

ПРОГРАММА КУРСА

"Дополнительные главы теории атомов, молекул и твердых тел"

ДЛЯ АСПИРАНТОВ ПО КАФЕДРЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ СПЕЦИАЛЬНОСТЬ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА» (01.04.02) 64 часа

1. ТЕОРИЯ АТОМА (часть I)

Теория атома водорода. Движение электрона в кулоновском поле. Разделение переменных. Решение радиального уравнения. Импульсное представление. Четырехмерная симметрия. Четырехмерные сферические функции.

Основы теории многоэлектронных атомов. Квантовая задача многих тел. Принцип неразличимости частиц. Перестановочная симметрия волновых функций. Одноэлектронное приближение. Детерминант Слэтера. Принцип Паули. Метод матрицы плотности в задаче многих тел. Редуцированные матрицы плотности. Одноэлектронное приближение для матрицы плотности. Матрицы переходов. Вариационный принцип для уравнения Шредингера. Метод Ритца. Вариационная теория возмущений. Вариация масштаба и теорема вириала. Уравнения Хартри-Фока. Отделение спиновых и угловых переменных. Случай заполненных оболочек.

Основы теории атомных спектров. Момент количества движения. Сложение двух моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана. Сложение трех и более моментов. Коэффициенты Рака и $3nj$ - символы. Неприводимые тензорные операторы. Сферические компоненты вектора. Разложение тензора второго ранга на неприводимые тензоры. Тензорное произведение. Теорема Вигнера-Эккарта. LS - связь. Классификация состояний. Уровни, термы, конфигурации. Термы, возможные для данной конфигурации. Квивалентные электроны. Генеалогические характеристики термов. Квантовое число старшинства. Квазиспин. Построение собственных функций операторов L^2 , L^2 , S_z , S_z . Случай незаполненных оболочек. Генеалогические коэффициенты. Энергии термов. Правило сумм Слэтера. Правила Хунда. Спин-орбитальное взаимодействие. Правило интервалов Ланде. jj - связь. Классификация состояний. Уровни возможные для данной конфигурации. Промежуточная связь.

Статистическая теория атома. Уравнение Томаса-Ферми. Решение уравнения Томаса-Ферми для нейтрального атома и положительного иона. Энергетические соотношения. Поправка Ферми-Амальди. Вывод уравнения Томаса-Ферми из уравнений Хартри-Фока. Обменные и квантовые поправки. Решение уравнений Томаса-Ферми с обменом.

5. Электронная корреляция в атомах. Различные методы учёта корреляции: вариационный метод, наложение конфигураций, расширенный и

неограниченные методы Хартри-Фока, теория возмущений, кластерные методы. Кластерное разложение волновой функции. Двухчастичное уравнение. Парные корреляции. Адиабатическое приближение. Поляризационный потенциал. Учет обмена.

Влияние атомного ядра на спектры атомов. Учет движения ядра. Изотопический эффект. Учет распределения электрического заряда внутри ядра. Обменный изотопический эффект.

2. ТЕОРИЯ АТОМА (часть II).

Уравнение Дирака. Ковариантная форма уравнения Дирака. Уравнение непрерывности. Зарядовое сопряжение. Алгебра матриц Дирака. Релятивистский электрон в центральном поле. Чётность состояний. Радиальные уравнения. Нерелятивистский предел. Уравнение Паули. Релятивистские поправки.

Взаимодействие электронов с электромагнитным полем. Представление вторичного квантования для электронов. Электронный гамильтониан и оператор тока. Потенциалы электромагнитного поля. Градиентная инвариантность. Спин фотона. Волновые функции фотонов. Гамильтониан взаимодействия. Оператор эволюции и S-матрица.

Графическая техника Фейнмана. Теорема Вика. Электронный и фотонный пропагаторы. Картина Фарри.

Взаимодействие атомов с излучением. Излучение одного фотона. Вероятности переходов. Правила сумм. Спонтанное и вынужденное излучение и поглощение света. Мультипольное излучение. Вероятности переходов в атоме водорода и многоэлектронных атомах. Фотоионизация. Автоионизационные состояния. Излучение атомов в ридберговских состояниях. Рентгеновские спектры атомов и ионов. Многофотонные процессы в атомах. Теория формы спектральной линии.

Эффекты несохранения чётности в атомах. Взаимодействие нейтральных токов. P-нечётные эффективные потенциалы. Слабое взаимодействие электронов с ядром. Взаимодействие анапольного момента ядра с электронным током. Псевдоскалярные корреляции. Смешивание состояний с противоположной чётностью. Смешивание M1 и E1 переходов. Возникновение циркулярной поляризации. Атомные эксперименты по поиску несохранения четности.

3. ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА (часть I).

Основы зонной теории. Адиабатическое приближение в теории твердого тела. Приближения, ведущие к одноэлектронной зонной теории. Блоховские функции. Общий характер энергетического спектра электронов в кристалле. Аналитические свойства блоховских функций и энергетических зон в одномерном случае. Функции Ванье и их свойства.

Приближенные методы расчета зонной структуры. Метод плоских волн.

Метод функций Грина. Псевдопотенциал. Полностью ортогонализированные плоские волны. Проблемы переполненности базиса.

Статистика электронов в кристаллах. Заполнение электронных состояний. Диэлектрики, металлы, полу проводники. Поверхность Ферми и уровень Ферми.

Основы динамики электронов в кристаллах. Уравнения движения в представлении Ванье в присутствии внешних полей. Полуклассическая динамика электронов в твердом теле. Движение в постоянном электрическом и магнитном полях. Поверхность Ферми и методы её измерения. Циклотронный резонанс.

Электронная структура кристаллов с дефектами. Приближение эффективной массы. Метод функций Грина. Локализованные и резонансные состояния.

Поверхность кристаллов. Методы анализа структуры поверхности. Дифракция медленных электронов, Оже-спектроскопия, туннельный микроскоп. Явления на контактах разнородных кристаллов.

4. ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА (часть II).

Теория Хартри-Фока. Многоэлектронная волновая функция. Орбитали, спин-орбитали. Базис слейтеровских детерминантов. Редуцированные матрицы плотности: определение, свойства, соотношения. Натуральные орбитали и натуральные числа заполнения. Симметрия. Конфигурация, одноконфигурационное приближение. Энергия состояния, терма, конфигурации. Заполненные оболочки, одnodетерминантный случай. Применение вариационного принципа. Проблема недиагональных множителей Лагранжа. Канонические уравнения Хартри-Фока. Незаполненные оболочки. Нелинейность уравнений Хартри-Фока, выбор конфигурации, правило заполнения уровней. Наложение конфигураций.

Диэлектрики, основное состояние. Локализованные орбитали. Проблема неортогональности. Орбитали, локализованные на ядрах. Теория Лёвдина щелочно-галогидных кристаллов. Уравнения Адамса-Гильберта. Основное состояние кристаллов типа MgO. Орбитали, локализованные на связях. Основное состояние полупроводников типа Si.

Диэлектрики, возбужденное состояние. Оптические переходы, формула Кубо. Зона-зонные переходы. Экситоны. Экситоны Френкеля и Ванье-Мотта. Молекулярные кристаллы. Давыдовское расщепление.

Металлы. Однородный электронный газ, предел малой и большой плотности. Вигнеровский электронный кристалл. Неоднородный электронный газ. Щелочные металлы.

Метод функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционный функционал. Поправки на самодействие. Результаты расчёта конкретных систем.

Квантовый метод Монте-Карло.

5. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ

Уравнения Максвелла. Функция Лагранжа для электромагнитного поля. Тензор энергии-импульса. Разложение потенциалов на плоские волны. Поле как совокупность осцилляторов. Квантование электромагнитного поля.

Состояние фотона с определенным импульсом и поляризацией. Смешанные состояния. Поляризационная матрица плотности для фотонов. Спин фотонов и его связь с поляризацией. Спиральность. Состояния фотона с определенным моментом и четностью. Шаровые векторы.

Уравнение Дирака. Зарядовое сопряжение. Алгебра матриц Дирака. Свободный электрон. Состояния электрона с определенным импульсом. Поляризационные состояния электронов. Поляризационная матрица электронов. Состояния электронов с определенным моментом и четностью. Шаровые спиноры. Электрон во внешнем поле. Квантование электронно-позитронного поля. Функция Лагранжа и тензор энергии-импульса для электронно-позитронного поля.

Функция Лагранжа взаимодействующих электромагнитного и электронно-позитронного полей. Представление взаимодействия. Оператор эволюции и матрица рассеяния. Реакции со свободными электронами. Диаграммная техника для свободных электронов. Тормозное излучение электронов на ядрах.

Картина Фарри. Диаграммная техника для связанных электронов. Электронный пропагатор. Фотонный пропагатор в фейнмановской и кулоновской калибровках.

Излучение фотона с определенным импульсом и поляризацией. Вероятность перехода. Усреднение по поляризациям. Общие соотношения между радиационными процессами. Коэффициенты Эйнштейна. Излучение фотонов с определенным моментом и четностью. Двухфотонные процессы. Рассеяние фотона на связанном электроне. Многофотонные процессы.

Вычисление сдвига уровней энергии. Формула Гелл-Манна и Лоу. Кулоновское взаимодействие электронов (1-ый и 2-ой порядки). Обмен поперечным фотоном. Оператор Брейта.

Естественная ширина уровня. Вычисление радиационной и автоионизационной ширины. Радиационные поправки к уровням энергии. Лэмбовский сдвиг. Вычисление низкоэнергетической части собственной энергии электрона. Форма спектральной линии.

6. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ В ЗАДАЧЕ МНОГИХ ТЕЛ

Квантовая механика в представлении вторичного квантования. Основные сведения из теории вторичного квантования систем тождественных частиц. Операторы поля, гамильтонианы, уравнения движения.

S-матрица в квантовой теории многих частиц. Теорема Вика. Диаграммы

Фейнмана. Правила построения диаграмм, суммирование выделенных подпоследовательностей, факторизация вакуумных диаграмм. Дырочный формализм. Особенности диаграммной техники для электрон-фононного и парного взаимодействий. Электронные фотонные и фононные пропагаторы.

Метод полевых функций Грина. Цепочки зацепляющихся уравнений для функций Грина. Метод расщепления уравнений цепочки. Уравнения Дайсона. Теория возмущений для функций Грина. Разложения по связанным графам. Формулы для энергии квантовых систем в методе функций Грина. Спектральные представления, аналитические свойства причинных функций Грина. Функции Грина для систем во внешних полях.

Основные приближения теории многих тел в полевой формулировке. Приближение Хартри-Фока, приближения Тамма-Данкова. Сжатые и разреженные системы ферми-частиц. Приближение Бракнера и приближение случайных фаз.

Модель однородного электронного газа: звуковые волны, плазменные колебания, корреляционная энергия и затухание Ландау. Приближение случайной фазы в теории неоднородных систем.

6. Теория сверхпроводимости. Общие сведения и выбор модели, гамильтониан взаимодействия в модели Бардина-Купера-Шриффера. Феномен Купера, неустойчивость основного состояния ферми частиц относительно притяжения. Существование спаренных состояний, энергетическая щель, возбуждения. Сверхпроводящие состояния во внешнем электромагнитном поле. Высокотемпературная сверхпроводимость.

Спиновые волны. Спин-спиновое взаимодействие. Алгебра спиновых операторов.

Применение полевых методов в квантовой химии. Операторы унитарной группы. Диаграммная техника, формулировка основных приближений и теорем.

7. ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ МОЛЕКУЛ

Общие теоремы. Простейшие системы. Теорема Гельмана-Фейнмана. Условие Като. Метод Ритца. Теорема Хиллерааса-Ундгейма. Молекулярный ион водорода. Метод ЛКАО, связывающие и разрыхляющие орбиты. Деление переменных в сфероидальных координатах. Неадиабатические поправки. Применение в исследовании мюонного катализа. Молекула водорода. Метод МО ЛКАО. Метод Гайтлера-Лондона. Вариационные волновые функции. Дипольный момент несимметричных изотопических замещенных.

Метод самосогласованного поля. Уравнения Рутана. Случаи замкнутых и открытых оболочек. Вычисления молекулярных интегралов в гауссовском базисе. Теорема Купманса. Теорема Бриллюэна. Матрица плотности. Натуральные орбитали. Систематика состояний двухатомных молекул.

Методы наложения конфигураций. Проблема N-представимости. Простой метод наложения конфигураций. Численные методы отыскания собственных значений больших матриц. Многоконфигурационный метод ССП. Метод CASSCF.

8. КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ МОЛЕКУЛ

Строгие законы сохранения. Коллективные переменные. Операторы импульса и момента импульса в коллективных переменных. Теорема Вигнера-Гиршфельдера. Функции Вигнера. Учет спина электронов.

Адиабатическое приближение. Приближение Борна-Оппенгеймера. Теорема Братцева. Вариационное адиабатическое приближение.

Двухатомные молекулы. Нерелятивистский гамильтониан двухатомных молекул. Свойства симметрии электронных термов. Ядерное уравнение. Разделение колебательного и вращательного движений. Решение колебательного уравнения в гармоническом приближении. Электронная, колебательная и вращательная энергии. Ангармонические поправки. Учет спин-орбитального взаимодействия. Случаи "а" и "б" по Гунду. Строгие свойства симметрии стационарных состояний двухатомных молекул. Спектры двухатомных молекул. P, Q и R - ветви. Факторы Хенля-Лондона. Неадиабатические поправки к волновым функциям. Λ -удвоение.

Многоатомные молекулы. Оператор кинетической энергии. Колебательный спектр. Колебательный момент молекул типа симметрического волчка и линейных молекул. Резонанс Ферми. Теория CO₂ - лазера. Вращательный спектр молекул типа шарового и симметрического волчка. Дискретное квазиклассическое приближение. Вращательные спектры молекул типа асимметрического волчка. Эффекты Яна-Теллера и Реннера.

9. АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ ВО ВНЕШНИХ СТАТИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Системы в основном и слабозбужденных состояниях. Штарк-эффект для атомов (водород и не водородоподобные атомы). Дипольный момент и статическая поляризуемость молекул. Методы расчета поляризуемости: метод Хиллерааса, связанная теория возмущений, метод Тамма-Данкова, метод конечного поля. Эффект Зеемана. Фактор Ланде и g-фактор атома. Магнитная восприимчивость атомов и молекул. Проблема калибровки векторного потенциала. Вариационные принципы для восприимчивости. Гироманетизм молекул. Колебательный магнетизм молекул типа симметрического волчка.

Высоковозбужденные (ридберговские) атомы и молекулы в слабых внешних полях. Штарк-эффект. Атом водорода: формула Эпштейна-Паули. Неводородоподобные атомы: случаи слабого и сильного взаимодействия ридберговского электрона с остовом. Квадратичный эффект Зеемана для ридберговских атомов. Теория Соловьева. Трактровка на основе дискретного метода ВКБ. Распределение сил осцилляторов в спектрах ридберговских атомов в магнитном поле. Смешанный Штарк-Зееман эффекты. Случаи параллельных, скрещенных, взаимно перпендикулярных и почти перпендикулярных полей.

Высоковозбужденные системы в сильных полях. Теория Гутцвиллера (квазиклассический предел пропагатора). Роль замкнутых периодических орбит. Атом водорода с $n \gg 1$ в сильном электрическом поле. Околопороговые осцилляции в сечении фотоионизации. Атом водорода с $n \gg 1$ в сильном магнитном поле. Квазиандауские осцилляции. Метод Фурье преобразования распределения сил осцилляторов вблизи порога. Аналог принципа Франка-Кондона для переходов в высоковозбужденные регулярные и иррегулярные состояния.

10. ТЕОРИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ

Потенциальное рассеяние. Общая теория. Нестационарная теория. Волновая функция в импульсном и координатном представлении. S-матрица. Унитарность и симметрия. T-матрица. Интегральное уравнение для T-матрицы. Асимптотика волновой функции. Амплитуда рассеяния и эффективное сечение. Оптическая теорема. Предельный переход к стационарной задаче.

Рассеяние центральным силовым полем. Разложение по парциальным волнам. Функция Йоста. Фаза. Аналитические свойства функции Йоста. Нули функции Йоста и их физический смысл. Теорема Левинсона. Метод фазовых функций.

Рассеяние медленных частиц короткодействующим полем. Фазы при малых энергиях. Зависимость от орбитального момента. Приближение эффективного радиуса. Резонансное рассеяние. Модель потенциала нулевого радиуса. Рассеяние на двух силовых центрах.

Влияние далекодействующего поля на рассеяние. Рассеяние кулоновским полем. Рассеяние суперпозицией кулоновского и короткодействующего полей. Поляризационный потенциал и его влияние на рассеяние. Эффект Рамзауэра.

Рассеяние быстрых частиц. Общая характеристика различных приближений и область применимости. Предельный переход к классической картине рассеяния. Радуга и gloria. Приближение Борна. Приближение Глаубера.

Поляризационные явления. Рассеяние частиц со спином $1/2$ на мишени со спином 0. Амплитудная матрица. Поляризационные характеристики пучка частиц. Спиновая матрица плотности. Эффективное сечение и поляризация. Полный опыт. Рассеяние частиц со спином $1/2$ на мишени со спином $1/2$. Амплитудная матрица. Нерелятивистское приближение. Спиновая матрица плотности составной системы. Сечения и поляризация в нерелятивистском приближении.

Простейшая двухканальная система. Постановка задачи. Граничные условия. Матрица амплитуд. S-матрица. Унитарность и симметрия. Упругое рассеяние ниже порога возбуждения. Предпороговый резонанс. Особенности амплитуды упругого рассеяния в пороге. Резонансы выше порога и сумма собственных фаз S-матрица.

Многоканальная задача. Общая теория. Волновая функция системы "частица+мишень". Асимптотика. Разложение по волновым функциям мишени. Уравнение для волновой функции частицы. Общая характеристика основных приближений (приближение Борна и искаженных волн, метод сильной связи). Разложение на парциальные волны. Матрицы Йоста. S и T-матрицы. Основные свойства. Влияние закрытых каналов. Резонансы.

Столкновения в системе трех тел. Уравнения Фаддеева. Отделение движения центра инерции. Координаты Якоби. Разбиение волновой функции на три части. Система уравнений. Преобразование к интегральным уравнениям (в операторной форме). Уравнения в импульсном приближении. Аналитическая структура волновой функции в импульсном представлении. Сингулярности и амплитуды. Адиабатическое приближение при высоких энергиях. Приближение сепарабельных потенциалов.

11. ТЕОРИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ С АТОМАМИ И МОЛЕКУЛАМИ

Волновая функция системы "электрон+атом". Отделение спиновых переменных. Приведение к многоканальной задаче. Влияние закрытых каналов.

Метод сильной связи. Возбуждение 2P и 2S состояний атома водорода.

Первый порядок теории возмущений. Приближение Борна и Бете. Учет обмена. Приближение Очкура. Неупругое рассеяние. Таблицы Вайнштейна, Собельмана, Юкова, программа "Атом". Второе борновское приближение. Приближение Глаубера.

Ионизация атомов. Классическая оценка полных сечений. Дифференциальные и интегральные сечения ионизации в приближениях Борна и Глаубера. Задача Ванье. Энергетическая зависимость сечения ионизации вблизи порога.

Столкновение электронов с молекулами. Возбуждение вращений и колебаний в адиабатическом приближении. Возбуждение колебаний через квазистационарное состояние отрицательного иона. Диссоциативное прилипание и диссоциативная рекомбинация.

12. ТЕОРИЯ ИОННО-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

Общая постановка задачи. Классификация процессов и методов. Приближение молекулярных орбиталей. Параметр Месси. Свойства потенциальных кривых. Корреляционные диаграммы. Симметрия сталкивающихся частиц и теорема Неймана-Вигнера.

Приближение Ландау-Зинера. Псевдопересечение термов. Резонансная перезарядка и другие симметричные интерферентные процессы. Перезарядка при малом дефекте резонанса. Асимптотическая теория перезарядки при больших параметрах удара. Вращение межъядерной оси, SP-переходы.

Приближение объединенного атома. Отрыв электрона при столкновении отрицательного иона с атомом. Ионизация при медленных столкновениях

атомов и ионов. Явление Пеннинга. Захват с ионизацией. Явления, родственные диссоциативному захвату. Основы теории химических реакций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Фок В.А. Начала квантовой механики. М., Наука, 1976.
2. Хартри Д. Расчеты атомных структур. М., Ил, 1960.
3. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. Л., Наука, 1975.
4. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М., Наука, 1977.
5. Бете Г. и Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., Физматгиз, 1960.
6. Веселов М.Г. и Лабзовский Л.Н. Теория атома. Строение электронных оболочек. М., Наука, 1986.
7. Фейнман Р. Квантовая электродинамика. М., Мир, 1964.
8. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. М., Наука, 1981.
9. Дмитриев Ю.Ю., Климчицкая Г.А., Лабзовский Л.Н. Релятивистские эффекты в спектрах атомных систем. М., Энергоатомиздат, 1984.
10. Браун М.А., Гурчумелия А.Д., Сафронова У.И. Релятивистская теория атома. М., Наука, 1984.
11. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М., Мир, 1974.
12. Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры. М., Мир, 1969.
13. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.
14. Абаренков И.В., Антонова И.М., Барьяхтар В.Г., Булатов В.А., Зароченцев Е.В. Электронная структура идеальных и дефектных кристаллов. Киев, Наукова Думка, 1991.
15. Коварский В.А., Перельман Н.Ф., Авербух И.Ш. Многоквантовые процессы. М., Энергоатомиздат, 1985.
16. Киржниц Д.А. Полевые методы теории многих частиц. М., Госатомиздат, 1963.
17. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., Наука, 1971.

Программа курса для аспирантов кафедры Квантовой механики по специальности Теоретическая Физика - 01.04.02 утверждена на заседании кафедры протокол № __ от _____ 2007 года.