- химическая термодинамика;
- строение вещества;
- химия твердого тела;
- общая химическая технология;
- химическая кинетика;
- теоретическая электрохимия и инструментальные метода анализа.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Физика (Квантовая механика)»:

- **общекультурные компетенции:**

  - использование основных законов естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применение методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования **(ОК-6)**;
  - умение работать с компьютерами на уровне пользователя и способность применять навыки работы с компьютером как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности **(ОК-7)**;
  - способность понимать сущность и значение информации в

развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны **(ОК-8)**;

- владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыки работы с компьютером как средством управления информацией **(ОК-9)**;
- настойчивость в достижении цели с учетом моральных и правовых норм и обязанностей (**ОК-13**);
- умение работать в коллективе, готовность к сотрудничеству с коллегами, способность к разрешению конфликтов и социальной адаптации **(ОК-14)**.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- <u>иметь представление</u> о наиболее известных квантовомеханических явлениях;
- <u>знать</u> понятия и законы, определяющие квантовомеханические процессы;
- <u>уметь</u> предсказывать и объяснять наиболее вероятные направления развития процессов с применением современных физико-химических методов.
- <u>быть готовым</u> к педагогической деятельности в общеобразовательных учреждениях.

4. Структура и содержание дисциплины

Программой дисциплины «Физика (Электродинамика)» предусмотрены 48 часов лекций, 36 часов семинаров, 20 часов прохождения контрольных точек, 72 часа самостоятельной работы и 4 часа на экзамен, итого 180 часов, 5 зачетных единиц.

№ п/п	Наименование разделов и тем	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)						Формы текущего контроля успеваемости
		Лекция	Семинары	Контр. работа	Коллоквиумы	Самост. работа	Экзамен	
1	Соотношение неопределенности. Волновая функция. Операторы, собственные функции, собственные значения.	10	6		2	5		Коллоквиум
2	Физический смысл собственных значений операторов. Решение стационарного уравнения Шредингера.	10	4		2	4		Коллоквиум
3	Теория возмущений.	10	6	4	2	7		Коллоквиум **Контрольная работа**
4	Матричная механика и теория представлений.	10	4		2	5		Коллоквиум
5	Квантовый момент импульса. Атом водорода.	12	6		2	5		Коллоквиум
6	Спин. Сложение моментов. Влияние квантового момента импульса и спина на	12	6	4	2	7		Коллоквиум **Контрольная работа**

	строение атомов и молекул.							
						27	4	**Экзамен**
	Итого за курс	**64**	**32**	**8**	**12**	**60**	**4**	
	Всего	**180**						

Программа курса лекций

1. Соотношение неопределенности. Волновая функция. Операторы, собственные функции, собственные значения.

1.1. Противоречие опытных данных по микроскопическим объектам представлениям классической механики. Стабильность атома. Капельная модель. Планетарная модель. Модель Бора предполагает, что для устойчивых круговых орбит момент импульса электрона квантован

$$mvr = nh, \quad n = 1,2.....$$

Фотоэффект. Для объяснения фотоэффекта следует считать, что электромагнитная волна это набор частиц с энергией $\varepsilon = \hbar\omega$. Дифракция частиц на атомных решетках. Волны де Бройля. Корпускулярно-волновой дуализм. Частица, с импульсом p, имеет длину волны $\lambda = \dfrac{h}{p}$. Принцип неопределенности. Координата и импульс частицы не могут быть измерены одновременно. Соотношение неопределенности: $\Delta p \Delta x \geq h$.

1.2. Вероятность события $dW(x)$. Плотность вероятности $\rho(x)$.

Сумма вероятностей: для исключающих друг друга исходов вероятность появления любого одного из нескольких исходов равна сумме соответствующих вероятностей. Произведение вероятностей: если события независимы, то вероятность сложного события равна произведению вероятностей отдельных событий. Нормировка: $\int dW(x) = \int \rho(x) dx = 1$. Среднее значение величины определяется соотношением

$$\left\langle x \right\rangle = \int x \rho(x) dx.$$

Волновая функция. Состояние частицы описывается волновой функцией $\psi(\vec{r}, t)$, которая в общем случае является комплексной. Волновая функция является непрерывной. Принцип суперпозиции: если какая-либо система способна находится в состоянии с волновой функцией ψ_1 и в состоянии с волновой функцией ψ_2, то она может находится и в состоянии с волновой функцией $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$. Плотность вероятности нахождения частицы в определенном состоянии равна квадрату модуля волновой функции

$$\rho(\vec{r},t) = \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 .$$

Фазовый множитель волновой функции. Волновая функция определена с точностью до фазового множителя, так функции $\psi(\vec{r},t)$ и $\psi(\vec{r},t)\exp(i\alpha)$ описывают одно и то же состояние системы.

Нормировка волновой функции

$$\int \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d\vec{r} = 1 .$$

Квантово-механические операторы. Все взаимоотношения между механическими величинами в квантовой механике могут быть выражены на языке операторов. В результате действия некоторого оператора $\hat{A}$ на волновую функцию получается другая волновая функция, $\hat{A}\psi = \phi$. Среднее значение оператора определяется соотношением

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \int \psi(\vec{r},t)^* \hat{A} \psi(\vec{r},t) d\vec{r}.$$

Представление физической переменной в квантовой механике. Каждой физической величине соответствует оператор. Оператор координаты: $\hat{x} = x$. Оператор потенциальной энергии: $\hat{U}(x,y,z) = U(x,y,z)$. Оператор импульса: $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{p} = -i\hbar\hat{\vec{\nabla}}$. Оператор кинетической энергии: $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2$.

1.3. Действия с квантовомеханическими операторами. Сложение операторов: $\left(\hat{A} + \hat{B}\right)\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$. Произведение операторов:

$\left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi=\hat{A}\left(\hat{B}\psi\right)$. Коммутативность. Коммутатором операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называется оператор $\hat{C}$, определенный соотношением: $\hat{C}=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\equiv[\hat{A},\hat{B}]$. Оператор полной энергии (гамильтониан) имеет вид

$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{U}=-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2+U.$$

Строгий вывод соотношения неопределенности

$$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle\left\langle(\Delta p_x)^2\right\rangle\geq\hbar^2/4.$$

Некоторые свойства квантовомеханических операторов. Линейность. Оператор $\hat{A}$ называется линейным, если выполняется соотношение

$$\hat{A}\left(c_1\psi_1+c_2\psi_2\right)=c_1\hat{A}\psi_1+c_2\hat{A}\psi_2.$$

Оператор $\hat{A}^+$ называется сопряженным оператору $\hat{A}$, если справедливо соотношение

$$\int\phi(\vec{r},t)^*\hat{A}\psi(\vec{r},t)d\vec{r}=\int\psi(\vec{r},t)\left(\hat{A}^+\phi(\vec{r},t)\right)^*d\vec{r}$$

Оператор называется самосопряженным или эрмитовым, если $\hat{A}^+=\hat{A}$.

Собственные значения оператора, их связь со значением физической величины. Функция ψ_n является собственной для оператора $\hat{A}$, если $\hat{A}\psi_n=\lambda_n\psi_n$, λ_n-собственное значение. Если система находится в состоянии ψ_n, то произведенное над нею измерение величины A даст значение λ_n. Например, состояние с определенным импульсом описывается волновой функцией вида $\psi_p = c\exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar)$.

1.4. Скалярным произведением волновых функций называется выражение $\int \psi_2^* \psi_1 d\vec{r} \equiv \left\langle \psi_2 \middle| \psi_1 \right\rangle$. Ортогональность волновых функций, соответствующих разным собственным значениям физического оператора. Собственные функции, относящиеся к различным собственным значениям ортогональны, т.е. их скалярное произведение равно нулю, $\int \psi_i^* \psi_j d\vec{r} = \delta_{ij}$. Волновая функция системы двух невзаимодействующих частиц может быть представлена в виде: $\psi_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \psi_1(\vec{r}_1, t)\psi_2(\vec{r}_2, t)$. Волновая функция системы с независимыми степенями свободы также может быть представлена в виде произведения волновых функций, зависящих от той или иной координаты.

2. Физический смысл собственных значений операторов. Решение стационарного уравнения Шредингера

2.1. Уравнение Шредингера для нахождения волновой функции имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi.$$

Плотность потока вероятности определяется выражением:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right).$$

Справедливо уравнение неразрывности: $\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\vec{j} = 0.$

Плотность потока вероятности для волны де Бройля равна $\vec{j} = \frac{\vec{p}}{m}\rho.$

Стационарные состояния. Если вероятность нахождения системы в определенном состоянии не меняется во времени, то такое состояние называется стационарным. Стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Разложение общего решения уравнения Шредингера по стационарным волновым функциям. Общее решение уравнения Шредингера записывается в виде:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)\psi_n(\vec{r}),$$

где ψ_n и E_n – собственные функции и собственные значения гамильтониана.

2.2. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Потенциальная энергия этой системы задается выражением

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

Стационарные волновые функции, их ортогональность. Уровни энергии. Волновые функции и уровни энергии определяются соотношениями:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right), \qquad E_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ml^2}, \qquad n = 1,2,3.....$$

Частица в трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Потенциальная энергия равна нулю, если $0 \le x \le l_1,\ 0 \le y \le l_2,\ 0 \le z \le l_3$ и $U = \infty$ во всей остальной области. Стационарные волновые функции. Уровни энергии. Волновые функции и уровни энергии определяются соотношениями:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{l_1 l_2 l_3}} \sin\left(\frac{\pi n_1 x}{l_1}\right) \sin\left(\frac{\pi n_2 y}{l_2}\right) \sin\left(\frac{\pi n_3 z}{l_3}\right),$$

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right).$$

Вырождение. Если одному и тому же значению энергии соответствует несколько разных волновых функций, то такой уровень называется вырожденным. Пусть $l_1 = l_2 = l_3$, тогда основное состояние (самое низшее по энергии) не вырождено, а первое возбужденное состояние 3-х кратно вырождено, второе возбужденное состояние также 3-х кратно вырождено.

2.3. Отражение и прохождение через потенциальные барьеры.

Ступенька соответствует ситуации $U(x) = \begin{cases} 0, & x \le 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$. Для случая $E > U_0$ имеет место чисто квантовый эффект надбарьерного отражения частицы. Коэффициенты отражения и прохождения равны:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \qquad T = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2},$$

где $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}$. Для случая $E < U_0$ вероятность найти частицу в классически запрещенной области не равна нулю.

Прямоугольный барьер в отличие от ступеньки имеет конечную ширину *a*. Для случая $E < U_0$ имеет место туннельный эффект, т.е. частица может «протуннелировать» через классически запрещенную подбарьерную область. Коэффициент прохождения равен

$$T = \frac{4 k_1^2 \mu^2}{4 k_1^2 \mu^2 + \left(k_1^2 + \mu^2 \right)^2 sh^2(\mu a)},$$

где $\mu = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$.

Общие свойства волновой функции. При решении задачи использовались свойства непрерывности волновой функции и ее первой производной на границах областей. δ-функция Дирака. δ-функция определяется следующими соотношениями

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}, \qquad \int f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$$

$\delta-$ образная потенциальная яма соответствует условию $U(x) = -U_0\delta(x)$. В такой яме существует только одно стационарное состояние с волновой функцией

$$\psi(x) = \sqrt{k}\exp(-k|x|),$$

где $k = \frac{mU_0}{\hbar}$.

и уровнем энергии $E = \frac{mU_0^2}{2\hbar^2}$. Потенциальная яма с небольшим числом стационарных состояний называется мелкой

2.4. Гармонический осциллятор. Для одномерного гармонического осциллятора потенциальная энергия записывается в виде $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Стационарные волновые функции, их ортогональность, уровни энергии. Гармонический осциллятор обладает эквидистантным набором уровней энергии

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Стационарные волновые функции выражаются через полиномы Эрмита

$$\psi_n(\xi)=\sqrt{\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}}H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right),$$

где $\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ – безразмерная координата. Полиномы Эрмита определены формулой

$$H_n = (-1)^n \exp(\xi^2)\frac{d^n}{d\xi^n}\exp(-\xi^2)\,.$$

Волновые функции гармонического осциллятора связаны рекуррентным соотношением

$$\xi\psi_n=\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}.$$

3. Теория возмущений.

3.1. Ряд приближенных методов решения уравнения Шредингера носят название теории возмущений. Теория возмущений, не зависящих от времени. В этой задаче гамильтониан разделяется на две части $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$. Предполагается, что для гамильтониана $\hat{H}_0$ решение уравнения Шредингера известно, $\hat{H}_0\psi_n^0=E_n^0\psi_n^0$. Часть гамильтониана $\hat{V}$ называется возмущением. Поправки первого и второго порядка к уровням энергии и первого порядка к волновой функции в случае невырожденных исходных уровней. Решение ищется в виде

$$\psi_n=\psi_n^0+\psi_n'$$

.

$$E_n=E_n^0+E_n'+E_n''.$$

Поправки имеют вид:

$$E'_n = V_{nn} = \int \psi_n^{0*} \hat{V} \psi_n^0 dV,$$

$$E''_n = \sum_{i \neq n} \frac{\left| V_{in} \right|^2}{E_n^0 - E_i^0}, \; V_{in} = \int \psi_i^{0*} \hat{V} \psi_n^0 dV,$$

$$\psi'_n = \sum_{i \neq n} \frac{V_{in}}{E_n^0 - E_i^0} \psi_i^0$$

Условие применимости теории возмущений, $\frac{\left| V_{in} \right|}{\left| E_n^0 - E_i^0 \right|} << 1.$

3.2. Ортогонализация вырожденных волновых функций. Стационарная теория возмущения в случае вырождения. При наличии вырождения предыдущая теория возмущений не работает. "Правильные" волновые функции ищутся как линейные комбинации волновых функций вырожденного уровня энергии, $\phi_k = \sum_i c_i \psi_i^0, E = E^0 + E'$. После подстановки в уравнение Шредингера получается секулярное уравнение (система алгебраических уравнений)

$$\sum_i \left(V_{li} - E' \delta_{li} \right) c_i = 0.$$

Секулярное уравнение имеет ненулевое решение при условии $\det \left(V_{li} - E' \delta_{li} \right) = 0$. Из этого решения получаем поправки E' к вырожденному уровню энергии. Если все E' различны, то имеет место полное снятие вырождения, в противном случае только частичное. Далее значения E' по очереди подставляются в секулярное уравнение и находятся наборы коэффициентов c_i. Затем строятся «правильные» волновые функции.

3.3. Возмущения, зависящие от времени. Если на систему действовало возмущение, зависящее от времени $\hat{V}(t)$, то в результате система может перейти из одного состояния в другое. Для нахождения вероятности перехода решается временное уравнение Шредингера с гамильтонианом $\hat{H}_0 + \hat{V}(t)$. Волновая функция возмущенного состояния ищется в виде $\psi(t)=\sum_n c_n(t)\psi_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$. Переходы под влиянием конечного во времени возмущения. Вероятность перехода. Если возмущение действовало в течение конечного времени, то рассчитывается вероятность перехода из одного стационарного состояния в другое. Такая вероятность равна

$$w_{n\to m}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t)\exp(i\omega_{mn}t)dt\right|^2,$$

где $\omega_{mn}=(E_m-E_n)/\hbar$.

Переходы под влиянием периодического возмущения. Вероятность перехода. Если действует периодическое возмущение (с частотой ω), то рассчитывается вероятность перехода к моменту времени t. Эта вероятность равна

$$w_m(t)=\frac{1}{\hbar^2}|V_{mn}|^2\frac{4\sin^2(\omega_{mn}-\omega)t/2}{(\omega_{mn}-\omega)^2}.$$

Из последней формулы можно получить на больших временах "золотое" правило Ферми для переходов непрерывном спектре

$$\frac{dw}{dt}=\frac{2\pi}{\hbar^2}|V|^2\delta(\omega_{mn}-\omega).$$

4. Матричная механика и теория представлений.

4.1. Полный набор одновременно измеримых величин. Если какие-либо физические величины одновременно измеримы, то их операторы имеют общие собственные функции и операторы коммутируют.

4.2. Матричный аппарат квантовой механики был создан раньше волновой механики и некоторое время развивался независимо. Кет- и бра-векторы. Состояние системы характеризуется векторами состояний: кет-вектором $|\psi\rangle$ и бра-вектором $\langle\psi|$. Скалярное произведение векторов записывается в виде: $\langle\psi|\phi\rangle$. Разложение вектора по базису. Векторы состояний $\left|\psi\right\rangle$ и $\left\langle\psi\right|$ можно разложить по своим базисам.

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_n \psi_n \left|n\right\rangle, \qquad \left\langle\psi\right| = \sum_n \psi_n^* \left\langle n\right|.$$

Компоненты бра- и кет-векторов ψ_n и ψ_n^* находят с помощью скалярного произведения

$$\psi_n = \left\langle n\middle|\psi\right\rangle, \qquad \psi_n^* = \left\langle\psi\middle|n\right\rangle.$$

Набор ψ_n изображают в виде столбца, а набор ψ_n^* – в виде строки. Скалярное произведение не зависит от представления и вычисляется как произведение строки на столбец

$$\left\langle\phi\middle|\psi\right\rangle = \sum_n \phi_n^* \psi_n.$$

Квантовомеханический оператор в дискретном представлении однозначно характеризуется матрицей, элементы которой определяются через базисные векторы $\left|i\right\rangle$ и $\left|j\right\rangle$ как $L_{i\,j} = \left\langle i\middle|\hat{L}\middle|j\right\rangle$. Его действие на вектор состояний в конкретном представлении вычисляется как

$$\phi_i = \sum_j L_{i\,j}\left|i\right\rangle,$$

т.е. по принципу умножения матрицы на столбец. Оператор $\hat{L}^+$ определяется как

$$\left\langle\psi\middle|\hat{L}^+\middle|\phi\right\rangle^* = \left\langle\phi\middle|\hat{L}\middle|\psi\right\rangle.$$

Для эрмитова оператора $L_{ij} = L_{ji}^*$. в качестве базиса обычно используется система собственных ортонормированных векторов состояния физического оператора, $\hat{L}\left|n\right\rangle=\lambda\left|n\right\rangle$. Название представления соответствует названию физического оператора.

Для перехода из одного представления в другое можно использовать единичный оператор

$$\hat{I}=\sum_j\left|j\right\rangle\left\langle j\right|.$$

Так, при переходе из представления F в представление G для волновой функции имеем

$$\psi_g=\left\langle g\middle|\psi\right\rangle=\sum_j\left\langle g\middle|f\right\rangle\left\langle f\middle|\psi\right\rangle=\sum_j g_f^*\psi_f,$$

а для матрицы оператора

$$L_{g'g''}=\left\langle g'\middle|\hat{L}\middle|g''\right\rangle=\sum_{f'f''}\left\langle g'\middle|f'\right\rangle\left\langle f'\middle|\hat{L}\middle|f''\right\rangle\left\langle f''\middle|g''\right\rangle=\sum_{f'f''}g'^*_{f'}g''_{f''}L_{f'f''},$$

где $\left|g\right\rangle$ и $\left|f\right\rangle$ – соответствующие ортонормированные базисы.

4.3. Обобщение матричного аппарата на непрерывный базис. Примером работы в непрерывном базисе является работа с волновыми функциями, получаемыми из решения уравнения Шредингера. В этом случае в качестве базисных состояний $\left|x,y,z\right\rangle$ выбраны состояния, представляющие собой пребывание системы в данной точке пространства с координатами $x,y,z.$ Волновые функции и операторы в этом случае записываются в координатном представлении и изменяются непрерывно с изменением координат. Главное отличие непрерывного базиса от дискретного состоит в том, что все суммы в приведенных выше выражениях заменяются на интегралы. Кет- и бра-векторы в непрерывном базисе, разложение вектора по непрерывной системе ортов. $\left|\psi(x)\right\rangle=\int a(f)\left|\psi_f(x)\right\rangle df$. Ортонормированность базиса, $\left\langle\psi_f(x)\middle|\psi_{f'}(x)\right\rangle=\delta(f-f')$. Нормировка волновой функции оператора импульса. Нормированные функции оператора импульса равны

$\psi_p(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\dfrac{ipx}{\hbar}\right)$, нормировка функций оператора импульса имеет вид $\left\langle\psi_p(x)\middle|\psi_{p'}(x\right\rangle\equiv\left\langle p\middle|p'\right\rangle=\delta(p-p')$.

4.4. Оператор в базисе из собственных функций для непрерывной системы ортов записывается в виде: $L_{ff'}=L(f)\delta(f-f')$. Оператор $\hat{x}$ в собственном представлении может быть изображен диагональной матрицей $x_{xx'}=x\delta(x-x')$, а оператор любой функции $V(x)-$ матрицей $V_{xx'}=V(x)\delta(x-x')$. Матрица оператора импульса в $x-$представлении может быть записана так: $p_{xx'}=i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$.

4.5. $p-$представление. Матрица оператора $\hat{L}$ в импульсном представлении записывается в виде: $L_{pp'}=\left\langle\psi_p(x)\middle|\hat{L}\middle|\psi_{p'}\right\rangle\equiv\left\langle p\middle|\hat{L}\middle|p'\right\rangle$.

Матрица оператора импульса в собственном представлении имеет вид: $p_{pp'}=p\delta(p-p')$. Оператор $\hat{x}$ в p-представлении имеет вид: $\hat{x}=i\hbar\dfrac{\partial}{\partial p_x}$.

Матрица оператора $\hat{x}$ в $p-$ представлении имеет вид:

$$x_{pp'}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p').$$

Волновая функция в $p-$представлении, ее связь с волновой функцией в $\hat{x}-$представлении. Волновой функции $\psi(x)$ в $\hat{x}-$представлении ставится в соответствие волновая функция $\varphi(p)$ в $p-$ представлении

$$\varphi(p)=\left\langle\psi_p(x)\middle|\psi(x\right\rangle,\qquad \psi(x)=\left\langle\varphi(p)\middle|\psi_p(x\right\rangle$$

$E-$представление. Если за независимую переменную выбирается энергия частицы, то такое представление называется энергетическим или $E-$представлением. Обозначая собственные функции оператора Гамильтона как $\left|\psi_n(x)\right\rangle \equiv \left|E_n\right\rangle$, запишем

$$\left|\psi(x)\right\rangle = \sum_n c_n \left|E_n\right\rangle .$$

Совокупность коэффициентов c_n есть волновая функция в энергетическом представлении.

Шредингеровский и гайзенберговский варианты $E-$представления волновой функции. Представление, в котором волновая функция изменяется во времени в соответствии с уравнением Шредингера, называется представлением Шредингера. Волновая функция в представлении Гейзенберга связана с волновой функцией в представлении Шредингера соотношением

$$\psi_H(x) = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)\psi_{Sh}(x).$$

В представлении Гейзенберга волновая функция от времени не зависит, временная зависимость переносится на операторы

$$\hat{L}_H = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)\hat{L}_{Hs}\exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right).$$

5. Квантовый момент импульса. Атом водорода.

5.1. Оператор момента импульса определяется соотношением $\hat{L} = \left[\vec{r}, \hat{p}\right]$. Этот оператор может быть записан как детерминант матрицы

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}.$$

Коммутационные соотношения операторов момента имеют вид:

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=i\hbar\hat{L}_z,\ \left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right]=i\hbar\hat{L}_x,\ \left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]=i\hbar\hat{L}_y,$$

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_x\right]=\left[\hat{L}^2,\hat{L}_y\right]=\left[\hat{L}^2,\hat{L}_z\right]=0.$$

Повышающий и понижающий операторы определены соотношениями:

$$\hat{L}_+=\hat{L}_x+i\hat{L}_y,\qquad \hat{L}_-=\hat{L}_x-i\hat{L}_y\ .$$

Правила коммутации для них можно записать в виде:

$$\left[\hat{L}_+,\hat{L}_я\right]=-\hbar\hat{L}_+,\ \left[\hat{L}_-,\hat{L}_я\right]=\hbar\hat{L}_-,\ \left[\hat{L}_+,\hat{L}_-\right]=2\hat{L}_z.$$

Более удобной является сферическая система координат. Вид операторов момента в сферической системе координат:

$$\hat{L}_x=i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+ctg\,\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{L}_y=i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+ctg\,\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$
$$\hat{L}^2=-\hbar^2\vec{\nabla}^2_{\theta,\varphi}.$$

Собственные функции и собственные значения оператора $\hat{L}_z$ (плоский ротатор) имеют вид:

$$\phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}(im\varphi),\qquad \lambda=\hbar m,\qquad m=0,\pm1,\pm2,\ldots.$$

Собственные значения оператора $\hat{L}^2$ имеют вид:

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1), \qquad l = 0,1,2,\ldots\ldots.$$

Матричные элементы операторов момента. Будем обозначать собственные функции операторов $\hat{l}^2 = \hat{L}^2/\hbar^2$ и $\hat{l}_z = \hat{L}_z/\hbar$ как $Y_{l,m}(\theta,\varphi) \equiv \left| l,m \right\rangle$. Наиболее важными матричными элементами являются матричные элементы операторов повышения и понижения

$$\begin{gathered} \left\langle l,m \middle| \hat{l}_+ \middle| l,m-1 \right\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \\ \left\langle l,m \middle| \hat{l}_- \middle| l,m+1 \right\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \end{gathered}.$$

Остальные матричные элементы могут быть выражены через матричные элементы повышающего и понижающего оператора.

Собственные функции оператора $\hat{l}^2 = \hat{L}^2/\hbar^2$ (шаровые функции) выражаются присоединенные полиномы Лежандра

$$Y_{l,m} = (-1)^{m+|m|}(i)^l \left(\frac{2l+1}{4\pi} \frac{\left(l-|m|\right)!}{\left(l+|m|\right)!} \right) P_l^m(\cos\theta)\exp(im\varphi)$$

$$P_l^m = \frac{1}{2^l l!} \sin^m\theta \frac{d^{l+m}}{(d\cos\theta)^{l+m}} \left(\cos^2\theta - 1 \right)^l.$$

Приведем примеры нескольких первых функций

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,$$

$$Y_{1\pm1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(i\varphi), \qquad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(1-3\cos^2\theta\right).$$

На практике используются линейные комбинации шаровых функций - $p-$ функции:

$$p_z = Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \qquad p_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right),$$

$$p_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{1,1} - Y_{1,-1}\right).$$

Полярная диаграмма шаровых функций. Полярная диаграмма $p-$ функций. $p-$ функции выглядят как «объемные восьмерки», вытянутые вдоль координатных осей.

Движение в центрально-симметричном поле. Квантовая задача двух тел с потенциалом взаимодействия U, зависящим только от относительного расстояния, сводится к движению одного тела. Гамильтониан такой системы записывается в виде:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\hat{l}^2 + U(r)\ ,$$

где $\mu-$ приведенная масса. Общий вид решения уравнения Шредингера ищется в виде: $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции в случае водородоподобного атома приобретает вид:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}l(l+1)R + \left(U(r) - E\right)R = 0$$

Уравнение Шредингера для атома водорода обычно записывают в безразмерном виде и с переходом к новой переменной $\chi = R(r)r$:

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} - \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - 2\lambda - \frac{2}{\rho}\right)\chi = 0,$$

где $\lambda = \frac{E}{E_0}$, $\rho = \frac{r}{a}$, $a = \frac{\hbar^2}{me^2}-$ боровский радиус, $E_0 = \frac{me^4}{\hbar^2}$.

Решение уравнения Шредингера для атома водорода выражается через полиномы Лагерра ($n=1,2,...,$)

$$R_{nl}(r)=-\frac{2}{n^2}\frac{(n-l-1)!}{[(n-1)!]^3}\exp\left(-\frac{\rho}{n}\right)\left(\frac{2\rho}{n}\right)^l L_{2n+l}^{2l+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right),$$

$$L_n^m(z)=(-1)^m\frac{n!}{(n-m)!}\exp(z)z^{-m}\frac{d^{n-m}}{dz^{n-m}}\left(\exp(-z)z^n\right),\qquad m\le n.$$

Примеры радиальных функций

$$R_{10}=2\rho\exp(-\rho),\qquad R_{20}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{\rho}{2}\right)\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right),$$

$$R_{21}=\frac{1}{\sqrt{24}}\rho\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right).$$

Уровни энергии имеют вид ($E<0$): $E=-\frac{E_0}{n^2}$. Степень вырождения уровня равна n^2.

Оператор инверсии координат $\hat{I}$ определяется равенством $\hat{I}\psi(r)=\psi(-r)$. Четность состояния. Четность решений уравнения Шредингера для водородоподобного атома определяется величиной орбитального момента, $(-1)^l$.

6. Спин. Сложение моментов. Влияние квантового момента импульса и спина на строение атомов и молекул.

Спин частиц. Частицы обладают собственным механическим моментом, который называется спином. Экспериментально обнаружен в опытах Штерна – Герлаха. Операторы спинового момента: $\hat{S}^2$, $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$. Коммутационные соотношения для операторов спина совпадают с коммутационными соотношениями для оператора орбитального момента. Собственными функциями оператора $\hat{S}_z$ для спина 1/2 являются функции $\left|\alpha\right\rangle$ и $\left|\beta\right\rangle$,

$$\hat{S}_z\left|\alpha\right\rangle = 1/2\left|\alpha\right\rangle,\ \ \hat{S}_z\left|\beta\right\rangle = -1/2\left|\beta\right\rangle.$$

Часто при решении задач используются матрицы Паули, которые с точностью до 2 совпадают с матрицами спиновых операторов, $\hat{\sigma}_i = 2\hat{S}_i$. Коммутационные соотношения между ними могут быть записаны в виде: $[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_k] = 2i\varepsilon_{ikl}\hat{\sigma}_l$.

Сложение моментов в слабовзаимодействующих системах. Оператор суммарного момента определяется соотношением $\hat{L} = \hat{L}_1 + L_2$. Коммутационные соотношения для оператора суммарного момента определяются такими же соотношениями, что и для одного момента. Величина квадрата суммарного момента. Проекция суммарного момента на выделенную ось. Правило поиска суммарного значения и значения проекции суммарного момента. Суммарный момент может принимать следующие значения: $\left|L_1 - L_2\right| \le L \le L_1 + L_2$. Выбираются два набора базисных состояний. Первый базис $\left|L_1, L_2, m_1, m_2\right\rangle$ – это базис двух подсистем. Второй базис $\left|L, m, L_1, L_2\right\rangle$ – коллективный базис. Эти базисы связаны соотношением

$$\left|L, m, L_1, L_2\right\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2}\left|L_1, L_2, m_1, m_2\right\rangle =$$
$$\sum_{m_1, m_2}\left|L_1, L_2, m_1, m_2\right\rangle\left\langle L_1, L_2, m_1, m_2\right|\left.L, m, L_1, L_2\right\rangle$$

Коэффициенты $C_{m_1 m_2}$ называются коэффициентами Клебша – Гордана. Принципы поиска коэффициентов. В простых системах коэффициенты легко находятся, например, с использованием повышающих или понижающих операторов. Сложение двух спинов 1/2. Триплетное и синглетное состояния. Две частицы со спином по 1/2 образуют состояния с полным спином 0 или 1

$$\left|S\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\alpha_1\beta_2\right\rangle - \left|\beta_1\alpha_2\right\rangle\right)$$

$$\left|T_+\right\rangle = \left|\alpha_1\alpha_2\right\rangle$$

$$\left|T_0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\alpha_1\beta_2\right\rangle + \left|\beta_1\alpha_2\right\rangle\right)$$

$$\left|T_-\right\rangle = \left|\beta_1\beta_2\right\rangle$$

Системы тождественных частиц. Принцип неразличимости тождественных частиц. Перестановка тождественных частиц. При перестановке тождественных частиц волновая функция либо не изменяется, либо меняет знак. Фермионы и бозоны, их волновые функции. Частицы с полуцелым спином являются фермионами, их волновая функция при перестановке меняет знак. Частицы с целым спином называются бозонами, их волновая функция при перестановке знак не меняет. Электроны являются фермионами. Для многоэлектронной системы волновая функция выбирается в виде детерминанта Слэтера

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & . & . & \psi_1(x_N) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ \psi_N(x_1) & \psi_N(x_2) & . & . & \psi_N(x_N) \end{vmatrix}$$

Спин-орбитали. Принцип Паули: в одном состоянии может находится не более одного фермиона. Волновая функция двухэлектронной системы может быть представлена в виде произведения координатной функции и спиновой. Если спиновая функция симметрична (триплетное состояние), то координатная - антисимметрична. Если спиновая функция антисимметрична (синглетное состояние), то координатная – симметрична. Таким образом, спин управляет симметрией координатной волновой функции. Это приводит к специфическому обменному взаимодействию и порождает химическую связь.

5. Образовательные технологии

Виды/формы образовательных технологий. Отличительной особенностью курса является применение в нем модульно-рейтинговой системы (см. аннотацию), при реализации которой постоянно контролируется уровень знаний студента. Наличие обязательных для итоговой аттестации студента контрольных точек принуждает к активной работе студента в течение всего семестра. Для того чтобы заинтересовать студента в подготовке к каждому семинарскому занятию, каждое семинарское занятия часто начинается с экспресс – миниконтрольной работы, результат которой может существенным образом повлиять на итоговую оценку студента. Обратная связь обеспечивается тем, что лектор ведет одну из семинарских групп, и может оперативно скорректировать лекционный курс в зависимости от полученных на семинарском занятии и при прохождении контрольных точек результатов в усвоении материала. Семинарские занятия происходят в форме дискуссии преподавателя со студентами (аналог «круглого стола», преподавателю в котором отводится роль ведущего), в ходе которых каждый из участников – студенты или преподаватель имею право задавать вопросы и участвовать в выработке альтернативных решений разбираемых задач. Таким образом, на семинарских занятиях реализуется интерактивная форма обучения.

Важной формой обучения являются коллоквиумы, проводимые в форме беседы преподавателя со студентом, в которую при желании может вмешиваться любой студент семинарской группы. Здесь (а не только на семинарских занятиях) студент может получить ответы на все интересующие его вопросы по предмету.

Следует отметить, что практически все преподаватели, участвующие в курсе «Физика (Квантовая механика)» являются профессиональными исследователями в области физики и химии.

Преподаватели, участвующие в проведении курса, регулярно готовят и издают учебно-методические пособия, посвященные различным разделам курса. Эти пособия размещаются и в электронном виде на сайте Факультета естественных наук.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Использование модульной системы и индивидуального кумулятивного индекса (ИКИ) успеваемости в курсе «Физика (Квантовая механика)» дает возможность студенту проявить максимальную самостоятельность и инициативность в учебном процессе, а преподавателям – объективно оценить знания студента.

В рамках этой системы студент может маневрировать и находить оптимальный путь формирования собственного рейтинга. Она позволяет студенту получить навыки работы с учебными пособиями, монографиями и справочной литературой по квантовой механике, выработать самостоятельный научно-исследовательский подход к решению задач и физико-химических проблем и в конечном итоге достичь желаемого профессионального уровня. Успешная работа по предлагаемой системе предполагает интенсивное сотрудничество преподавателей и студентов, которые должны четко представлять заданные «правила игры» и действовать в соответствии с ними.

Система ИКИ (индивидуальный кумулятивный индекс) предусматривает прохождение контрольных точек (коллоквиумов, контрольных работ и домашних заданий), при этом набранные баллы суммируются. Система ИКИ построена таким образом, что текущий контроль охватывает все разделы курса. Поэтому итоговая аттестация не предусматривает обязательного итогового экзамена – любую положительную итоговую оценку за курс в целом можно получить «автоматом», набрав соответствующее количество баллов в семестре. Студент, не набравший достаточного количества баллов для получения «оценки–автомата» или желающий ее повысить, сдает письменные экзамены, которые проводятся во время экзаменационной сессии.

Все контрольные точки являются обязательными. Их прохождение – необходимое условие для получения «оценки–автомата» и (или) допуска на экзамен.

Каждая обязательная контрольная точка проходится строго в установленный срок, который указан в Программе семинаров. При прохождении контрольной точки за пределами установленного срока (без уважительной причины) она принимается со «штрафом», т. е. вводится коэффициент 0.5 на каждый набранный сверх 50 % балл.

Студент имеет право на апелляцию по каждой контрольной работе в течение 7 дней со дня ее проведения (при условии, что работа находится у преподавателя). Все вопросы, связанные с изменением суммы баллов, решаются преподавателем, проверявшим задачу, а в спорных случаях – лектором. По истечению срока апелляции по данной контрольной точке баллы за нее не могут быть изменены.

Контрольные точки, не пройденные в срок по уважительной причине (при наличии медицинской справки), принимаются в течение недели после окончания действия справки без штрафа, а далее (в течение одной следующей недели) – со штрафом (см. выше). Все контрольные точки, не пройденные в срок (без уважительной причины), в виде исключения могут быть сданы в течение двух недель за пределами установленного срока (со штрафом).

Работа студента на семинарах оценивается преподавателем, ведущим семинары, по теме текущего семинара, поэтому студенту следует заранее прорабатывать материал к семинару. Студент может получить баллы за быстрое и правильное решение задач на семинаре (по усмотрению преподавателя). Суммарное количество баллов за этот пункт выставляется преподавателем в конце семестра.

Рекомендованная литература к теоретическому курсу

а) основная литература:

1. Пуртов П. А., Замураев В. П. Учебно-методический комплекс. Физика. Квантовая механика. Новосибирск, НГУ, 2011.
2. В. А. Толкачев и др. Задачи по квантовой механике. Новосибирск: НГУ, 2003.
3. Замураев В. П., Калинина А. П. Задачи с решениями по квантовой механике: учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун - т, 2010.
4. Замураев В. П., Калинина А. П. Задачи с решениями контрольных работ по квантовой механике: учеб. пособие для вузов. Новосибирск: Изд - во НГУ, 2012.
5. Шпольский Э. В. Атомная физика. М.: Наука, 1974, Т. 2.
6. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. М.: Высш. шк., 1963.

б) дополнительная литература:

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
2. Левич Р. Г. и др. Курс теоретической физики. М.: Наука, 1971, Т. 2.
3. Дирак П. А. Принципы квантовой механики. М.: Физматгиз, 1960.
4. Фейнман Р. и др. Фейнмановские лекции по физике. М.: Мир, 1978, Т. 8,9.

Правила ИКИ

Текущий контроль

Для текущего контроля учебным планом предусмотрена сдача в течение семестра каждым из студентом шести домашних заданий по разделам курса. Сдача заданий проводится в форме коллоквиумов. Студент на каждом коллоквиуме должен представить решения задач соответствующего домашнего задания и в письменном виде ответить на теоретический вопрос и решить две задачи. За каждое задание студент может получить до **200** баллов. В середине семестра проводится контрольная работа, в которой студентам предлагается решить пять задач, относящихся к первой половине курса. Стоимость первой контрольной — **700** баллов. В конце семестра проводится вторая контрольная работа, в которой студентам предлагается ответить на три теоретических вопроса и решить пять задач из второй половины курса. Теоретическая часть второй контрольной оценивается в **400** баллов, решение задач в **700** баллов. Выполнение этих работ является обязательным для всех студентов, а результаты текущего контроля служат основанием для выставления оценок в ведомость контрольной недели на факультете. Если сумма набранных в семестре баллов превышает **2700** баллов из **3000** возможных, то студенту выставляется оценка «**отлично**» без экзамена. Для получения оценки «**хорошо**» без экзамена необходимо набрать более **2100** баллов, и при этом не менее **130** баллов в ответах на теоретические вопросы. Для получения оценки «**удовлетворительно**» без экзамена необходимо набрать в семестре не менее **1500** баллов и преодолеть порог в **130** баллов в ответах на теоретические вопросы.

Контрольные точки	***Баллы***
К1 (Коллоквиум 1): Соотношение неопределенности. Волновая функция. Операторы, собственные функции, собственные значения	200
К2 (Коллоквиум 2): Физический смысл собственных значений оператора. Решение стационарного уравнения Шредингера и его приложения	200
К3 (Коллоквиум 3): Теория возмущений	200
КР1 (Контрольная работа 1): Волновые функции, операторы. Уравнение Шредингера. Теория возмущений	700
К4 (Коллоквиум 4): Матричная механика и теория представлений	200
К5 (Коллоквиум 5): Квантовый момент импульса. Атом водорода	200
К6 (Коллоквиум 6): Спин. Сложение моментов	200
КР2 (Контрольная работа 2, теория+задачи): Теория представлений. Атом водорода. Спин	400+700
Работа на семинарах	100
ИТОГО	3000

При выполнении домашних заданий надлежит придерживаться следующих сокращений:

– килограмм – кг;

– грамм – г;

– метр – м;
– сантиметр – см;
– микрон – мкм;
– секунда – с;
– градусы Цельсия – °C;
– джоуль – Дж;
– кулон – К;
– вольт – В;
– тесла – Тл.

Итоговый контроль

Для контроля усвоения дисциплины учебным планом предусмотрен письменный экзамен из трех вопросов по теоретическому материалу стоимостью в **400** баллов и решению шести задач, которые оцениваются в **1100** баллов. Оценка выставляется по сумме баллов набранных на экзамене и в семестре. Если сумма превышает 2700 баллов, то студент претендует на оценку «**отлично**». Для получения оценки «**хорошо**» необходимо набрать более **2100** баллов, а для оценки «**удовлетворительно**» — **1500** баллов. Кроме суммы набранных баллов учитывается результат, полученный непосредственно на экзамене. Если в теоретической части экзамена набрано менее **130** баллов и/или за решение задач получено менее **250** баллов или сумма баллов за теорию и решение задач менее **450**, то полученные на экзамене баллы не включаются в общую сумму и оценка, полученная в семестре, остается без изменений. Для получения оценки «**отлично**» кроме набора требуемой суммы баллов необходимо на экзамене набрать при решении задач не менее **600** баллов, а сумму баллов за теорию и решение задач – не менее **900**. Для получения оценки «**хорошо**» необходимо на экзамене набрать при решении задач не менее **400** баллов, а сумму баллов за теорию и решение задач – не менее **670**.

Перечень коллоквиумов

Примерные контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы (в объеме часов, предусмотренных образовательным стандартом и рабочим учебным планом данной дисциплины).

Задание 1.

Соотношение неопределенности. Волновая функция. Операторы, собственные функции, собственные значения

Вопросы к коллоквиуму

1. Волновая функция в квантовой механике, ее нормировка. Представление физических величин в квантовой механике.

Операторы координаты, импульса, полной энергии (гамильтониан).
2. Вывод соотношения неопределенности.
3. Собственная функция и собственное значение оператора. Их физический смысл. Почему операторы физических величин эрмитовы?

Задачи

1. Найти длину волны де Бройля и кинетическую энергию электронов, падающих нормально на диафрагму с двумя щелями, если на экране, отстоящем от диафрагмы на l = 75 см, расстояние между соседними интерференционными максимумами Δx = 7,5 мкм. Расстояние между щелями d = 25 мкм.
2. Исходя из соотношения неопределенности, оценить минимально возможную энергию следующих систем:

   а) частицы массы m, движущейся в потенциальном поле $U(x)=\frac{1}{2}kx^2$;

   б) электронов в атоме гелия.

3. Волновая функция частицы в сферических координатах имеет вид:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\begin{cases} C\dfrac{\sin kr}{r}, & r\le\pi/k, \\ 0, & r>\pi/k. \end{cases}$$

   Найти нормировочную константу C.

4. Волновая функция $\psi(x)$ задана следующим образом:

$$\psi(x)=\begin{cases} 2\cos x, & -\pi/2\le x\le 2, \\ 2\sin x, & \pi\le x\le 2\pi, \\ 0, & \text{при всех прочих значениях } x. \end{cases}$$

   Нормировать функцию, построить ее график.

5. Эрмитовы операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют друг с другом.

   Доказать, что оператор $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ — неэрмитов, а операторы $i\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ и $\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{B},\hat{A}\right]$ — эрмитовы.

6. Найти вид оператора $\hat{A}^2$, если оператор $\hat{A}$ равен:

$$а)\ 1+\frac{d}{dx},\ \ б)\ x+\frac{d}{dx},\ \ в)\ \frac{1}{x}\frac{d}{dx},\ \ г)\ \frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}.$$

7. Найти собственные функции оператора $x+\frac{d}{dx}$.
8. Найти собственные функции и собственные значения операторов:

$$\text{А)}\ -i\frac{d}{dx},\ \text{если}\ \psi(x)=\psi(x+a),\ \text{ где }\ a-\text{постоянная;}$$

$$\text{Б)}\ \frac{d^2}{dx^2},\ \text{если}\ \psi(x)=0\ \text{ при }\ x<0\ \text{ и }\ x>l.$$

9. Найти вид $\left[\hat{C},\hat{A}^2\right]$, если $\left[\hat{C},\hat{A}\right]=\lambda\hat{A}$.

Срок для выполнения задания – 3 недели.

Задание 2.

Физический смысл собственных значений оператора. Решение стационарного уравнения Шредингера и его приложения

Вопросы к коллоквиуму.

1. Ортогональность волновых функций, соответствующих разным собственным значениям физического оператора. Волновая функция системы невзаимодействующих частиц.
2. Уравнение Шредингера (без вывода). Стационарные состояния. Стационарное уравнение Шредингера. Разложение общего решения уравнения Шредингера по стационарным волновым функциям.
3. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Стационарные волновые функции, их ортогональность. Уровни энергии.
4. Частица в трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Стационарные волновые функции. Уровни энергии. Вырождение.
5. Отражение и прохождение через потенциальные барьеры: ступеньку, прямоугольный барьер.
6. Гармонический осциллятор. Стационарные волновые функции.
7. Ортогональность волновых функций гармонического осциллятора. Уровни энергии гармонического осциллятора.

Задачи

1. Найти среднюю кинетическую энергию частицы массы m в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками ($0 \le x \le l$), если частица находится в состояниях, описываемыми волновыми функциями: а) $\psi(x) = A\sin^2(\pi x / l)$; б) $\psi(x) = Ax(l - x)$.
2. Вычислить $\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle$ и $\left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle$, а также их произведение для частицы массы m в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками ($0 < x < l$).
3. Линейный осциллятор массы m частоты ω в момент времени $t = 0$ находился в состоянии $\psi(x) = A(\xi\psi_1 + \psi_3)$, где ψ_1 и ψ_3 – стационарные состояния с $n = 1$ и 3, а $\xi = \sqrt{m\omega / \hbar}$. Найти зависимость от времени средней энергии и средней координаты осциллятора.
4. В одномерном потенциальном поле $U(x)$, таком, что $U(x) = 0$ при $x = \infty$, находится частица в стационарном состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(x) = Axe^{-\alpha x}$ при $x \ge 0$ и $\psi = 0$ при $x < 0$. Найти вид функции $U(x)$, энергию частицы и константу A.
5. В двумерной потенциальной яме $U(x, y) = U(x) + U(y)$, где $U(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$, $U(y) = 0$ при $0 \le y \le a$, $U(y) = \infty$ при $y < 0$ и $y > a$, $a = \pi\sqrt{\hbar / m\omega}$, находится частица в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(x, y) = [2\psi_2(x) + \psi_6(x)][\varphi_1(y) + 2\varphi_3(y)]$, где $\psi_i(x)$ и $\varphi_j(y)$ – волновые функции стационарных состояний для одномерного движения вдоль осей x и y соответственно. Найти вероятности получения при измерении энергии значений $\hbar\omega$, $3\hbar\omega$, $7\hbar\omega$.
6. Состояние частицы описывается волновой функцией

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ikx \right).$$

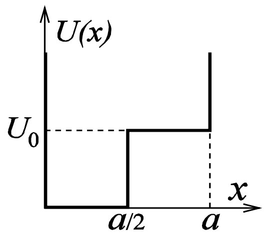
А) Нормировать волновую функцию.
Б) Найти среднее значение координаты.
В) Найти среднее значение импульса.

Г) Имеют ли координата и импульс определенные значения в этом состоянии

Д) Найти неопределенность координаты и импульса в этом состоянии.

Е) Проверить соотношение неопределенности.

7. В показанной на рисунке потенциальной яме с бесконечно высокими стенками $\left(U_0 = \dfrac{4\pi^2\hbar^2}{ma}\right)$ находится частица массы m. Ее состояние описывается волновой функцией



$$\psi(x) = \begin{cases} A\sin(3\pi x/a), & \text{при } 0 \le x \le a/2, \\ -A\sin(\pi x/a), & \text{при } a/2 < x \le a. \end{cases}$$

Нормировать волновую функцию и нарисовать ее график. Найти значение энергии частицы. Какова вероятность найти частицу при $0 \le x \le a/3$?

Срок для выполнения задания – 2 недели.

Задание 3.

Теория возмущений

Вопросы к коллоквиуму.

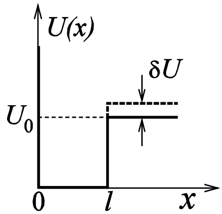
1. Получить выражения для поправок первого порядка к волновым функциям невырожденных состояний при стационарном возмущении.
2. Поправки первого и второго порядков к энергии невырожденного состояния при стационарном возмущении.
3. Условие применимости стационарной теории возмущений.
4. Вероятности переходов под действием возмущения конечной длительности.
5. «Правильные» волновые функции и соответствующие им значения энергии в стационарной теории возмущений при наличии вырождения.

Задачи

1. Во втором порядке теории возмущений найти энергию основного состояния частицы массы m в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками $(0 < x < l)$ при наличии возмущения

$\hat{V}=a\cos(3\pi x/l)$. При каком значении a применима теория возмущений?

2. В «полубесконечной» прямоугольной потенциальной яме



$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,\\ 0, & 0\le x\le l,\\ U_0, & x>l,\end{cases}$$

где $l=\dfrac{3\pi\hbar}{4\sqrt{mU_0}}$, существует стационарное состояние частицы массы m с энергией $E=U_0/2$. Определить явный вид нормированной волновой функции этого состояния. В первом порядке теории возмущений определить изменение энергии при увеличении высоты правой стенки ямы на δU.

3. Система двух одинаковых связанных осцилляторов, массы m каждый, описывается гамильтонианом

$$\hat{H}(x,y)=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{\hat{p}_y^2}{2m}+\frac{m\omega^2(x^2+y^2)}{2}+\alpha xy.$$

Рассматривая последнее слагаемое как возмущение, найти во втором порядке теории возмущений энергию основного состояния системы. Эта задача допускает и точное решение. Найти его и сравнить с приближенным.

4. Гармонический осциллятор массы m находился в основном состоянии, когда потенциал, в котором он находился, мгновенно изменил свой вид: был $U(x)=\dfrac{m\omega^2x^2}{2}$, стал $U(x)=\dfrac{m\omega^2(x-d)^2}{2}$. Найти вероятность обнаружения осциллятора в возбужденном состоянии после такого изменения потенциала.

5. На гармонический осциллятор массы m, находящийся при $t=-\infty$ в стационарном состоянии с энергией $5\hbar\omega/2$, действует возмущение $\hat{V}(x,t)=ax\exp(-|t|/\tau)$, где a и τ – постоянные. В первом порядке теории возмущений найти вероятности обнаружения осциллятора при $t=+\infty$ в различных стационарных состояниях.

Срок для выполнения задания – 3 недели.

Задание 4.

Матричная механика и теория представлений

Вопросы к коллоквиуму.

1. Вектор состояния и волновая функция.
2. Матрица оператора физической величины. Смысл собственных векторов и собственных значения этой матрицы.
3. Преобразование волновых функций и операторов при переходе от одного представления к другому.
4. Дискретный и непрерывный базисы. Сходства и различия.

Задачи

1. В некотором представлении оператор физической величины f и гамильтониан имеют вид:

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & \sqrt{8} \\ 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{8} & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Система находится в состоянии, в котором вероятность обнаружить определенные значения физической величины $f_1 > f_2 > f_3$ равны 2/3, 0 и 1/3 соответственно. Чему равно среднее значение энергии? Однозначен ли ответ на этот вопрос? Могут ли величина f и энергия одновременно иметь определенные значения?

2. В базисе $\left|1\right\rangle, \left|2\right\rangle$ операторы невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0$ и стационарного возмущения $\hat{V}$ имеют вид:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} -0{,}4 & 0{,}2 \\ 0{,}2 & 0{,}3 \end{pmatrix}.$$

Найти значения энергии во втором порядке теории возмущений. Сравнить с точными значениями.

3. В x- и p-представлениях записать коммутатор операторов кинетической и потенциальной энергии частицы массы m с зарядом q, находящейся в однородном электрическом поле напряженности E.
4. Гармонический осциллятор массы m частоты ω находится в состоянии, описываемом волновой функцией

$\psi(x) = C\left(x^2 - \frac{\hbar}{m\omega}\right)\psi_3(x)$, где $\psi_3(x)$ – собственная функция осциллятора с $n = 3$. Выразить волновую функцию в E-представлении. Нормировать ее.

5. Собственные функции и собственные значения невозмущенного гамильтониана равны ψ_1, ψ_2, ψ_3 и $2E_0, E_0, E_0$ соответственно. Оператор возмущения в E-представлении имеет вид:
$$\hat{V} = \begin{pmatrix} b & 0 & ia \\ 0 & 0 & ia \\ -ia & -ia & 0 \end{pmatrix},$$
где a и b – действительные константы. В первом порядке теории возмущений найти «правильные» волновые функции и соответствующие им значения энергии.

6. На двухуровневую систему, гамильтониан которой в энергетическом представлении имеет вид
$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$, действует возмущение $\hat{V}(t) = e^{-(t/\tau)^2}\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix}$,
гдеτ— постоянная, t – время. Найти вероятность перехода с первого уровня на второй при $t = +\infty$, если возмущение начало действовать в момент времени $t = -\infty$.

Срок для выполнения задания – 2 недели.

Задание 5.

Квантовый момент импульса. Атом водорода.

Вопросы к коллоквиуму.

1. Операторы проекций момента импульса и квадрата момента. Коммутационные соотношения. Трактовка закона сохранения момента импульса в квантовой механике.
2. Повышающий и понижающий операторы, коммутационные соотношения для них.
3. Матричные элементы операторов $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{L}_x, \hat{L}_+, \hat{L}_-$ для момента $L = 2$.

Задачи

1. Найти собственное значение оператора квадрата момента, соответствующее его собственной функции $\psi(\theta,\varphi)=\cos\theta+\cos(\theta+\varphi)-\cos(\theta-\varphi)$.
2. Атом водорода находится в возмущающем потенциале $\hat{V}=kr$, где k- константа, r- расстояние до ядра. В первом порядке теории возмущений вычислить смещение уровней с $n = 2$. Указать, по какому квантовому числу снимается вырождение.
3. В первом порядке теории возмущений вычислить смещение уровней энергии атома водорода с $n = 2$, $l = 1$ для возмущения, оператор которого имеет вид $\hat{V}=\alpha(\hat{L}_x+\hat{L}_y)$.
4. Электрон в атоме водорода находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(r,\theta,\varphi)=A\exp(-r/2a_Б)$, где A – постоянная, $a_Б$ — радиус Бора. Найти вероятность того, что при измерении энергии в этом состоянии будет получено значение, равное энергии первого возбужденного состояния атома водорода.

Срок для выполнения задания – 1 неделя.

Задание 6.

Спин. Сложение моментов.

Вопросы к коллоквиуму.

1. Исходя из коммутационных соотношений между операторами проекции спина, найти матрицу оператора $\hat{S}_z$ для спина 1/2.
2. Триплетное и синглетное состояния системы из двух спинов по 1/2.
3. Правила сложения двух моментов.
4. Использование повышающего и понижающего операторов для решение задачи о сложении моментов.

Задачи

1. Спин 1/2 в магнитном поле с индукцией $\vec{B}=(0, 0, B_0)$ имеет проекцию на ось z равную 1/2. Магнитное поле мгновенно поворачивают в плоскости x-z на угол 30°. Найти среднюю энергию спина после поворота, а также вероятность того, что измерение проекции спина на новое направление магнитного поля

даст значение 1/2. Гамильтониан спина в магнитном поле $\hat{H} = -\gamma\hbar\left(\vec{B}\hat{\vec{S}}\right)$, где γ – постоянная.

2. Имеется система из трех спинов $S_1 = S_2 = S_3 = 1$. Найти значения суммарного спина. Указать, сколько состояний имеют проекцию суммарного спина на ось z, равную 2.
3. Система из двух спинов $S_1 = S_2 = 1/2$ находится в состоянии, описываемом как следующая комбинация синглетного и триплетного состояний $A(2|T_0\rangle + |S\rangle)$, где $|S\rangle$ – синглетное состояние, $|T_0\rangle$ – триплетное состояние, с проекцией момента на ось z равной нулю. Найти коэффициент A. Найти вероятности возможных значений S_{1z} и S_{2z} в этом состоянии, а также средние значения этих проекций.
4. Два невзаимодействующих спина $S_1 = 3/2$ и $S_2 = 5/2$ находятся в таком состоянии, что их проекции на ось z равны $S_{1z} = 1/2$ и $S_{2z} = 3/2$. Найти разложение этого состояния по состояниям с определенными значениями полного момента и его проекции на ось z. Найти среднее значение квадрата полного момента спиновой системы.

Срок для выполнения задания – 2 недели.

Учебно-методическое обеспечение дисциплины

Образцы вопросов для подготовки к экзамену

1. Волновая функция в квантовой механике, ее нормировка. Представление физических величин в квантовой механике. Операторы координаты, импульса, полной энергии (гамильтониан).
2. Строгий вывод соотношения неопределенности.
3. Собственная функция и собственное значение оператора. Их физический смысл. Почему операторы физических величин эрмитовы?
4. Ортогональность волновых функций, соответствующих разным собственным значениям физического оператора. Волновая функция системы невзаимодействующих частиц.

5. Уравнение Шредингера (без вывода). Стационарные состояния. Стационарное уравнение Шредингера. Разложение общего решения уравнения Шредингера по стационарным волновым функциям.
6. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Стационарные волновые функции, их ортогональность. Уровни энергии.
7. Частица в трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Стационарные волновые функции. Уровни энергии. Вырождение.
8. Отражение и прохождение через потенциальные барьеры: ступеньку, прямоугольный барьер.
9. Гармонический осциллятор. Стационарные волновые функции.
10. Ортогональность волновых функций гармонического осциллятора. Уровни энергии гармонического осциллятора.
11. Получить выражения для поправок первого порядка к волновым функциям невырожденных состояний при стационарном возмущении.
12. Поправки первого и второго порядков к энергии невырожденного состояния при стационарном возмущении.
13. Условие применимости стационарной теории возмущений.
14. Вероятности переходов под действием возмущения конечной длительности.
15. «Правильные» волновые функции и соответствующие им значения энергии в стационарной теории возмущений при наличии вырождения.
16. Вектор состояния и волновая функция.
17. Матрица оператора физической величины. Смысл собственных векторов и собственных значения этой матрицы.
18. Преобразование волновых функций и операторов при переходе от одного представления к другому.
19. Дискретный и непрерывный базисы. Сходства и различия.
20. Операторы проекций момента импульса и квадрата момента. Коммутационные соотношения. Трактовка закона сохранения момента импульса в квантовой механике.
21. Повышающий и понижающий операторы, коммутационные соотношения для них.
22. Матричные элементы операторов $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{L}_x, \hat{L}_+, \hat{L}_-$ для момента $L = 2$.
23. Исходя из коммутационных соотношений между операторами проекции спина, найти матрицу оператора $\hat{S}_z$ для спина 1/2.

24. Триплетное и синглетное состояния системы из двух спинов по 1/2.
25. Правила сложения двух моментов.
26. Использование повышающего и понижающего операторов для решение задачи о сложении моментов.

Примеры задач на контрольных работах и на экзаменах

Первая контрольная работа

1. (100 б.) Частица находится в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{x/a}, & x \le 0, \\ Ce^{-x/b}, & x > 0, \end{cases}$$

где $b > 0$ и $a > 0$ – известные константы. Найдите среднюю координату частицы $\langle x \rangle$.

2. (120 б.) Докажите, что среднее значение $\langle xp_x + p_x x \rangle$ в любом состоянии является вещественной величиной.

3. (140 б.) На находящийся в основном состоянии линейный осциллятор массой m частотой ω с зарядом q на промежутке времени $-\pi/2\omega \le t \le \pi/2\omega$ действует однородное электрическое поле

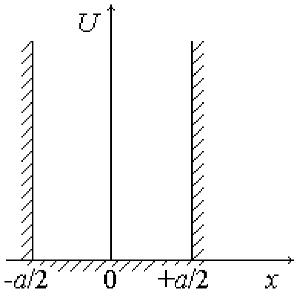
$$E = E_0 \cos \omega t,$$

направленное вдоль оси осциллятора. В какие состояния возможны переходы? Каковы вероятности этих переходов после выключении поля?

4. (160 б.) Частица массой m находится в одномерном потенциальном поле

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < -a/2, \\ -V_0 \cos \dfrac{2\pi x}{a}, & -a/2 \le x \le a/2, \\ \infty, & x > a/2, \end{cases}$$

где $V_0 > 0$ и $a > 0$ – известные константы.



Найдите с точностью до первого порядка теории возмущений волновую функцию основного состояния частицы и с точностью до второго порядка теории возмущений энергию этого состояния.

5. (180 б.) Частица массой m находится в прямоугольном ящике с бесконечно жесткими, непроницаемыми стенками. Найдите объем этого ящика, если известно, что семь первых уровней энергии равноотстоят друг от друга на величину ΔE. При этом первые три уровня являются невырожденными.

Вторая контрольная работа

1. (100 б.) Состояние частицы со спином 1/2 описывается в S^2, S_z - представлении волновой функцией

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Найдите средние значения $\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle, \langle S^2 \rangle$.

2. (120 б.) В базисе $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

В момент времени $t = 0$ система находилась в состоянии $|1\rangle$. Найдите волновую функцию системы в произвольный момент времени $\psi(t)$ в этом представлении.

3. (140 б.) В L^2, L_z-представлении волновая функция системы с моментом $l = 1$ имеет вид

$$\psi = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 0 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix},$$

где α – действительная постоянная. Как выглядит нормированная волновая функция в L^2, L_x-представлении? Чему равны $\langle L_z \rangle$ и $\langle L_x \rangle$?

4. (160 б.) В первом порядке теории возмущений найдите поправки к энергии для состояний атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$. Оператор возмущения

$$\hat{V} = A\hat{L}_x,$$

где A – действительная константа. Выпишите «правильные» волновые функции.

5. (180 б.) Система с орбитальным моментом $l = 1$ и спином $s = 1/2$ находится в состоянии

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|1,0\rangle|1/2,1/2\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}|1,1\rangle|1/2,-1/2\rangle.$$

Какие значения суммарного момента системы и с какой вероятностью можно обнаружить в этом состоянии?

Экзамен

1. (120 б.) Частица находится в состоянии, описываемой волновой функцией

$$\psi(x) = C\begin{cases} \cos\dfrac{\pi x}{a}, & -a/2 \le x \le 0, \\ \cos\dfrac{\pi x}{b}, & 0 \le x \le b/2, \\ 0, & x < -a/2,\ x > b/2, \end{cases}$$

причем $a < b$. Какова вероятность обнаружить частицу в промежутке $-a/2 \le x \le a/2$?

2. (150 б.) В одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, расположенными в точках $x = 0$ и $x = a$, находится частица массой m. Состояние частицы описывается волновой функцией

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_1 + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_2,$$

где ψ_1, ψ_2 – волновые функции стационарных состояний с квантовыми числами $n = 1$ и $n = 2$ соответственно. Найдите период и амплитуду колебаний среднего импульса частицы.

3. (170 б.) Имеется двумерный осциллятор массой m. Частоты колебаний осциллятора вдоль любых двух взаимно перпендикулярных осей, лежащих в плоскости колебаний, равны ω. На осциллятор действует возмущение $V(r) = \alpha/r$, α – известная константа, r – расстояние до точки минимума потенциальной энергии невозмущенного осциллятора. Найдите с точностью до первого порядка теории возмущений энергию основного состояния осциллятора.

4. (200 б.) Атом водорода находится в основном состоянии. В течении времени τ на него действует возмущение $V(r) = -\beta/r$, где β – известная положительная постоянная, r – расстояние до ядра атома. Найдите вероятность перехода в первое возбужденное состояние.

5. (220 б.) Две частицы со спинами $s_1 = s_2 = 1/2$ находятся в однородном магнитном поле с индукцией B. В момент времени $t = 0$ система находилась в синглетном состоянии. Гамильтониан взаимодействия первой частицы с полем

$$\hat{H}_1 = -\gamma_1 \hbar \vec{B} \cdot \hat{\vec{s}}_1,$$

гамильтониан второй равен

$$\hat{H}_2 = -\gamma_2 \hbar \vec{B} \cdot \hat{\vec{s}}_2,$$

где $\gamma_1 < \gamma_2$ – положительные постоянные. Спустя какое время система окажется в триплетном состоянии?

6. (240 б.) В некотором базисе гамильтониан невозмущенной системы и оператор возмущения имеют вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E & \sqrt{3}E & 0 \\ \sqrt{3}E & 3E & 0 \\ 0 & 0 & -E \end{pmatrix}, \qquad \hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & -V & 0 \\ -V & 0 & V \\ 0 & V & 0 \end{pmatrix}.$$

Найдите энергетические уровни системы во втором порядке теории возмущений.

Переэкзаменовка

1. (120 б.) Найдите среднюю координату частицы, состояние которой описывается волновой функцией

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ xe^{-x/a}, & 0 \le x < \infty \end{cases}.$$

2. (150 б.) Два первых уровня энергии двумерного осциллятора массой m равны второму и третьему уровням энергии частицы массой m в одномерной прямоугольной яме шириной a с бесконечно высокими стенками. Выпишите гамильтониан осциллятора.

3. (170 б.) На осциллятор массой m с частотой ω действует возмущение

$$V(x) = \beta\delta(x - a),$$

где β – известная постоянная. При каких значениях a поправка первого порядка к энергии первого возбужденного состояния осциллятора будет максимальна? Чему она при этом равна?

4. (200 б.) Найдите среднее значение энергии кулоновского взаимодействия электрона с ядром в атоме водорода, находящемся в состоянии с $n = 3$, $l = 2$.

5. (220 б.) Система, состоящая из трех слабо взаимодействующих частиц со спином 1/2, находится в состоянии с определенными значениями суммарного спина $s = 3/2$ и его проекции $s_z = 1/2$. С какой вероятностью подсистему, состоящую из двух первых частиц, можно обнаружить в триплетном состоянии $\left|T_0\right\rangle$?

6. (240 б.) В базисе состояний $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 2 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Найдите вид гамильтониана в энергетическом представлении. Какие значения энергии и с какими вероятностями можно обнаружить, если система находится в состоянии $|2\rangle$? Найдите среднее значение энергии в этом состоянии.

Вторая переэкзаменовка

1. (100 б.) Волновая функция в полярных координатах задана следующим образом:

$$\psi(r, \varphi) = \begin{cases} C\exp(i\cos^3\varphi), & \text{если} \quad r < R_0 \quad \text{и} \quad 0 \le \varphi < \pi \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}.$$

Найти средние значения $\overline{r}$ и $\overline{\varphi}$.

2. (100 б.) Найти собственные функции и собственные значения оператора

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}, \text{ если } \psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi).$$

3. (100 б.) Осциллятор с частотой ω и массой m находится в состоянии:

$$\psi(x) = C(\psi_1(x) + x\sqrt{m\omega/\hbar}\psi_3(x)).$$

Найти среднее значение энергии.

4. (100 б.) Имеется система из трех спинов $S_1 = S_2 = 1/2$ и $S_3 = 1$. Найти значения суммарного спина S. Сколько состояний имеют проекцию суммарного спина $S_z = 1$? Какие это состояния?

РЕШЕНИЯ

Контрольные работы 2007 г.

Первая контрольная работа

1. Прежде необходимо нормировать волновую функцию

$$C^2\left(\int_{-\infty}^{0} e^{2x/a}\mathrm{d}x + \int_{0}^{\infty} e^{-2x/b}\mathrm{d}x\right) = C^2\,\frac{1}{2}(a+b) = 1 \to C = \sqrt{2/(a+b)}.$$

Нормированная волновая функция равна

$$\psi(x) = \sqrt{2/(a+b)}\begin{cases} e^{x/a}, & x \le 0 \\ e^{-x/b}, & x > 0 \end{cases}.$$

По определению среднего

$$\langle x\rangle = \frac{2}{a+b}\left(\int_{-\infty}^{0} xe^{2x/a}\mathrm{d}x + \int_{0}^{\infty} xe^{-2x/b}\mathrm{d}x\right) = \frac{2}{a+b}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\int_{-\infty}^{0} e^{\alpha x}\mathrm{d}x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\int_{0}^{\infty} e^{-\beta x}\mathrm{d}x\right) =$$

$$= \frac{2}{a+b}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\frac{1}{\alpha} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\frac{1}{\beta}\right) = \frac{2}{a+b}\left(-\frac{a^2}{4} + \frac{b^2}{4}\right) = \frac{b-a}{2}.$$

2. Рассмотрим оператор $\hat{L} = x\hat{p}_x + \hat{p}_x x.$ Комплексно сопряженный ему оператор $\hat{L}^* = x\hat{p}_x^* + \hat{p}_x^* x.$ По определению среднего

$$\langle L\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi *(x)\hat{L}\psi(x)\mathrm{d}x \ \text{ и } \langle L\rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\hat{L}^*\psi^*(x)\mathrm{d}x.$$

Покажем, что $\langle L\rangle = \langle L\rangle^*$. С этой целью воспользуемся тем, что $\hat{x} = x$ и $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, и вычислим интеграл в выражении для $\langle L\rangle$ по частям:

$$\langle L\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi *(x)\hat{L}\psi(x)\mathrm{d}x =$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi*(x)(x\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}x)\psi(x)\mathrm{d}x = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi*(x)(x\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} + \frac{\partial x\psi(x)}{\partial x})\mathrm{d}x =$$

$$= -i\hbar(2\psi^*(x)x\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)(\frac{\partial x\psi^*(x)}{\partial x} + x\frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x})\mathrm{d}x) =$$

$$= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)(\frac{\partial x\psi^*(x)}{\partial x} + x\frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x})\mathrm{d}x = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)(\frac{\partial}{\partial x}x + x\frac{\partial}{\partial x})\psi^*(x)\mathrm{d}x =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)(\hat{p}^* x + x\hat{p}^*)\psi^*(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\hat{L}^*\psi^*(x)\mathrm{d}x = \langle L \rangle^*.$$

Таким образом, показано, что среднее значение $\langle xp_x + p_x x \rangle$ равно своему комплексно сопряженному значению $\langle xp_x + p_x x \rangle^*$. Это означает, что оно вещественное, а оператор $\hat{L} = x\hat{p}_x + \hat{p}_x x$ эрмитовский.

Можно было бы доказать, что оператор $\hat{L} = x\hat{p}_x + \hat{p}_x x$ эрмитовский, из чего следует, что среднее значение $\langle xp_x + p_x x \rangle$ в любом состоянии является вещественной величиной.

3. Возмущающее действие электрического поля на линейный осциллятор определяется оператором

$$\hat{V} = -exE_0 \cos \omega t.$$

Необходимые для решения задачи матричные элементы равны

$$V_{n0} = -eE_0 \cos \omega t \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)x\psi_0(x)\mathrm{d}x =$$

$$= -eE_0 \cos \omega t \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi) + \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi) \right) \psi_0(\xi)\mathrm{d}\xi =$$

$$= -eE_0 \cos\omega t\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n+1,0} + \sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n-1,0}\right) = -eE_0 \cos\omega t\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\delta_{n-1,0}.$$

Из полученного равенства следует, что

$$V_{10} = -eE_0 \cos\omega t\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad V_{n0} = 0 \text{ при } n \neq 1.$$

Таким образом, возможен только переход с основного уровня энергии на первый возбужденный. Вероятность такого перехода равна

$$w(0 \to 1) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-t_0}^{t_0} V_{10} e^{i\omega t}\mathrm{d}t\right|^2 = \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega\hbar}\left|\int_{-t_0}^{t_0}\cos\omega t e^{i\omega t}\mathrm{d}t\right|^2.$$

Интеграл по времени вычисляется несложным образом, если воспользоваться формулами Эйлера:

$$\int_{-t_0}^{t_0}\cos\omega t e^{i\omega t}\mathrm{d}t = \frac{1}{2}\int_{-t_0}^{t_0}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})e^{i\omega t}\mathrm{d}t = \frac{1}{2}\int_{-t_0}^{t_0}(e^{2i\omega t} + 1)\mathrm{d}t =$$

$$= \frac{e^{2i\omega t_0} - e^{-2i\omega t_0}}{4i\omega} + t_0 = \frac{1}{2\omega}\sin 2\omega t_0 + t_0 = \frac{\pi}{2\omega}.$$

Здесь использовано обозначение $t_0 = \dfrac{\pi}{2\omega}$.

Окончательный ответ

$$w(0 \to 1) = \frac{\pi^2 e^2 E_0^2}{8m\omega^3\hbar}.$$

4. Перенесем начало координат в точку $x = -a/2$: $y = x + a/2$. Тогда возмущение, действующее на частицу в бесконечно глубокой яме $0 \le y \le a$, примет вид

$$\hat{V} = V_0 \cos\frac{2\pi y}{a}.$$

Волновые функции частицы будут

$$\psi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n y}{a}.$$

Матричные элементы

$$V_{1n} = \frac{2}{a} V_0 \int_0^a \sin \frac{\pi y}{a} \cos \frac{2\pi y}{a} \sin \frac{\pi n y}{a} \, \mathrm{d}y =$$

$$= \frac{2}{\pi} V_0 \int_0^\pi \sin z \cos 2z \sin nz \, \mathrm{d}z = \frac{1}{\pi} V_0 \int_0^\pi (\sin 3z - \sin z) \sin nz \, \mathrm{d}z =$$

$$= \frac{1}{2\pi} V_0 \int_0^\pi (\cos(n-3)z - \cos(n+3)z - \cos(n-1)z + \cos(n+1)z) \, \mathrm{d}z =$$

$$= \frac{1}{2} V_0 (\delta_{n,3} - \delta_{n,1}).$$

Отличны от нуля только два матричных элемента $V_{11} = -V_0/2$ и $V_{13} = V_0/2$. В таком случае энергия основного состояния частицы в яме равна

$$E_1 = E_1^{(0)} + V_{11} + \frac{V_{13}^2}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - \frac{V_0}{2} - \frac{V_0^2 m a^2}{16\pi^2 \hbar^2}.$$

Правильная волновая функция основного состояния будет иметь вид

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} + \sum_{n \neq 1} \frac{V_{1n}}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi y}{a} - \frac{V_0 m a^2}{8\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi y}{a},$$

или, если вернуться к независимой переменной x,

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} + \frac{V_0 m a^2}{8\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{3\pi x}{a}.$$

5. Пусть энергия E и разность ее последовательных значений ΔE измеряются в единицах $\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$. Тогда энергия основного состояния частицы в ящике будет равна

$$E_1 = \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2},$$

где a, b, c – длины сторон ящика, квантовые числа имеют значения 1, 1, 1. Если у ящика две какие-либо стороны имеют равную длину, то уже второй уровень энергии будет вырожденный, что противоречит условию задачи. Итак, стороны ящика имеют разную длину. Предположим, что между длинами сторон выполняется соотношение $a > b > c > 0$ (это не нарушает общности исследования). Первое слагаемое в выражении для энергии первого уровня в силу сделанного предположения самое маленькое. Поэтому для второго уровня энергии можно написать

$$E_2 = \frac{4}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} = E_1 + \Delta E,$$

откуда с учетом выражении для энергии первого уровня следует, что $\Delta E = 3/a^2$, следовательно, $a^2 = 3/\Delta E$. Квантовые числа для второго уровня энергии имеют значения 2, 1, 1.

Энергия третьего уровня может определяться следующими наборами квантовых чисел: 3, 1, 1; 2, 2, 1; 1, 2, 1. Рассмотрим соответствующие выражения для энергии:

$$E_3 = \frac{9}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} = E_2 + \Delta E, \quad E_3 = \frac{4}{a^2} + \frac{4}{b^2} + \frac{1}{c^2} = E_2 + \Delta E,$$

$$E_3 = \frac{1}{a^2} + \frac{4}{b^2} + \frac{1}{c^2} = E_1 + 2\Delta E.$$

Первое из них оказывается невозможным: получается другое значение для ΔE. Второе противоречит принятому предположению: неравенству сторон ящика. Из третьего следует, что $\Delta E = 3/2b^2$, соответственно $b^2 = 3/2\Delta E$. Квантовые числа для третьего уровня энергии имеют значения 1, 2, 1.

Четвертый уровень энергии можно получить, увеличивая на единицу первое квантовое число (комбинация 2, 2, 1), либо третье из квантовых чисел, уменьшая при этом второе (комбинация 1, 1, 2). Соответственно можно написать два выражения для энергии четвертого уровня:

$$E_4 = \frac{4}{a^2} + \frac{4}{b^2} + \frac{1}{c^2} = E_3 + \Delta E, \quad E_4 = \frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{4}{c^2} = E_1 + 3\Delta E.$$

Первое равенство удовлетворяется автоматически. Из второго следует, что $\Delta E = 1/c^2$. При этом выполняется неравенство $a > b > c > 0$. Таким образом, четвертый уровень энергии вырожденный.

При получении пятого уровня энергии возможны наборы квантовых чисел: 3, 2, 1; 1, 3, 1; 2, 1, 2. Последний набор дает выражение для пятого уровня энергии

$$E_5 = \frac{4}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{4}{c^2} = E_1 + 4\Delta E.$$

Из него следует, что $\Delta E = 1/c^2$, как из второго выражения для четвертого уровня энергии.

Для шестого и седьмого уровней энергии можно показать, что единственными комбинациями квантовых чисел будут 1, 2, 2 и 2, 2, 2 соответственно. Энергия этих уровней определяется выражениями

$$E_6 = \frac{1}{a^2} + \frac{4}{b^2} + \frac{4}{c^2}, \quad E_7 = \frac{4}{a^2} + \frac{4}{b^2} + \frac{4}{c^2}.$$

Новых соотношений для длин сторон ящика не появляется.

Таким образом, условиям задачи удовлетворяют следующие длины сторон ящика:

$$a = \sqrt{3/\Delta E}, \quad b = \sqrt{3/2\Delta E}, \quad c = 1/\sqrt{\Delta E}.$$

Соответствующий объем ящика равен

$$V = \frac{3}{\Delta E\sqrt{2\Delta E}}.$$

Спектр состояний частицы (в пределах семи уровней энергии) выглядит следующим образом:

Энергия	Комбинация квантовых чисел
E_7	2, 2, 2
E_6	1, 2, 2
E_5	2, 1, 2
E_4	2, 2, 1; 1, 1, 2
E_3	1, 2, 1
E_2	2, 1, 1
E_1	1, 1, 1

Эти уровни равноотстоящие.

Вторая контрольная работа

1. Функция ненормированная. Выполняем нормировку:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \to C^*(1\ \ 2)C\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} = 5|C|^2 = 1 \to C = 1/\sqrt{5}.$$

Нормированная волновая функция в S^2, S_z -представлении имеет вид

$$\psi_{S^2, S_z} = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}.$$

Действуя стандартным образом, получаем искомые средние величины:

$$\langle S_x\rangle = \langle\psi|\hat{S}_x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(1\ \ 2)\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} = \frac{2}{5},$$

$$\langle S_y\rangle = \langle\psi|\hat{S}_y|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(1\ \ 2)\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} = 0,$$

$$\langle S_z\rangle = \langle\psi|\hat{S}_z|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(1\ \ 2)\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} = -\frac{3}{5}.$$

Оператор $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Среднее значение $\langle S^2 \rangle$ равно

$$\langle S^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(1\ \ 2)\frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}.$$

2. Чтобы найти собственные значения гамильтониана, решается секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} 2-E & 1 & 0 \\ 1 & 2-E & 0 \\ 0 & 0 & -E \end{vmatrix} = 0 = -E((2-E)^2 - 1) \quad \to \quad E = 0, 1, 3.$$

Собственные функции находятся из решения системы уравнений

$$\begin{cases} (2-E)C_1 + C_2 = 0, \\ C_1 + (2-E)C_2 = 0, \\ -EC_3 = 0, \\ |C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 = 1. \end{cases}$$

Подставляя в нее найденные значения E, получим наборы коэффициентов C_i и соответствующие собственные волновые функции гамильтониана:

для $E_1 = 0$ получим $C_1 = C_2 = 0$, $C_3 = 1$ и $\psi_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$;

для $E_2 = 1$ – $C_1 = -C_2 = 1/\sqrt{2}$, $C_3 = 0$ и $\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$;

$$\text{для } E_3 = 3 - \; C_1 = C_2 = 1/\sqrt{2}, \; C_3 = 0 \text{ и } \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Составляем матрицу преобразования

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Столбцы этой матрицы представляют собой собственные функции гамильтониана. Вектор-столбец из элементов базиса находится умножением матрицы S на вектор-столбец из собственных волновых функций гамильтониана

$$\begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \\ |\psi_3\rangle \end{pmatrix}.$$

Разложение векторов состояния $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ по собственным волновым функциям гамильтониана будет иметь вид

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle),$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle),$$

$$|3\rangle = |\psi_1\rangle.$$

Отсюда

$$|\psi_1\rangle = |3\rangle,$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle),$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle).$$

В начальный момент времени система находится в состоянии $|1\rangle,$ т. е. ее волновая функция при t = 0 равна

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle).$$

В произвольный момент времени волновая функция системы равна

$$|\psi(t)\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_2\rangle e^{-i\omega t} + |\psi_3\rangle e^{-3i\omega t}) = \frac{1}{2}e^{-2i\omega t}((|1\rangle - |2\rangle)e^{i\omega t} + (|1\rangle + |2\rangle)e^{-i\omega t}) =$$

$$= e^{-2i\omega t}(|1\rangle \cos\omega t - |2\rangle i \sin\omega t),$$

где $\omega = 1/\hbar.$

3. Функция ненормированная. Выполняем нормировку:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \to C^*(e^{-i\alpha}\ \ 0\ \ e^{i\alpha})C\begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 0 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = 2|C|^2 = 1 \to C = 1/\sqrt{2}.$$

Нормированная волновая функция в L^2, L_z-представлении имеет вид

$$\psi_{L^2,L_z} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 0 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix}.$$

Оператор проекции момента на ось x и его собственные значения и собственные функции в L^2, L_z–представлении имеют вид

$$\hat{L}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$L_x = 1 \;\; \psi_{L^2,L_z} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}; \quad L_x = 0 \;\; \psi_{L^2,L_z} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix};$$

$$L_x = -1 \;\; \psi_{L^2,L_z} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Составляем матрицу перехода в базис $\hat{L}_x$

$$S = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

Действуя этой матрицей на волновую функцию в L^2, L_z -представлении, получаем волновую функцию в в L^2, L_x -представлении:

$$\psi_{L^2,L_x} = S\psi_{L^2,L_z} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 0 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \cos\alpha \\ i\sqrt{2}\sin\alpha \\ \cos\alpha \end{pmatrix}.$$

В L^2, L_z -представлении оператор проекции момента на оси x указан выше, а оператор проекции момента на ось z имеет вид

$$\hat{L}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Действуя стандартным образом, получаем искомые средние величины:

$$\langle L_x \rangle = \langle \psi | \hat{L}_x | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\alpha} \ 0 \ e^{i\alpha}) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 0 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = 0,$$

$$\langle L_z \rangle = \langle \psi | \hat{L}_z | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\alpha} \ 0 \ e^{i\alpha}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 0 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = 0.$$

Можно найти средние значения проекций момента на оси координат другим способом. Известна волновая функция в L^2, L_x- и L^2, L_z-представлениях. Следовательно, известны вероятности измеряемых значений проекций момента на оси x и z соответственно. Тогда по известной формуле

$$\langle L_x \rangle = 1 \cdot \frac{1}{2} \cos^2 \alpha + 0 \cdot \sin^2 \alpha + (-1) \cdot \frac{1}{2} \cos^2 \alpha = 0.$$

Аналогично находится среднее значение $\langle L_z \rangle$.

4. Так как главное квантовое число $n = 2$, то орбитальное число l может принимать значения $l = 0, 1$. Следовательно, уровень энергии четырехкратно вырожден.

Оператор $\hat{L}_x$ можно выразить через повышающий и понижающий операторы

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-),$$

так что оператор возмущения принимает вид

$$\hat{V} = \frac{A}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-).$$

В результате действия этого оператора матричные элементы равны

$$V_{l_1 m_1, l_2 m_2} = \left\langle l_1, m_1 \left| \hat{V} \right| l_2, m_2 \right\rangle =$$

$$= \frac{A}{2}\left\langle l_1, m_1 \right| (\sqrt{(l_2 - m_2)(l_2 + m_2 + 1)} \left| l_2, m_2 + 1 \right\rangle +$$

$$+ \sqrt{(l_2 - m_2 + 1)(l_2 + m_2)} \left| l_2, m_2 - 1 \right\rangle).$$

С учетом ортогональности волновых функций матричные элементы принимают вид

$$V_{l_1 m_1, l_2 m_2} =$$

$$= \frac{A}{2}(\sqrt{(l_2 - m_2)(l_2 + m_2 + 1)}\delta_{m_1, m_2 + 1} + \sqrt{(l_2 - m_2 + 1)(l_2 + m_2)}\delta_{m_1, m_2 - 1})\delta_{l_1, l_2}.$$

В матричном виде оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 \\ 0 & b & 0 & b \\ 0 & 0 & b & 0 \end{pmatrix},$$

где элементы и строк, и столбцов соответствуют парам квантовых чисел (l, m) последовательно (0, 0). (1, -1), (1, 0), (1, 1); $b = A/\sqrt{2}$.

Решается секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} -E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -E & b & 0 \\ 0 & b & -E & b \\ 0 & 0 & b & -E \end{vmatrix} = E^2(E^2 - 2b^2) = 0 \rightarrow E = 0,\, 0,\, \pm\sqrt{2}b.$$

Поправки к энергии атома водорода в первом порядке теории возмущений равны $E_{1,3}^{(1)} = 0,\, E_{2,4}^{(1)} = \pm A.$ Четырехкратное вырождение частично снимается.

Чтобы найти для определенного значения энергии волновую функцию, необходимо решить систему уравнений с этим значением E

$$\begin{cases} -EC_1 = 0, \\ -EC_2 + bC_3 = 0, \\ bC_2 - EC_3 + bC_4 = 0, \\ bC_3 - EC_4 = 0, \\ |C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 + |C_4|^2 = 1. \end{cases}$$

Для $E_{2,4}^{(1)} = \pm A$ получаем $C_1 = 0, C_2 = C_4 = \dfrac{1}{2}, C_3 = \pm\dfrac{1}{\sqrt{2}}$, и «правильная» волновая функция имеет вид

$$\psi_{2,4}^{(0)} = \frac{1}{2} R_{2,1}(Y_{1,1} \pm \sqrt{2}Y_{1,0} + Y_{1,-1}).$$

Это решение отвечает l = 1, $m = \pm 1$. Для $E_{1,3}^{(1)} = 0$ из системы уравнений следует $C_3 = 0$, $C_2 = -C_4$, $C_1^2 + 2C_2^2 = 1$. Для $E_1^{(1)} = 0$ (в этом случае l = $m = 0$) должно быть $C_1 = 1$, $C_2 = C_3 = C_4 = 0$ и «правильная» волновая функция равна $\psi_1^{(0)} = R_{2,0}Y_{00}$. Для $E_3^{(1)} = 0$ (в этом случае $l = 1$, $m = 0$) $C_1 = C_3 = 0$, $C_2 = -C_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, «правильная» волновая функция равна

$$\psi_3^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} R_{2,1}(Y_{1,1} - Y_{1,-1}).$$

5. Возможные значения суммарного момента системы лежат в пределах от $l + s$ до $|l - s|$, т. е. j = 3/2, 1/2. Проекция этого момента на ось z по условию задачи равна j_z = 1/2. Заданный по условию вектор состояния необходимо разложить по векторам состояния с определенными значениями полного момента и его проекции на ось z:

$$\left|\psi\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\left|1,0\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}\left|1,1\right\rangle\left|1/2,-1/2\right\rangle = C_1\left|3/2,1/2\right\rangle + C_2\left|1/2,1/2\right\rangle.$$

Действуя повышающим оператором, получим

$$\frac{1}{\sqrt{5}}\sqrt{2}\left|1,1\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}\left|1,1\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{5}}(1+\sqrt{2})\left|1,1\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle = C_1\sqrt{3}\left|3/2,3/2\right\rangle.$$

Из этого равенства в силу очевидного тождества $\left|1,1\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle \equiv \left|3/2,3/2\right\rangle$ находим коэффициент C_1:

$$C_1 = \sqrt{\frac{2}{15}}(1+\sqrt{2}).$$

Таким образом, значение суммарного момента системы j = 3/2 можно обнаружить с вероятностью $w = C_1^2 = \frac{2}{15}(3+2\sqrt{2})$. Соответственно значение j = 1/2 обнаруживается с вероятностью $w = 1 - C_1^2 = \frac{1}{15}(9-4\sqrt{2})$.

Экзамен

1. Из условия нормировки находим постоянную C:

$$C^2 \left(\int_{-a/2}^{0} \cos^2 \frac{\pi x}{a} \mathrm{d}x + \int_{0}^{b/2} \cos^2 \frac{\pi x}{b} \mathrm{d}x \right) = 1 \to C = \frac{2}{\sqrt{a+b}}.$$

Искомая вероятность равна

$$w = \frac{4}{a+b} \left(\int_{-a/2}^{0} \cos^2 \frac{\pi x}{a} \mathrm{d}x + \int_{0}^{a/2} \cos^2 \frac{\pi x}{b} \mathrm{d}x \right) = \frac{2a + \frac{b}{\pi} \sin \frac{\pi a}{b}}{a+b}.$$

2. По условию задачи волновые функции стационарных состояний частицы и соответствующие значения энергии равны

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1,\, 2.$$

В зависимости от времени t волновая функция частицы имеет вид

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{3}} \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}.$$

Средний импульс частицы равен

$$\langle p \rangle = \int_0^a \psi^* \hat{p} \psi \mathrm{d}x = -\int_0^a \psi^* i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \mathrm{d}x =$$

$$= -i\hbar \frac{2}{3a} \int_0^a \left(\sin \frac{\pi x}{a} e^{i\omega_1 t} + \sqrt{2} \sin \frac{2\pi x}{a} e^{i\omega_2 t} \right) \times$$

$$\times \frac{\partial}{\partial x} \left(\sin \frac{\pi x}{a} e^{-i\omega_1 t} + \sqrt{2} \sin \frac{2\pi x}{a} e^{-i\omega_2 t} \right) \mathrm{d}x =$$

$$= -i\hbar \frac{2\pi}{3a^2} \int_0^a (\sin\frac{\pi x}{a} e^{i\omega_1 t} + \sqrt{2}\sin\frac{2\pi x}{a} e^{i4\omega_1 t}) \times$$

$$\times (\cos\frac{\pi x}{a} e^{-i\omega_1 t} + 2\sqrt{2}\cos\frac{2\pi x}{a} e^{-i4\omega_1 t}) \mathrm{d}x =$$

$$= -i\hbar \frac{2\pi}{3a^2} \int_0^a (\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a} + 4\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a} +$$

$$+ \sqrt{2}\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a} e^{i3\omega_1 t} + 2\sqrt{2}\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a} e^{-i3\omega_1 t}) \mathrm{d}x =$$

$$= -i\hbar \frac{\pi}{3a^2} \int_0^a (\sin\frac{2\pi x}{a} + 4\sin\frac{4\pi x}{a} + \sqrt{2}(\sin\frac{3\pi x}{a} + \sin\frac{\pi x}{a}) e^{i3\omega_1 t} +$$

$$+ 2\sqrt{2}(\sin\frac{3\pi x}{a} - \sin\frac{\pi x}{a}) e^{-i3\omega_1 t}) \mathrm{d}x =$$

$$= -i\hbar \frac{\pi}{3a^2} \sqrt{2} \int_0^a ((\sin\frac{3\pi x}{a} + \sin\frac{\pi x}{a}) e^{i3\omega_1 t} + 2(\sin\frac{3\pi x}{a} - \sin\frac{\pi x}{a}) e^{-i3\omega_1 t}) \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{8\sqrt{2} i\hbar}{9a} (e^{i3\omega_1 t} - e^{-i3\omega_1 t}) = -\frac{16\sqrt{2}\hbar}{9a} \sin 3\omega_1 t,$$

где $\omega_1 = E_1 / \hbar, \ \omega_2 = E_2 / \hbar = 4\omega_1.$

Амплитуда колебаний среднего импульса частицы равна

$$p_m = \frac{16\sqrt{2}\hbar}{9a},$$

частота колебаний $\omega = (E_3 - E_1)/\hbar = 3\omega_1 = \dfrac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}$, период колебаний

$$T = \frac{4ma^2}{3\pi\hbar}.$$

3. Волновая функция основного состояния линейного гармонического осциллятора имеет вид

$$\psi_0(x) = (2a/\pi)^{1/4} e^{-ax^2}, \quad a = m\omega/\hbar.$$

Волновая функция двумерного осциллятора в основном состоянии равна

$$\psi_0(x, y) = \psi_0(x)\psi_0(y) = \sqrt{2a/\pi} e^{-ar^2}, \quad r^2 = x^2 + y^2.$$

Поправка первого порядка к энергии основного состояния осциллятора вычисляется следующим образом:

$$E_0^{(1)} = V_{00} = \frac{2a}{\pi} \alpha \int_0^\infty e^{-2ar^2} \frac{1}{r} 2\pi r \mathrm{d}r = \alpha\sqrt{2\pi a}.$$

Энергия основного состояния осциллятора с точностью до первого порядка теории возмущений равна

$$E_0 = \hbar\omega + \alpha\sqrt{2\pi a}.$$

4. Состояние атома водорода описывается вектором состояний $|1, 0, 0\rangle$. Под действием возмущения атом переходит в состояние, которое описывается вектором состояний $|2, l, m\rangle$. При $n = 2$ возможные значения орбитального квантового числа $l = 0, 1$. Волновая функция исходного (основного) состояния четная, возмущение описывается также четной функцией, поэтому возможен переход только в состояние с четной волновой функцией без изменения магнитного квантового числа: $|1, 0, 0\rangle \to |2, 0, 0\rangle$. Соответствующие волновые функции имеют вид

$$\psi_{100} = R_{10}\mathrm{Y}_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp(-r/a),$$

$$\psi_{200} = R_{20}\mathrm{Y}_{00} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi a^3}} (1 - r/2a) \exp(-r/2a).$$

Необходимый матричный элемент равен

$$V_{200,100} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{200}^* \hat{V} \psi_{100}\, r^2 \mathrm{d}r \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi =$$

$$= -\frac{\beta}{2\sqrt{2}\pi a^3} \int_0^\infty (1 - r/2a) \exp(-3r/2a) r \mathrm{d}r 4\pi =$$

$$= -\frac{\sqrt{2}\beta}{a^3}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha} - \frac{1}{2a}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\alpha^2}\right)\int_0^\infty \exp(-\alpha r)\mathrm{d}r = -\frac{\sqrt{2}\beta}{a^3}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha} - \frac{1}{2a}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\alpha^2}\right)\frac{1}{\alpha} =$$

$$= -\frac{\sqrt{2}\beta}{a^3}\left(\frac{1}{\alpha^2} - \frac{1}{2a}\frac{2}{\alpha^3}\right) = -\frac{4\sqrt{2}\beta}{27a},$$

где использовано обозначение $\alpha = 3/(2a)$.

Искомая вероятность перехода равна

$$W_{100\to 200} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau V_{200,100} \exp(i\omega t)\mathrm{d}t\right|^2 = \frac{32\beta^2}{729a^2\hbar^2}\left|\frac{e^{i\omega\tau} - 1}{i\omega}\right|^2 =$$

$$= \frac{128\beta^2}{729a^2\hbar^2\omega^2}\sin^2\frac{\omega\tau}{2}.$$

Частота ω определяется разностью уровней энергии и в данном случае равна $\omega = \dfrac{3e^2}{32\pi\varepsilon_0 a\hbar}$.

5. Суммарный спин системы может принимать два значения $s = 1$ и 0. В синглетном состоянии спин системы $s = 0$, его проекция на ось z равна $s_z = 0$. В триплетном состоянии $s = 1$, $s_z = 0, \pm 1$. Волновые вектора синглетного и триплетного состояний с $s_z = 0$ имеют соответственно вид

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle), \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle),$$

где введены обозначения

$$\left|1\right\rangle = \left|1/2, 1/2\right\rangle \left|1/2, -1/2\right\rangle, \ \left|2\right\rangle = \left|1/2, -1/2\right\rangle \left|1/2, 1/2\right\rangle.$$

В начальном состоянии

$$\left|\psi(0)\right\rangle = \left|0, 0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|1\right\rangle - \left|2\right\rangle).$$

В произвольный момент времени

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|1\right\rangle e^{i(\gamma_1-\gamma_2)Bt/2} - \left|2\right\rangle e^{-i(\gamma_1-\gamma_2)Bt/2}) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i(\gamma_1-\gamma_2)Bt/2}(\left|1\right\rangle - \left|2\right\rangle e^{-i(\gamma_1-\gamma_2)Bt}).$$

Моменты времени, когда система оказывается в триплетном состоянии, определяются из условия

$$e^{-i(\gamma_1-\gamma_2)Bt} = -1.$$

Из него следует

$$(\gamma_2 - \gamma_1)Bt = (2n+1)\pi \to t = \frac{(2n+1)\pi}{(\gamma_2 - \gamma_1)B}, \quad n = 0, 1, \ldots .$$

6. Энергетические уровни системы во втором порядке теории возмущений находятся по формуле

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk}V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}},$$

где $E_n^{(0)}$ – собственные значения гамильтониана невозмущенной системы, V_{nk} – матричные элементы.

Собственные значения гамильтониана находятся из решения секулярного уравнения

$$\begin{vmatrix} E-\lambda & \sqrt{3}E & 0 \\ \sqrt{3}E & 3E-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -E-\lambda \end{vmatrix} = 0 \to \lambda = -E,\ 0,\ 4E.$$

Собственные функции являются решениями соответствующей системы уравнений

$$\begin{cases} (E-\lambda)C_1 + \sqrt{3}EC_2 = 0, \\ \sqrt{3}EC_1 + (3E-\lambda)C_2 = 0, \\ -(E+\lambda)C_3 = 0, \\ |C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 = 1. \end{cases}$$

Подставляя в нее первое собственное значение $\lambda_1 = -E$, получим $C_1 = C_2 = 0$, $C_3 = 1$. Собственная функция гамильтониана для этого значения λ имеет вид

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Аналогично для $\lambda_2 = 0$ собственная функция

$$\psi_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Для $\lambda_3 = 4E$ собственная функция $\psi_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}$.

Вычислим матричные коэффициенты

$$V_{11} = \langle \psi_1 | \hat{V} | \psi_1 \rangle = (0\ \ 0\ \ 1) \begin{pmatrix} 0 & -V & 0 \\ -V & 0 & V \\ 0 & V & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0,$$

$$V_{12} = V_{21} = \langle \psi_1 | \hat{V} | \psi_2 \rangle = \frac{1}{2} V, \quad V_{13} = V_{31} = \langle \psi_1 | \hat{V} | \psi_3 \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} V,$$

$$V_{23} = V_{32} = \langle \psi_2 | \hat{V} | \psi_3 \rangle = \frac{1}{2} V, \quad V_{22} = \langle \psi_2 | \hat{V} | \psi_2 \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} V,$$

$$V_{33} = \langle \psi_3 | \hat{V} | \psi_3 \rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2} V.$$

Во втором порядке теории возмущений уровни энергии системы равны

$$E_1 = -E - \frac{2V^2}{5E}, \quad E_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} V + \frac{3V^2}{16E}, \quad E_3 = 4E - \frac{\sqrt{3}}{2} V + \frac{17V^2}{80E}.$$

Переэкзаменовка

1. Прежде всего, необходимо проверить, является волновая функция нормированной, или нет.

$$\int_0^\infty |\psi|^2 \mathrm{d}x = \int_0^\infty x^2 e^{-2x/a} \mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\alpha^2} \int_0^\infty e^{-\alpha x} \mathrm{d}x = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\alpha^2} \frac{1}{\alpha} = \frac{2}{\alpha^3} = \frac{a^3}{4} \neq 1 \quad (\alpha = 2/a).$$

Нормированной будет волновая функция

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \dfrac{2}{a^{3/2}} x e^{-x/a}, & 0 \le x < \infty \end{cases}.$$

Тогда искомое среднее значение координаты частицы равно

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty |\psi|^2 \, \mathrm{x}\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{4}{a^3} \int_0^\infty x^3 e^{-2x/a} \mathrm{d}x = -\frac{4}{a^3} \frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\alpha^3} \int_0^\infty e^{-\alpha x} \mathrm{d}x = -\frac{4}{a^3} \frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\alpha^3} \frac{1}{\alpha} = \frac{4}{a^3} \frac{6}{\alpha^4} = \frac{3a}{2}.$$

2. Гамильтониан двумерного гармонического осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_y^2 y^2.$$

Задача сводится к нахождению значений ω_x и ω_y.

Энергия первых двух уровней рассматриваемого осциллятора равна

$$E_0 = \frac{\hbar}{2}(\omega_x + \omega_y) \text{ и } E_1 = \frac{\hbar}{2}(3\omega_x + \omega_y).$$

Для частицы в потенциальной яме энергия второго и третьего уровней равна соответственно

$$E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \text{ и } E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

По условию задачи имеем систему двух уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{\hbar}{2}(\omega_x + \omega_y) = \dfrac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \\ \\ \dfrac{\hbar}{2}(3\omega_x + \omega_y) = \dfrac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \end{cases},$$

откуда находим

$$\omega_x = \frac{5\pi^2\hbar}{2ma^2}, \omega_y = \frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}.$$

В результате гамильтониан осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + \frac{1}{2}m\left(\frac{5\pi^2\hbar}{2ma^2}\right)^2 x^2 + \frac{1}{2}m\left(\frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}\right)^2 y^2.$$

Для второго уровня энергии осциллятора возможно выражение $E_1 = \frac{\hbar}{2}(\omega_x + 3\omega_y)$. Значения ω_x и ω_y поменяются местами.

3. Волновая функция первого возбужденного состояния невозмущенного осциллятора имеет вид

$$\psi_1 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,x\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right).$$

Поправка первого порядка к энергии первого возбужденного состояния осциллятора при действии возмущения равна

$$\Delta E_1^{(1)} = V_{11} = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\hat{V}\psi_1\mathrm{d}x = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2}\beta\int_{-\infty}^{\infty}x^2\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right)\delta(x-a)\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2}\beta a^2\exp\left(-\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right).$$

Условия максимума функции $f(a)$ есть

$$\mathrm{d}f/\mathrm{d}a = 0,\ \mathrm{d}^2f/\mathrm{d}a^2 < 0.$$

Найдем максимум функции

$$f = a^2\exp\left(-\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right).$$

Приравнивая нулю первую производную

$$\mathrm{d}f/\mathrm{d}a = 2a\exp\left(-\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right)\left(1-\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right) = 0,$$

получим значения

$$a = 0, \pm\infty, \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Вторая производная

$$\mathrm{d}^2 f / \mathrm{d}a^2 = 2\exp\left(-\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right)\left(1 - 5\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right)$$

отрицательна только при

$$a = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Эти значения дают искомый максимум поправки к энергии

$$\Delta E_1^{(1)} = \frac{2\beta}{e}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}.$$

4. Волновая функция атома водорода в рассматриваемом состоянии равна

$$\psi_{3,2,m} = R_{3,2} Y_{2,m}.$$

Вычисляем среднее значение энергии кулоновского взаимодействия электрона с ядром атома

$$\langle U \rangle = -\int_0^\infty R_{3,2} \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} R_{3,2} r^2 \mathrm{d}r \int_{(4\pi)} \left| Y_{2,m} \right|^2 d\Omega =$$

$$= -\frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int_0^\infty R_{3,2}^2 r \mathrm{d}r = -\frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{16}{30 \cdot 81^2 a^3} \int_0^\infty e^{-2r/(3a)} (r/a)^4 r \mathrm{d}r =$$

$$= -\frac{4q_e^2}{30 \cdot 81^2 \pi\varepsilon_0 a} \int_0^\infty e^{-2r/(3a)} (r/a)^5 \mathrm{d}(r/a) =$$

$$= \frac{4q_e^2}{30\cdot 81^2 \pi\varepsilon_0 a} \frac{\mathrm{d}^5}{\mathrm{d}\alpha^5} \int_0^\infty e^{-\alpha r/a} \mathrm{d}(r/a) = \frac{4q_e^2}{30\cdot 81^2 \pi\varepsilon_0 a} \frac{\mathrm{d}^5}{\mathrm{d}\alpha^5} \frac{1}{\alpha} =$$

$$= -\frac{4q_e^2}{30\cdot 81^2 \pi\varepsilon_0 a} \frac{5!}{\alpha^6} = -\frac{q_e^2}{36\pi\varepsilon_0 a}.$$

Здесь интеграл вычисляется с применением дифференцирования по параметру α = 2/3; собственная функция

$$R_{3,2} = \frac{4}{81\sqrt{30}a^{3/2}} \exp(-r/(3a))(r/a)^2;$$

боровский радиус равен $a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e q_e^2}$. Окончательно

$$\langle U \rangle = -m_e \left(\frac{q_e^2}{12\pi\varepsilon_0\hbar} \right)^2.$$

5. Подсистема из двух слабо взаимодействующих частиц со спином 1/2 каждая может обладать суммарным спином $s = 1$ или 0, находясь соответственно в триплетном или синглетном состоянии. По условию подсистема имеет спин $s = 1$ и его проекцию на ось z, равную $s_z = 0$. Это состояние дают две комбинации векторов:

$$|1/2,-1/2\rangle|1/2,1/2\rangle \text{ и } |1/2,1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle.$$

Выражение для заданного триплета через эти вектора можно получить, действуя понижающим оператором на очевидное равенство

$$|1,1\rangle = |1/2,1/2\rangle|1/2,1/2\rangle.$$

Имеем

$$J_-|1,1\rangle = \sqrt{2}|1,0\rangle =$$

$$= J_-|1/2,1/2\rangle|1/2,1/2\rangle = |1/2,-1/2\rangle|1/2,1/2\rangle + |1/2,1/2\rangle|1/2,-1/2\rangle,$$

откуда

$$\left|T_0\right\rangle = \left|1,0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|1/2,-1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle + \left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,-1/2\right\rangle\right).$$

Полная система (из трех частиц) находится в состоянии $\left|3/2,1/2\right\rangle$. Выражение для этого вектора можно получить, действуя понижающим оператором на также очевидное равенство

$$\left|3/2,3/2\right\rangle = \left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle.$$

Имеем

$$J_-\left|3/2,3/2\right\rangle = \sqrt{3}\left|3/2,1/2\right\rangle =$$

$$= J_-\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle = \left|1/2,-1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle +$$

$$+\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,-1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle + \left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,-1/2\right\rangle,$$

откуда

$$\left|3/2,1/2\right\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\left|1/2,-1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle + \left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,-1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle +\right.$$

$$\left.+\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,1/2\right\rangle\left|1/2,-1/2\right\rangle\right).$$

Из данного выражения для состояния системы видно, что подсистеме, состоящей из двух первых частиц и находящейся в триплетном состоянии, отвечают первые два слагаемых. Следовательно, искомая вероятность подсистемы находиться в состоянии $\left|T_0\right\rangle$ равна W = 2/3.

6. Чтобы найти собственные значения гамильтониана, решается секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} 1-E & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 2-E & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 2-E \end{vmatrix} = 0 = (2-E)((1-E)(2-E)-2) = E(2-E)(E-3) \quad \to$$

$$\to \quad E = 0,\, 2,\, 3.$$

Гамильтониан в энергетическом представлении имеет вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Собственные функции находятся из решения системы уравнений

$$\begin{cases} (1-E)C_1 + \sqrt{2}C_3 = 0, \\ (2-E)C_2 = 0, \\ \sqrt{2}C_1 + (2-E)C_3 = 0, \\ |C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 = 1. \end{cases}$$

Подставляя в нее найденные значения E, получим наборы коэффициентов C_i и соответствующие собственные волновые функции гамильтониана:

для $E_1 = 0$ получим $C_1 = -\sqrt{\dfrac{2}{3}},\, C_2 = 0,\, C_3 = \dfrac{1}{\sqrt{3}}$ и $\psi_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$;

для $E_2 = 2 -$ $C_1 = 0,\, C_2 = 1,\, C_3 = 0$ и $\psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$;

$$\text{для } E_3 = 3 - \; C_1 = 1/\sqrt{3}, \; C_2 = 0, C_3 = \sqrt{2/3} \; \text{ и } \; \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Вектор состояния $\left|2\right\rangle$ является собственным. Следовательно, при измерении можно обнаружить только значение энергии E_2 = 2. Соответствующая вероятность $W = 1$. Средняя энергия системы равна $\left|E\right\rangle = 2$.

Вторая переэкзаменовка

1. Нормируем волновую функцию

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{R_0} \left|\psi\right|^2 r \mathrm{d}r = \left|C\right|^2 \pi R_0^2 / 2 = 1 \quad \rightarrow \quad C = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{R_0}.$$

Находим средние значения

$$\bar{r} = \int_0^{\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{R_0} \psi^* r \psi r \mathrm{d}r = \frac{2}{3} R_0; \quad \bar{\varphi} = C^2 \int_0^{\pi} \varphi \mathrm{d}\varphi R_0^2 / 2 = \frac{\pi}{2}.$$

2. Собственные функции и собственные значения оператора $i\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$ находятся из решения уравнения

$$i\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\varphi} = a\psi.$$

Ему удовлетворяет функция $\psi = C\exp(-ia\varphi)$. Чтобы она была собственной функцией оператора, она должна быть однозначной. Из условия ее однозначности следует $\exp(-ia2\pi) = 1$, откуда $a = n$, где n – любое целое число $(n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$. Постоянная интегрирования C находится из условия нормировки: $C = 1/\sqrt{2\pi}$. Таким образом, собственные функции и собственные значения оператора равны

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-in\varphi), \; n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

3. Перейдем к безразмерной независимой переменной $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$. Волновая функция в этом случае примет вид

$$\psi(\xi) = C(\psi_1(\xi) + \xi\psi_3(\xi)) = C(\psi_1(\xi) + \sqrt{\frac{3}{2}}\psi_2(\xi) + \sqrt{2}\psi_4(\xi)).$$

Нормирование волновой функции дает возможность вычислить постоянную C:

$$C^2(1 + 3/2 + 2) = 1 \to C = \sqrt{2/9}.$$

Нормированная волновая функция равна

$$\psi(\xi) = \sqrt{\frac{2}{9}}\psi_1(\xi) + \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_2(\xi) + \frac{2}{3}\psi_4(\xi).$$

Определяем значения энергии и вероятности их обнаружения при измерении:

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad w_1 = \frac{2}{9}; \;\; E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega \quad w_2 = \frac{1}{3}; \;\; E_4 = \frac{9}{2}\hbar\omega \quad w_4 = \frac{4}{9}.$$

Среднее значение энергии равно $\overline{E} = \sum E_i w_i = \dfrac{19}{6}\hbar\omega.$

4. Подсистема из двух слабо взаимодействующих частиц со спином 1/2 каждая может обладать суммарным спином $S_{1,\,2} = 1$ или 0. Включение в систему спина $S_3 = 1$ дает значения суммарного спина $S \equiv S_{1,\,2,\,3} = 2, 1, 0$ для $S_{1,\,2} = 1$ и $S \equiv S_{1,\,2,\,3} = 1$ для $S_{1,\,2} = 0$. Таким образом, суммарный спин рассматриваемой системы трех спинов может принимать значения $S = 2, 1, 0$. Его проекцию на ось z, равную $S_z = 1$, имеют три состояния:

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle|1,0\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right)|1,1\rangle,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle - \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right)|1,1\rangle.$$

Получить их можно, если исходить, например, из очевидного тождества для первых двух спинов

$$\left|1,1\right\rangle \equiv \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Применение понижающего оператора дает

$$J_-\left|1,1\right\rangle = \sqrt{2}\left|1,0\right\rangle =$$

$$= J_-\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle,$$

откуда

$$\left|1,0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right).$$

Волновой вектор $\left|0,0\right\rangle$ может иметь вид

$$\left|0,0\right\rangle = C_1\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + C_2\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Он должен быть ортогонален волновым векторам других состояний системы первых двух спинов, в частности, вектору $\left|1,0\right\rangle,$ т. е. имеет место равенство $\left\langle 1,0 \middle| 0,0\right\rangle = 0.$ Это позволяет найти вектор

$$\left|0,0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle - \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right).$$

Только в состояниях $\left|1,1\right\rangle, \left|1,0\right\rangle, \left|0,0\right\rangle$ система первых двух спинов совместно с третьим спином дают объединенную систему, имеющую проекцию суммарного спина $S_z = 1$.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Пуртов П. А., Замураев В. П. Учебно-методический комплекс. Физика. Квантовая механика. Новосибирск, НГУ, 2011.
2. В. А. Толкачев и др. Задачи по квантовой механике. Новосибирск: НГУ, 2003.
3. Замураев В. П., Калинина А. П. Задачи с решениями по квантовой механике: учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун - т, 2010.
4. Замураев В. П., Калинина А. П. Задачи с решениями контрольных работ по квантовой механике: учеб. пособие для вузов. Новосибирск: Изд - во НГУ, 2012.
5. Шпольский Э. В. Атомная физика. М.: Наука, 1974, Т. 2.
6. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. М.: Высш. шк., 1963.

б) дополнительная литература:

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
2. Левич Р. Г. и др. Курс теоретической физики. М.: Наука, 1971, Т. 2.
3. Дирак П. А. Принципы квантовой механики. М.: Физматгиз, 1960.
4. Фейнман Р. и др. Фейнмановские лекции по физике. М.: Мир, 1978, Т. 8,9.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- Персональные компьютеры, мультимедийный проектор, ноутбуки, экраны.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с учетом рекомендаций ПрООП ВПО по направлению «020100 ХИМИЯ», квалификация (степень) «бакалавр», а также в соответствии с Образовательным стандартом высшего профессионального образования, принятым в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет.

Авторы: Пуртов Петр Александрович, д.ф.-м.н., профессор кафедры общей физики и химической и биологической физики НГУ, зам. директора. ИХКГ СО РАН;

Замураев Владимир Павлович, доцент кафедры общей физики НГУ, снс ИТПМ СО РАН;

Рецензент Калинина Анна Павловна, доцент кафедры общей физики НГУ, снс ИТПМ СО РАН.

УМК рассмотрен и одобрен на заседании кафедры общей физики ФФ «22» августа 2014 года

Заведующий кафедрой общей физики ФФ НГУ

д.ф.-м.н., проф. А. Г. Погосов