

**Программа курса**  
**«Избранные главы теоретической физики»**  
**Часть II**  
(4-й семестр, 24 часа)

К сказанному в компетенции к I-й части курса можно добавить только то, что усвоение основ квантовой механики является необходимым условием того, чтобы общефизическое образование студентов-биофизиков считалось более-менее полным. Это обусловливается тем, что квантовая механика является основой для понимания механизмов любых молекулярных процессов, протекающих в живых клетках, а в силу того, что современная биофизика – это главным образом молекулярная биофизика, то очевидно, что без знания квантовой механики, являющейся фундаментом молекулярной биофизики, трудно ожидать какого-либо прогресса в этой области науки.

**Основы квантовой механики.**

**Корпускулярно – волновой дуализм.** Основные экспериментальные факты, попытка интерпретация которых привела к возникновению корпускулярно – волнового дуализма: спектр излучения абсолютно черного тела, фотоэффект, эффект Комптона, гипотеза Л. Де Бройля и опыты по дифракции электронов.

**Волны материи и оптико-механическая аналогия.** Волновые пакеты. Фазовая и групповая скорости. Временная и пространственная локализации волновых пакетов. Соотношение неопределенностей как проявление волновых свойств частиц. Расплывание волновых пакетов. Движение материальной точки и волновой процесс Уравнение Гамильтона – Якоби. Уравнение эйконала. Поверхность постоянной фазы для волнового процесса и поверхность равного действия для механического движения.

**Уравнение Шредингера.** Уравнением Гамильтона – Якоби для дебройлевских волн. Классический предел. Введение операторов. Волновая функция. Стационарные состояния. Уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции. Статистическая интерпретация. Плотность и ток вероятности. Принцип линейной суперпозиции состояний. Нормировка.

**Математический аппарат (I)** Линейные операторы в теории Шредингера. Среднее значение оператора. Наблюдаемые величины. Самосопряженные операторы. Операторы координаты, импульса и момента импульса. Произведение операторов. Коммутатор. Собственные функции и собственные значения операторов. Дискретный и непрерывный спектр собственных значений. Нормировка волновых функций в случаях дискретного и непрерывного спектров (метод Борна).

**Математический аппарат (II)** Собственные функции и собственные значения операторов импульса, проекции момента импульса и квадрата полного момента. Свойства собственных функций операторов. Ортогональность и полнота системы собственных функций. Нормировка волновой функции на  $\delta$  – функцию в случае непрерывного спектра. Вывод соотношения неопределенностей. Принцип дополнительности Бора. Оператор инверсии. Закон сохранения четности.

**Прямоугольные потенциалы.** Решение уравнения Шредингера для прямоугольных потенциалов. Граничные условия для волновой функции. Системы: прямоугольная ступенька высоты  $U_m$  ( $E > U_m$ ,  $E < U_m$ ); прямоугольный барьер высоты  $U_m$  ( $E > U_m$ ,  $E < U_m$ ); прямоугольная потенциальная яма конечной глубины  $U_m$  ( $E > U_m$ ,  $E < U_m$ ). Коэффициент прозрачности барьера (туннельный эффект). Дискретный спектр оператора энергии для бесконечно глубокой ямы. Квазиклассическое приближение. Метод ВКБ. Туннельный эффект. Формула Гамова.

**Гармонический осциллятор и центральное поле.** Собственные функции. Энергетический спектр. Нулевые колебания. Представление чисел заполнения. Движение частицы в поле центральных сил. Операторы проекции момента и квадрата момента. Сферический ротатор. Теория водородоподобного атома. Собственные функции, энергетический спектр.

**Теория возмущений.** Методы приближенного решения уравнения Шредингера. Стационарная теория возмущений для невырожденных систем. Понятие о вариационных методах в квантовой механике. Метод Ритца. Стационарная теория возмущений для вырожденных систем. Нестационарная теория возмущений (теория перехода).

**Элементарная теория излучения.** Спонтанные и вынужденные переходы. Коэффициенты Эйнштейна. Правила отбора. Вывод формулы Планка по Эйнштейну. Спектр излучения. Форма линии. Распад возбужденного состояния квантовой системы.

**Спин и тождественность частиц.** Открытие спина. Магнетон Бора. Оператор спина. Уравнение Паули. Свойства матриц Паули. Понятие об ЭПР. Уравнение Шредингера для системы, состоящей из тождественных частиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции. Схема Юнга. Многоэлектронные атомы. Векторная модель атома. Векторное сложение двух моментов количества движения. Периодическая система химических элементов Менделеева. Элементарная теория химических сил.

#### Список литературы.

1. П. М. Красильников. Основы квантовой механики. Электронный вариант курса лекций находится по адресу: <http://erg.biophys.msu.ru/wordpress/study>
2. П. М. Красильников. Задачи по квантовой механике. Электронный вариант сборника задач находится по адресу: <http://erg.biophys.msu.ru/wordpress/study>
3. М. Борн. Атомная физика. М.: Мир, 1979. – 484 с.
4. Э. В. Шпольский. Атомная физика. (в 2-х томах). М.: Наука, 1974. Т.1. – 576 с., Т.2. – 448 с.
5. Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 8 и 9. Квантовая механика. М.: Мир, 1978. – 523 с.
6. А. С. Давыдов. Квантовая механика. М.: ГИФМЛ, 1963. – 748 с.
7. А. А. Соколов, И. М. Тернов, В. Ч. Жуковский. Квантовая механика. М.: Наука, 1979. – 528 с.
8. Д. Бом. Квантовая теория. М.: ГИФМЛ, 1961. – 728 с.
9. Д. В. Сивухин. Общий курс физики. Т.5. Часть 1. Атомная физика. М.: Наука, 1986. – 416 с.
10. Сборник задач по биофизике. Под ред. А. Б. Рубина. М.: КДУ, 2011. – 184 с. Раздел 3. Молекулярная биофизика.
11. И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков. Сборник задач по квантовой механике. М.: УНЦ ДО, 2001. – 276 с.

Программу составил доц. П. М. Красильников

## Аннотированный список лекций

### **Лекция 1. Корпускулярно – волновой дуализм.**

Целью лекции является рассказ о драматических событиях в физике начала 20 века. В хронологическом порядке представляются результаты основных экспериментов, попытка интерпретация которых привела к возникновению так называемого корпускулярно – волнового дуализма. В первую очередь речь идет о проблеме интерпретации спектральной плотности излучения абсолютно черного тела и знаменитой гипотезе Планка. Затем – проблема фотоэффекта и ее решение Эйнштейном. Далее – знаменитый опыт Комптона по проверке корпускулярных свойств электромагнитного излучения, а в заключение – гипотеза Л. Де Бройля и ее подтверждение в опытах по дифракции электронов.

### **Лекция 2. Волны материи и оптико-механическая аналогия.**

В этой лекции рассказывается о попытке интерпретации волновых свойств материи с помощью представлений о волновом пакете. Этот материал частично перекрывается с материалом 11-й лекции I-й части курса. Вместе с тем интерпретация некоторых соотношений будет несколько иной. Например, огибающая соотносится с временной и пространственной локализацией волновых пакетов. Здесь вводится волновой аналог соотношения неопределенностей Гейзенберга. Идея представления частиц в виде волновых пакетов оказалась несостоятельной из-за дисперсии волн, приводящей к расплыванию волновых пакетов. Здесь же рассматривается важная аналогия между движением материальной точки и некоторым волновым процессом, так называемая оптико-механическая аналогия, лежащая в основании теории уравнения Шредингера. Рассмотрение этой аналогии проводится на основе уравнения Гамильтона – Якоби.

### **Лекция 3. Уравнение Шредингера.**

В этой лекции рассказывается об эвристических идеях, приведших Шредингера к открытию его уравнения. Они основаны на рассмотрении уравнением Гамильтона – Якоби для дебройлевских волн и оптико-механической аналогии, послужившей основой для введения операторов в квантовую теорию. Обсуждается физический смысл волновой функции на основе статистической интерпретации, предложенной Борном. Если гамильтониан явно от времени не зависит, то можно получить стационарное уравнение Шредингера и, соответственно, из его решения – стационарные состояния квантовой системы. На основе статистической интерпретации волновой функции вводятся понятия плотности и тока вероятности, а также нормировка волновой функции. Здесь же формулируется один из важнейших принципов квантовой теории – принцип линейной суперпозиции состояний.

### **Лекция 4. Математический аппарат (I)**

Четвертая и пятая лекции посвящены изложению основ математического формализма квантовой механики. Этот материал является крайне важным и необходимым, т.к. без его усвоения невозможно будет понять квантовую механику, являющуюся весьма абстрактной наукой. Основные понятия, введение которых составляет содержание этих двух лекций, перечислены ниже. Линейные операторы в теории Шредингера. Среднее значение оператора. Наблюдаемые величины. Самосопряженные операторы. Операторы координаты, импульса и момента импульса. Произведение операторов. Коммутатор. Собственные функции и собственные значения операторов. Дискретный и непрерывный спектр собственных значений. Нормировка волновых функций в случаях дискретного и непрерывного спектров (метод Борна).

### **Лекция 5. Математический аппарат (II)**

Собственные функции и собственные значения операторов импульса, проекции момента импульса и квадрата полного момента. Свойства собственных функций операторов. Ортогональность и полнота системы собственных функций. Нормировка волновой функции на  $\delta$  – функцию в случае непрерывного спектра. Вывод соотношения неопределенностей. Оператор инверсии. Закон сохранения четности. Здесь же вводится так называемый принцип дополнительности Бора, устанавливающий соотношение между классическими и квантовыми свойствами частиц.

### **Лекция 6. Прямоугольные потенциалы.**

Шестая и седьмая главы посвящены применению формализма квантовой механики к решению простейших систем. В этой лекции рассматриваются задачи с так называемыми прямоугольными потенциалами: прямоугольная ступенька высоты  $U_m$  ( $E > U_m$ ,  $E < U_m$ ); прямоугольный барьер высоты  $U_m$  ( $E > U_m$ ,  $E < U_m$ ) и коэффициент прозрачности барьера (туннельный эффект);: прямоугольная потенциальная яма конечной глубины  $U_m$  ( $E > U_m$ ,  $E < U_m$ ) и дискретный спектр оператора энергии для бесконечно глубокой ямы. Кроме этого здесь обсуждается квазиклассическое приближение в решении уравнения Шредингера и на его основе рассматривается туннельный эффект и выводится формула Гамова, с помощью которой вычисляется проникаемость барьера различной формы.

### **Лекция 7. Гармонический осциллятор и центральное поле**

В этой лекции подробно решается уравнение Шредингера для квантового гармонического осциллятора. Находятся собственные функции и энергетический спектр осциллятора. Чисто квантовое явление – это так называемые нулевые колебания. Здесь же на основе свойств полиномов Эрмита вводится удобная форма описания состояния квантового гармонического осциллятора – представление чисел заполнения. Достаточно кратко рассматриваются следующие вопросы: движение частицы в поле центральных сил, операторы проекции момента и квадрата момента, сферический ротатор и атом водорода. Для этих систем выписываются собственные функции и энергетический спектр.

### **Лекция 8. Семинар. Решение типовых задач.**

### **Лекция 9. Теория возмущений.**

Эта лекция посвящена изложению методов приближенного решения уравнения Шредингера. Сначала обсуждается стационарная теория возмущений для невырожденных систем, которая является методом последовательных приближений, который уже знаком студентам из решения нелинейного осциллятора (лекция 7 1-й части курса). Мощным методом приближенного отыскания решения для основного состояния квантовой системы является вариационный метод или метод Ритца. Отдельно рассматривается стационарная теория возмущений для вырожденных систем, т.к. эта задача имеет важное практическое значение. Этот случай обсуждается на модели двухуровневой системы. Затем рассматривается нестационарная теория возмущений или теория переходов, в первом порядке которой выводится «золотое правило» Ферми.

### **Лекция 10. Элементарная теория излучения**

Материал этой лекции посвящен изложению основ квантовой теории излучения. Эта теория является основой спектроскопии, важность которой для биофизики очевидна. Здесь рассматриваются следующие вопросы: спонтанные и вынужденные переходы и коэффициенты Эйнштейна; правила отбора для дипольных переходов; спектры излучения, поглощения и форма спектральной линии. Обсуждается важный вопрос о причине распада возбужденного состояния квантовой системы. В качестве иллюстрации проводится вывод формулы Планка по Эйнштейну.

### **Лекция 11. Спин и тождественность частиц.**

Теория спина квантовых частиц – это обязательный элемент программы. Без знания спина невозможно понять строение атомов и молекул, да и многое другое. Изложение начинается с рассказа об открытии спина. Естественным образом возникает магнетон Бора и далее вводится оператор спина. Достаточно кратко рассказывается о теории Паули. Дается некоторое понятие об ЭПР. Достаточно кратко обсуждаются следующие вопросы: тождественность элементарных частиц с целым и полуцелым спином и симметричные и антисимметричные волновые функции; принцип запрета Паули; многоэлектронные атомы, схема Юнга и векторная модель атома; периодическая система химических элементов Менделеева.

### **Лекция 12. Обобщающая контрольная работа.**

#### **Промежуточная аттестация**

В качестве промежуточной аттестации проводятся две контрольные работы, которые содержат задачи по следующим темам:

- излучение абсолютно черного тела;
- волновые пакеты;
- свойства операторов;
- нормировка волновых функций;
- прямоугольные потенциалы;
- расчет проницаемости потенциального барьера по формуле Гамова;
- гармонический осциллятор и свойства полиномов Эрмита;
- квантовый ротатор и сферические функции;
- квантовые переходы и спектры.

Большинство задач берется из сборников [2], [10] и [11], представленных в списке литературы.

#### **Список экзаменационных вопросов**

1. Спектральная плотность излучения абсолютно черного тела. Формула Планка.
2. Теория эффекта Комптона.
3. Временная и пространственная локализация волновых пакетов.
4. Расплывание волновых пакетов.
5. Плотность и ток вероятности. Стационарное уравнение Шредингера.
6. Среднее значение операторов. Самосопряженные операторы. Коммутатор.
7. Собственные функции и собственные значения операторов.
8. Нормировка волновых функций в случае непрерывного спектра.
9. Квантовый гармонический осциллятор.
10. Квантовый сферический ротатор.
11. Стационарная теория возмущений.
12. Двухуровневая система.
13. Вариационный метод.
14. Нестационарная теория возмущений. «Золотое правило» Ферми.
15. Квантовые переходы. Правила отбора для дипольных переходов.
16. Открытие спина элементарных частиц.
17. Тождественность элементарных частиц, принцип запрета Паули и таблица Менделеева.