

Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов

Квантовая механика

Учебное пособие

3-е издание, электронное

Допущено

Научно-методическим советом по физике
Министерства образования и науки Российской Федерации
в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по техническим направлениям подготовки
и специальностям



Москва
Лаборатория знаний
2020

УДК 530.1
ББК 22.31
Б18

Байков Ю. А.

Б18 Квантовая механика : учебное пособие / Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов. — 3-е изд., электрон. — М. : Лаборатория знаний, 2020. — 294 с. — Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". — Загл. с титул. экрана. — Текст : электронный.

ISBN 978-5-00101-856-8

Учебное пособие предназначено для подготовки специалистов в области наукоемких технологий, связанных с квантовой физикой микромира, в частности для подготовки студентов по направлению «Наноматериалы и нанотехнологии». В книге подробно изложены основные виды формализма квантовой механики, включая операторную алгебру, матричную механику и скобочный аппарат Дирака. Значительное внимание уделено приближенным квантово-механическим методам, широко применяемым в квантовой химии. В соответствии с требованиями новых образовательных стандартов в книгу включены элементы развивающегося направления квантовой механики, а именно квантовой теории кубитов, которое связано с проектированием и созданием в будущем квантовых компьютеров. Достаточное место отведено технике конкретных квантово-механических вычислений.

Для студентов и аспирантов высших технических учебных заведений, а также преподавателей физики и других естественнонаучных дисциплин в технических вузах.

УДК 530.1
ББК 22.31

Деривативное издание на основе печатного аналога: Квантовая механика : учебное пособие / Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. — 291 с. : ил. — ISBN 978-5-9963-1159-0.

В соответствии со ст. 1299 и 1301 ГК РФ при устранении ограничений, установленных техническими средствами защиты авторских прав, правообладатель вправе требовать от нарушителя возмещения убытков или выплаты компенсации

ISBN 978-5-00101-856-8

© Лаборатория знаний, 2015

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
Введение	7
Глава 1. Операторное представление квантовой механики	9
1.1. Квантово-механические постулаты. Собственные функции и собственные значения квантово-механических операторов. Уравнения Лагранжа и Гамильтона	9
1.2. Волновая функция и ее интерпретация в связи с измерениями.	16
1.3. Классификация операторов квантовой механики.	23
1.4. Основное уравнение квантовой механики. Гамильтониан и оператор импульса	28
1.5. Уравнение Шредингера. Собственные функции и собственные значения оператора энергии и их свойства	35
1.6. Стационарные состояния. Общее решение уравнения Шредингера в произвольный момент времени. Теорема Эренфеста	39
1.7. Задача двух тел в системе центра масс	46
1.8. Атомные структуры в системе центра масс	48
1.9. Приближение Борна—Оппенгеймера	54
1.10. Молекулярные структуры в приближении Борна—Оппенгеймера	57
1.11. Собственные функции и собственные значения оператора импульса. Условия нормировки в случаях ограниченного и неограниченного пространства. Дельта-функция Дирака и ее свойства	59
1.12. Разложение волновой функции по собственным функциям оператора импульса системы, обладающим свойством полноты	64
1.13. Собственные функции и собственные значения оператора координаты	67
1.14. Коммутаторы и антикоммутаторы квантовой механики. Движение заряженной нерелятивистской частицы в произвольном электромагнитном поле. Оператор силы Лоренца в квантовой механике	70
1.15. Соотношения неопределенностей для канонически сопряженных величин	77
Глава 2. Матричное представление квантовой механики	84
2.1. Матрицы и их свойства. Нулевая, единичная и постоянная матрицы	84
2.2. Преобразование матриц и их диагонализация	87
2.3. Свойства эрмитовых и унитарных матриц. Матрица унитарного преобразования.	89
2.4. Матрица энергии и ее координатное представление. Представление волновой функции в виде унитарной матрицы	97
2.5. Уравнения движения в операторной и матричной формах. Интегралы движения. Оператор четности как интеграл движения	101

2.6. Система собственных функций оператора энергии как унитарная матрица	104
Глава 3. «Бра-кет» формализм Дирака	107
3.1. «Бра-» и «кет-векторы» Дирака и их свойства	107
3.2. Аналогия «бра-кет» формализма с матричным представлением квантовой механики. Гипервириальная теорема	108
3.3. Проекционные операторы. След проекционного оператора	112
3.4. Разложение единицы через проекционные операторы	115
3.5. Спектральное разложение эрмитовых и неэрмитовых операторов по их собственным векторам в «бра-кет» формализме	116
3.6. Однородные функции и теорема Эйлера для однородных функций	118
3.7. Теорема вириала в классической механике.	119
Глава 4. Вариационный принцип в квантовой механике	121
4.1. Среднее значение энергии основного состояния квантовой системы	121
4.2. Связь вариационного принципа с уравнением Шредингера	123
4.3. Вариационный принцип для возбужденных состояний	125
4.4. Дифференциальная теорема Гельмана-Фейнмана	127
4.5. Интегральная теорема Гельмана-Фейнмана	128
4.6. Теорема вириала в квантовых системах с однородной потенциальной энергией	130
4.7. Связь вариационного принципа с изменением масштаба пространственных координат	133
4.8. Теорема вириала в приближении Борна—Оппенгеймера	135
Глава 5. Теория возмущений	139
5.1. Невырожденная теория возмущений	139
5.2. Резольвента и ее применение в теории возмущений	142
5.3. Теорема Вигнера. Вычисление точных поправок к энергии	146
5.4. Вариационный метод в теории возмущений	151
5.5. Вырожденная теория возмущений.	155
5.6. Теория возмущений Бриллюэна—Вигнера	158
5.7. Сравнение различных методов теории возмущений	161
Глава 6. Момент импульса и его представление в квантовой механике	168
6.1. Операторы компонент момента импульса и их коммутаторы	168
6.2. Собственные функции оператора момента импульса	172
6.3. Собственные значения оператора момента импульса и его компонент	175
6.4. Матричное представление момента импульса и его проекций	178
6.5. Выражения для матричных элементов операторов компонент момента импульса	181
6.6. Сложение операторов момента импульса и его компонент	184
Глава 7. Тожественные частицы и спин. Квантово-механические спиноры	188
7.1. Симметричные и антисимметричные волновые функции квантовых систем	188
7.2. Линейные комбинации несимметризованных волновых функций. Различимость тождественных частиц	189

7.3. Детерминант Слэтера и принцип Паули для тождественных частиц . . .	191
7.4. Спин-орбитали	194
7.5. Спиновые состояния многоэлектронных систем	196
7.6. Операторы перестановок и антисимметризации	201
7.7. Понятие проекционного оператора	203
7.8. Оператор антисимметризации и его коммутационные свойства	206
7.9. Спиновые функции электрона и их представление в матричной форме . .	208
7.10. Двух- и трехэлектронные спиновые функции	210
7.11. Симметричные и антисимметричные спиноры двух- и трехэлектронных систем	212

Глава 8. Квантово-механическое описание состояний атомов легких и тяжелых химических элементов 215

8.1. Атом водорода. Собственные функции (водородные орбитали) и собственные значения оператора Гамильтона для атома водорода и водородоподобных атомов	215
8.2. Самосогласованное поле. Обменное взаимодействие электронов в атоме гелия и молекуле водорода	224
8.3. Вариационный метод в модели двухэлектронной системы. Приближение Хартри	231
8.4. Уравнение Томаса—Ферми для многоэлектронных атомов	237

Глава 9. Взаимосвязь «бра-кет» формализма Дирака с операторным и матричным представлениями квантовой механики 244

9.1. Зависимость амплитуд вероятности от координаты. Волновая функция как амплитуда вероятности	244
9.2. Связь уравнений Гамильтона и Шредингера	249
9.3. Симметрия и законы сохранения	250
9.4. Средние энергии в «бра-кет» представлении	256

Глава 10. Квантовая механика кубитов 262

10.1. Матрица плотности квантовых систем и ее свойства	262
10.2. Одно- и двухкубитовые квантовые системы. Чистые и смешанные состояния однокубитовых систем	265
10.3. Основные виды однокубитовых квантовых операций	267
10.4. Квантовые состояния двухкубитовых систем. Квантовая когерентность векторов состояний кубитов.	269
10.5. Интерферометр Маха-Цендера и его описание однокубитовыми операциями	270
10.6. Двухкубитовые квантовые операции.	272
10.7. Запутанные состояния кубитов и их описание матрицей плотности двухкубитовых систем	274
10.8. Вектор состояния двухкубитовых систем и его разложение по базисным функциям кубитов (разложение Шмидта)	278
10.9. Энтропия фон Ноймана и ее связь с матрицей плотности двухкубитовых систем	279
10.10. Классификация кубитовых состояний для бозонов и фермионов	280

Заключение 287

Литература 288