

## **Квантовая механика**

### Квант. минимум (2023-2024)

Вопросы, на которые надо отвечать без подготовки. При этом надо знать определения, формулировки утверждений и уметь написать соответствующие формулы. Неправильный ответ на один из этих вопросов влечёт за собой снижение оценки на один балл (по пятибалльной системе).

1. Определение линейного оператора в гильбертовом пространстве. Определение равенства, суммы, произведения, коммутатора и антикоммутатора для пары операторов. Определение обратного, эрмитово сопряжённого, унитарного, эрмитовского (самосопряжённого) операторов. Собственные функции и собственные значения линейного оператора. Свойства собственных функций и собственных значений эрмитовского (самосопряжённого) оператора. Дельта-функция. Разложение функции по полному набору собственных функций эрмитовского оператора. Нормировка собственных функций операторов в случаях дискретного и непрерывного спектров. Собственные функции операторов импульса и координаты, их нормировка. Перевод функции из координатного в импульсное представление.

2. Операторы физических величин. Операторы координаты, импульса и кинетической энергии. Оператор Гамильтона частицы в потенциальном поле. Физический смысл волновой функции. Среднее значение физической величины. Состояние, в котором физическая величина принимает определённое значение. Редукция волновой функции после измерения. Соотношение неопределённости Гейзенберга для координаты и импульса. Физический смысл скалярного произведения волновых функций.

3. Временное уравнение Шрёдингера для волновой функции. Стационарные состояния и стационарное уравнение Шрёдингера, временная зависимость волновой функции стационарного состояния. Квантовое уравнение неразрывности. Оператор эволюции. Представление Гейзенберга.

4. Собственные функции одномерного оператора Гамильтона свободной частицы. Спектр гамильтониана свободной частицы. Волновой пакет и движение свободной частицы. Расплывание волнового пакета (качественное описание).

5. Вид гамильтониана частицы в потенциальном поле в одномерном случае. Асимптотика волновых функций состояний дискретного и сплошного спектров для потенциалов стремящихся к константе на бесконечности. Качественный вид спектра энергии для потенциальной ямы, потенциального барьера и гармонического осциллятора. Понятия туннельного эффекта и надбарьерного отражения. Энергетический спектр осциллятора.

6. Оператор орбитального момента (оператор момента импульса). Оператор момента. Спектр квадрата оператора момента ( $\hat{j}^2$ ) и его проекции на ось  $z$  ( $\hat{j}_z$ ) в случае существования общих собственных функций для этих операторов. Возможные значения полного момента ( $J=j_1+j_2$ ) при сложении моментов  $j_1$  и  $j_2$ .
7. Формула Бора для уровней энергии одноэлектронного иона. Волновая функция  $1s$ -электрона (нерелятивистский случай) в координатном и импульсном представлении (с точностью до нормировки). Плотность вероятности, плотность потока вероятности, уравнение неразрывности для уравнения Шрёдингера.
8. Матрицы Паули. Оператор спина ( $s=1/2$ ). Полный угловой момент. Уравнение Дирака. Уравнение Паули. Поправка на спин-орбитальное взаимодействие в случае кулоновского поля. Плотность вероятности, плотность потока вероятности, уравнение неразрывности для уравнения Дирака.
9. Основная идея метода теории возмущений. Первая поправка к энергии. Эффект Зеемана. Эффект Штарка. Первая поправка к волновой функции в нестационарной теории возмущений.
10. Поведение спина в магнитном поле.
11. Дифференциальное сечение рассеяния. Формула Борна. Формула Резерфорда.
12. Принцип Паули. Одночастичное приближение. Принцип Паули в одночастичном приближении.
13. Выражение средних значений физических величин через матрицу плотности. Квантовое уравнение Лиувилля. Матрица плотности подсистемы.
14. Адиабатическое приближение в теории молекул. Электронные и колебательные уровни. Синглетные и триплетные состояния системы двух электронов. Обменное взаимодействие.
15. Вариационный принцип. Уравнение Хартри-Фока, кулоновский и обменный операторы. Волновая функция многоэлектронной системы в приближении Хартри-Фока. Теорема Купманса. Теорема Хознберга-Кона. Уравнение Кона-Шэма. Функция плотности основного состояния в методе функционала плотности.