

# Тестові питання до курсу квантової механіки

Андрій Жугаєвич (zhugayevych@univ.kiev.ua)

8 лютого 2007 р.

## §1. Математичний апарат квантової механіки

1. (15) Гільбертів простір. Поняття стану, оператора фізичної величини (спостережуваної), оператора еволюції і оператора вимірювання.
2. (15) Реалізації гільбертового простору. Представлення квантової механіки. Простори  $L_2$  і  $l_2$ .
3. (10) Стани відкритих систем.
4. (3) Самоспряжені оператори, унітарні оператори, проектори.
5. (2) Власні значення і власні функції. Вид оператора у власному представленні.
6. (1) Як обчислити середнє значення фізичної величини?
7. (2) Як знайти спряжений оператор?
8. (1) Для чого потрібна самоспряженість операторів фізичних величин?

## §2. Фізичні принципи квантової механіки

1. (2) Принцип суперпозиції станів.
2. (5) Фізичний смисл хвильової функції.
3. (5) Співвідношення невизначеності (загальний і часткові випадки).
4. (5) Інтеграл руху. Квантові числа.
5. (2) Оператор похідної фізичної величини.
6. (2) Умова сумісності фізичних величин. Що вона означає?
7. (5) Довести інваріантність квантової механіки відносно вибору нуля-відліку енергії.
8. (15) Квантова механіка в картині (представленні) Гейзенберга.
9. (5) Як побудувати хвильову функцію при переході від одного представлення до іншого? Дискретний та неперервний випадки.
10. (5) Як побудувати оператор фізичної величини при переході від одного представлення до іншого? Дискретний та неперервний випадки.
11. (10) Матричне представлення. Рівняння Шредингера та Гейзенберга, а також середні в матричному представленні.
12. (10) Наявність фундаментальної константи швидкості світла в теорії відносності робить еквівалентними просторову і часову координати. З аналогічних позицій розглянути сталу Планка. В цьому світлі дати відповідь на питання: скільки ще може бути "нових" механік?
13. (10) Порівняти поняття класичної і квантової механіки (стан, спостережувана, координата, імпульс тощо).
14. (–) Парадокс про "шредингерівського кота".
15. (–) ЕПР парадокс.

## §3. Одночастинкове рівняння Шредингера

1. (1) Рівняння Шредингера.
2. (5) Стаціонарне рівняння Шредингера.
3. (3) Нормування хвильової функції дискретного і неперервного спектру.
4. (10) Оператор еволюції та його вираз через власні функції.
5. (3) Рівняння неперервності та закон збереження числа частинок.
6. (5) Квантові рівняння Ньютона (теорема Еренфеста).
7. (10) Показати, що середній імпульс дорівнює нулю для дійсної локалізованої хвильової функції і для стаціонарного локалізованого стану. В останньому випадку навести приклад ненульового узагальненого імпульсу.
8. (5) Зв'язок між кількістю вузлів хвильової функції стаціонарного стану, її локалізацією і рівнем енергії.
9. (3) Як з вигляду потенціалу визначити розташування дискретного і неперервного спектру?

## §4. Точні розв'язки рівняння Шредингера у просторі довільної розмірності

1. (2) Записати хвильову функцію, що описує потік частинок в заданому напрямку.
2. (3) Записати хвильову функцію частинки, яка має задані середню швидкість і розподіл координати.
3. (2) Плоска хвиля і її фізичний смисл.

4. (3) Гаусів пакет.
5. (10) Вільна частинка.
6. (10) Потенціальний ящик.
7. (15) Гармонічний осцилятор.
8. (5) Чи може частинка в потенціальному ящику мати хвильову функцію  $\psi = 1/V$ , де  $V$  – об'єм ящика.

## §5. Одновимірне рівняння Шредингера: спектр

1. (4) Яку симетрію мають хвильові функції у випадку симетричного потенціалу?
2. (4) Умови зшивання хвильових функцій на дельта-потенціалі.
3. (10) Дельта-яма.
4. (15) Прямокутна потенціальна яма.
5. (15) Взаємодія двох потенціальних ям. Поняття адиабатичного наближення.

## §6. Одновимірне рівняння Шредингера: проходження бар'єру

1. (5) Проходження бар'єру: постановка задачі. Коефіцієнти відбиття та проходження, фазовий зсув. Тунелювання.
2. (10) Виразити коефіцієнт проходження через пару незалежних розв'язків стаціонарного рівняння Шредингера.
3. (15) Проходження прямокутного бар'єру. Явище резонансного проходження.
4. (20) На прикладі пояснити явище резонансного тунелювання.

## §7. Частинка в центральному полі: спектр

1. (15) Оператор кутового моменту та його властивості.
2. (10) Правила відбору для оператора кутового моменту. Де вони використовуються?
3. (30) Правила додавання кутових моментів. 3j-символи та їх узагальнення.
4. (25) Оператор обертань та його скінченновимірні представлення. Обертання  $s$ ,  $p$  і  $d$ -орбіталей.
5. (5) Вибір  $p$  і  $d$ -орбіталей у вигляді гармонічних поліномів.
6. (5) Інтеграли руху в полі центральної сили.
7. (5) Радіальне рівняння Шредингера.
8. (10) Сферичні хвилі.
9. (15) Кулонівський потенціал.
10. (2) Вказати радіальне квантове число для атома водню в стані  $|nlm\rangle$ .
11. (20) Гібридизація атомних орбіталей.
12. (5) Вплив скінченної маси ядра на спектр атома водню.

## §8. Частинка в центральному полі: задача розсіяння

1. (10) Загальна теорія розсіяння. Переріз і амплітуда розсіяння.
2. (10) Теорія розсіяння в центральному полі. Парціальні амплітуди.
3. (–) Борнівське наближення.

## §9. Частинка в періодичному потенціалі

1. (10) Власні значення і власні функції оператора трансляції на періодичній ґратці.
2. (10) Загальна структура спектру і хвильових функцій частинки в періодичному потенціалі.
3. (10) Поняття ефективної маси.

## §10. Спін

1. (–) Поняття спіну.
2. (–) Рівняння Паулі.
3. (–) Орбітальний механічний та магнітний моменти атома. Гіромагнітне співвідношення.
4. (–) Спін-орбітальна взаємодія.
5. (–) Вивід рівняння Паулі з рівняння Дірака.

## §11. Дворівнева система

1. (–) Дворівнева система.
2. (–) Осциляції Рабі.

## §12. Квазікласичне наближення

1. (10) Ідея квазікласичного наближення.
2. (10) Квазікласичне наближення для одноятного потенціалу.
3. (15) Квазікласичне наближення для центрально симетричного потенціалу.

## §13. Варіаційний метод

1. (5) Ідея варіаційного методу.
2. (5) В якому вигляді брати пробну функцію?

## §14. Стаціонарна теорія збурень

1. (10) Стаціонарна теорія збурень без виродження.
2. (15) Поправки до матричних елементів оператора.
3. (15) Стаціонарна теорія збурень при наявності виродження.

## §15. Нестационарна теорія збурень

1. (–) Нестационарна теорія збурень: загальна теорія.
2. (–) Нестационарна теорія збурень: обмежені в часі збурення і збурення з обмеженою зміною в часі.
3. (–) Нестационарна теорія збурень: періодичне збурення (нерезонансний випадок).
4. (–) Нестационарна теорія збурень: періодичне збурення (випадок резонансу).

## §16. Багаточастинкові системи: загальна теорія

1. (–) Детермінант Слейтера.
2. (–) Оператори народження та знищення в методі вторинного квантування.

## §17. Квантування електромагнітного поля

1. (–) Квантування електромагнітного поля.

## §18. Система електронів

1. (–) Адіабатичне наближення.
2. (–) Метод лінійної комбінації атомних орбіталей.
3. (–) Молекула водню.
4. (–) Рівняння Томаса-Фермі.

## §19. Чисельні методи: загальна теорія

1. (5) Коли краще використовувати метод скінченних елементів, а коли метод лінійної комбінації базисних функцій?
2. (5) Ідея методу скінченних елементів.

## §20. Метод лінійної комбінації базисних функцій

1. (10) Загальна схема методу лінійної комбінації базисних функцій.
2. (5) Як вибрати базис?
3. (15) Базис ортогональних поліномів.
4. (10) Тригонометричний базис.
5. (10) Базис гаусових функцій.

## §21. Метод лінійної комбінації атомних орбіталей

1. (–) Метод лінійної комбінації атомних орбіталей.
2. (5) Базис  $d$ -орбіталей іноді вибирають у вигляді шести функцій  $\{x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\}$ , вказати переваги і недоліки такого вибору.

## §22. Взаємодія квантових систем з електромагнітним полем

1. (–) Поляризація в електромагнітному полі.
2. (–) Поглинання і випромінювання електромагнітних хвиль.

## §23. Атом

1. (–) Періодична система елементів Менделєєва.

## §24. Двоатомна молекула

1. (30) Молекула водню.
2. (20) Коливний і обертальний спектри.
3. (10) Чому коливний спектр розкладають в емпіричний ряд по  $(n + 1/2)$ ?
4. (10) Чому обертальний спектр молекул завжди значно дрібніший за енергією ніж коливальний?
5. (15) Міжатомна взаємодія.