

УДК 530.1  
ББК 22.31  
Б18

**Байков Ю. А.**

**Б18** Квантовая механика : учебное пособие / Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов. — 4-е изд., электрон. — М. : Лаборатория знаний, 2024. — 294 с. — Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". — Загл. с титул. экрана. — Текст : электронный.

ISBN 978-5-93208-719-0

Учебное пособие предназначено для подготовки специалистов в области наукоемких технологий, связанных с квантовой физикой микромира, в частности для подготовки студентов по направлению «Нanomатериалы 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 978-5-93208-719-0

© Лаборатория знаний, 2015

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Предисловие</b> . . . . .	<b>6</b>
<b>Введение</b> . . . . .	<b>7</b>
<b>Глава 1. Операторное представление квантовой механики</b> . . . . .	<b>9</b>
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
<b>Глава 2. Матричное представление квантовой механики</b> . . . . .	<b>84</b>
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
<b>Глава 3. «Бра-кет» формализм Дирака . . . . .</b>	<b>107</b>
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
<b>Глава 4. Вариационный принцип в квантовой механике . . . . .</b>	<b>121</b>
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
<b>Глава 5. Теория возмущений . . . . .</b>	<b>139</b>
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
<b>Глава 6. Момент импульса и его представление в квантовой механике . . . . .</b>	<b>168</b>
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
<b>Глава 7. Тожественные частицы и спин. Квантово-механические спиноры . . . . .</b>	<b>188</b>
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**