КАЗАНСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА И ОРДЕНА ТРУДОВОГО
КРАСНОГО ЗНАМЕНИ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени В. И. УЛЬЯНОВА-ЛЕНИНА

Кафедра теоретической физики

УЧЕБНЫЕ ЗАДАНИЯ
ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

КАЗАНЬ - 1990

Печатается
по постановлению Учебно-методической
комиссии физического факультета

Составители -
Н.Г.Колоскова, А.Л.Ларионов, С.Л.Царевский

Редактор-
Б.И.Кочелаев

I. ОПЕРАТОРЫ. КОММУТАТОРЫ. СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ И СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ОПЕРАТОРОВ

I.I. Являются ли операторы комплексного сопряжения, извлечения квадратного корня, дифференцирования по координате, умножения на число, отражения, сдвига, изменения масштаба линейными? эрмитовыми?

I.2. Убедиться в том, что операторы координат, импульсов и моментов вращения являются линейными и эрмитовыми. Считать, что волновая функция на бесконечности обращается в нуль.

I.3. Какое соотношение должно существовать между $\hat{A}$ и $\hat{B}$ для того, чтобы $\hat{A}\hat{B}$ было эрмитовым оператором, если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ по отдельности эрмитовы?

I.4. Эрмитовы ли операторы $x\hat{p}_x$, $x\hat{p}_y$, x^2, $\hat{p}_x^2$, $i(\hat{p}^2 x - x\hat{p}^2)$?

I.5. Доказать, что если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ - эрмитовы операторы, то операторы $(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})$ и $(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})$ тоже эрмитовы.

I.6. Доказать, что если $\hat{A}$ - эрмитов оператор и $\hat{A}^n\Psi=0$, то $\hat{A}\Psi=0$.

I.7. Найти результат действия операторов $\frac{d^2}{dx^2}x^2$ и $\left(\frac{d}{dx}x\right)^2$ на функции а) $\sin x$; б) e^{2x}.

I.8. Показать, что для любого оператора $\hat{\sigma}$, для которого $\hat{\sigma}^2=I$, справедливо соотношение $e^{i\theta\hat{\sigma}}=\cos\theta+i\hat{\sigma}\sin\theta$, где θ - некоторое вещественное число.

I.9. Показать, что оператор параллельного переноса
$$\hat{T}_{\vec{a}}\Psi(\vec{r})=\Psi(\vec{r}+\vec{a})$$
имеет вид $\hat{T}_{\vec{a}}=e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{\vec{p}}\vec{a})}$, где $\hat{\vec{p}}$ - оператор импульса.

I.I0. Предполагая λ малой величиной, найти разложение оператора $(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-I}$ по степеням λ .

I.II. Найти оператор, эрмитово-сопряженный оператору $\frac{\partial}{\partial x}$.

I.I2. Найти оператор, эрмитово-сопряженный оператору $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$.

I.I3. Найти оператор, эрмитово-сопряженный оператору смещения пространства на вектор $\vec{a}$.

I.I4. Найти оператор, эрмитово-сопряженный оператору $e^{i\alpha\frac{\partial}{\partial y}}$.

I.15. Доказать, что $(\hat A\hat B)^+ = \hat B^+\hat A^+$.

I.16. Найти правило коммутации оператора $\hat p_x$ и $f(x,y,z)$, произвольной функции координат.

I.17. Вычислить коммутаторы следующих операторов:

а). $ie^{ix}\frac{\partial}{\partial x}$, e^{ix}; б). $\hat l_x, \hat p_x$; в). $\hat l_x, \hat p_y$;

г). $\hat l_x, x$; д). $\hat l_x, y$; е). $\hat l_x, \hat l_y$; ж). $\hat l_x, \hat l^2$; з). Δ, x.

I.18. Найти коммутатор $[x^n, \hat p_x^m]$, $m, n > 0$.

I.19. Доказать $[\sum_i \hat A_i, \sum_k \hat B_k] = \sum_{ik} [\hat A_i, \hat B_k]$.

I.20. Даны три оператора $\hat A$, $\hat B$ и $\hat C$. Выразить коммутатор операторов $\hat A\hat B$ и $\hat C$ через коммутаторы $[\hat A,\hat C]$ и $[\hat B,\hat C]$. Доказать $[\hat A,[\hat B\hat C]] + [\hat B,[\hat C\hat A]] + [C,[AB]] = 0$.

I.21. Даны два оператора $\hat A$ и $\hat B$ таких, что $[\hat A,\hat B] = I$. Показать, что $[\hat A^n, \hat B] = n\hat A^{n-1}$.

I.22. Установить перестановочные соотношения для операторов

$$\hat a^+ = \frac{\hat p + i\alpha\hat q}{\sqrt{2\alpha\hbar}}, \quad \hat a = \frac{\hat p - i\alpha\hat q}{\sqrt{2\alpha\hbar}}$$

где $\hat p$ и $\hat q$ - канонически сопряженные импульс и координата, α - константа.

I.23. Доказать следующее равенство:

$$e^{\hat B}\hat A e^{-\hat B} = \hat A + [\hat B,\hat A] + \frac{1}{2!}[\hat B,[\hat B,\hat A]] + \frac{1}{3!}[\hat B,[\hat B,[\hat B,\hat A]]] + \dots$$

I.24. Доказать, что

$$e^{\beta\hat A} e^{-\beta(\hat A+\hat B)} = 1 - \int_0^\beta e^{\lambda\hat A}\hat B e^{-\lambda(\hat A+\hat B)} d\lambda.$$

I.25. Вывести формулу дифференцирования оператора $\exp(\hat A - \alpha\hat B)$ по параметру α в случае $[\hat A,\hat B] \neq 0$.

I.26. Вычислить коммутаторы $[\hat q, \exp(-ia\hat p/\hbar)]$, $[\hat p, \exp(ib\hat q/\hbar)]$.

I.27. Выразить оператор $e^{\alpha\hat q + \beta\hat p}$ через $e^{\alpha\hat q}$, $e^{\beta\hat p}$.

I.28. Пусть эрмитов оператор $\hat S$, соответствующий наблюдаемой физической величине, обладает конечным числом собственных значений $S_1, S_2, \dots, S_n$. Показать, что $\hat S$ удовлетворяет уравнению

$$(\hat S - S_1)(\hat S - S_2)\dots(\hat S - S_n) = 0.$$

I.29. Найти $\hat l_x, \hat l_y, \hat l_z, \hat l^2, \hat l_x \pm i\hat l_y$ в сферических координатах. Найти связь $\hat l^2$ с оператором кинетической энергии.

I.30. Показать, что $[\Delta, \hat l^2] = 0$, $[U(r), \hat l^2] = 0$.

I.31. Найти собственные функции и собственные значения операторов:

а) умножения на число, б) $-i\exp(i\alpha x)\frac{d}{dx}$,

в) $\hat p + i\alpha\hat q$ при одномерном движении, г) $x + a\frac{d}{dx}$,

д) $\frac{d}{d\varphi}$, е) $\sin\frac{d}{dx}$,

ж) $\cos(i\frac{\partial}{\partial\varphi})$, з) $\exp(i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi})$,

и) $\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}$.

I.32. Найти собственные функции и собственные значения операторов координат, импульса, проекции момента вращения, квадрата момента вращения, оператора энергии свободной частицы.

I.33. Найти общие собственные функции операторов $\hat l_z$ и $\hat p_z$, $\hat l_x$ и $\hat l^2$, x и $\hat p_y$, $\hat P$ и $\hat H_{кин}$ (оператор кинетической энергии), $\hat H_{кин}$ и инверсии;

I.34. Показать, что все собственные значения оператора $\hat n = \hat a^+\hat a$ - целые числа.

I.35. Нормировать волновую функцию свободной частицы с импульсом $\vec p_0$ на $\delta(\vec p - \vec p_0)$, на $\delta(E - E_0)$, на $\delta(\vec k - \vec k_0)$, где $\vec k = \vec p/\hbar$ - волновое число. Нормировать волновую функцию частицы с импульсом $\vec p_0$, находящуюся в ящике, на $\delta(\vec p - \vec p_0)$.

I.36. Используя свойства ортогональности и нормировки $P_l(\cos\vartheta)$ получить разложение $\delta(\vartheta - \vartheta_0)$ по полиномам Лежандра. Получить соответствующее разложение $\delta(\vartheta-\vartheta_0)\delta(\varphi-\varphi_0)$ по сферическим гармоникам.

I.37. Операторы проектирования (проекторы) определяются соотношениями $P^+ = P$, $P^2 = P$. Показать, что

а) оператор I-P также является проектором,

б) $\int |P\Psi|^2 dx \leqslant \int |\Psi|^2 dx$ для произвольного состояния Ψ.

I.38. При каком условии сумма двух проекторов также является проектором?

I.39. Показать, что эрмитов оператор $\hat{S}$, соответствующий наблюдаемой физической величине и обладающий дискретным спектром (S_i), может быть записан в форме (спектральное представление):

$$\hat{S} = \sum_i S_i P_{S_i}$$

где P_{S_i} – оператор проектирования на собственное подпространство, относящееся к собственному значению S_i. Как будет выглядеть спектральное представление в случае непрерывного спектра?

I.40. Выразить проекторы $P_{S_i l_i}$, где s_i, l_i – собственные значения двух коммутирующих наблюдаемых, через проекторы P_{S_i} и P_{l_i}.

I.41. Показать, что оператор $P_0 = \sum_{k=0} (-1)^k (\hat{a}^+)^k \hat{a}^k / k!$

осуществляет проектирование в "вакуум" (состояние, определяемое соотношением $\hat{a}|0\rangle = 0$). Найти оператор проектирования в произвольное состояние $|n\rangle$.

I.42. Доказать равенство

$$e^{-il_x\theta}\, \hat{l}_z\, e^{il_x\theta} = \hat{l}_z \cos\theta - \hat{l}_y \sin\theta .$$

I.43. Показать, что

$$\frac{d}{d\xi}\hat{A}^{-1} = -\hat{A}^{-1}\frac{d\hat{A}}{d\xi}\hat{A}^{-1} .$$

II. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН. ВЕРОЯТНОСТИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ.

2.I. Показать, что среднее значение квадрата самосопряженного оператора положительно.

2.2. Показать, что среднее значение импульса при одномерном движении может быть представлено в виде:

$$\langle P \rangle = -\frac{i\hbar}{2!}\int\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)dx .$$

2.3. Показать, что $Sp\,[\hat{A},\hat{B}]\hat{C} = Sp\,\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]$.

2.4. Волновая функция системы имеет вид:

$$\Psi = \varphi(x)\exp(-iEt/\hbar) + \varphi(x)\exp(iEt/\hbar);$$

найти распределение вероятностей системы и убедиться в том, что она не находится в стационарном состоянии.

2.5. Показать, что в состоянии, в котором одна из компонент момента имеет определенное значение, средние значения других компонент обращаются в нуль. Вычислить средние значения квадратов компонент в этом состоянии.

2.6. Доказать, что в стационарном состоянии дискретного спектра среднее значение проекции импульса частицы равно нулю.

2.7. Найти собственные значения $\hat{l}^2$, соответствующие его собственной функции

$$\psi(\vartheta,\varphi) = A(\cos\vartheta + 2\sin\vartheta\cos\varphi).$$

2.8. Определить вероятность значения $l_z = \hbar$ для частицы, находящейся в состоянии $\psi = Ayz/r^2$.

2.9. Определить возможные значения квадрата момента вращения частицы, находящейся в состоянии $\psi = Ayz^2/r^3$, и вероятность значения $l^2 = 12\hbar^2$.

2.I0. При $t=0$ свободная частица описывается функцией $\Psi(x,0) = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ik_0x\right)$. Найти A; область, где локализована частица; плотность тока.

2.II. Определить ширину волнового пакета в K-пространстве для функции из задачи 2.I0.

2.I2. Рассмотреть поведение волнового пакета функции из задачи 2.I0 во времени. Найти $\Psi(x,t)$, плотность вероятности $\rho(x,t)$ и плотность тока $j(x,t)$.

2.I3. Состояние частицы описывается функцией

$\Psi(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ik_0x\right)$. Найти $\langle x\rangle$, $\langle p_x\rangle$, $\langle\Delta x^2\rangle$, $\langle\Delta p_x^2\rangle$.

2.I4. Показать, что средние значения величин, коммутирующих с гамильтонианом и не содержащих явной зависимости от времени, не меняются при движении системы.

2.I5. Пусть гамильтониан системы не меняется в результате произвольного сдвига его в пространстве. Показать, что импульс такой системы является сохраняющейся величиной.

2.16. Показать, что наличие сохраняющейся величины связано с инвариантностью гамильтониана относительно некоторого преобразования.

2.17. Средние значения x и $\hat{p}_x$ в состоянии $\Psi(x)$ равны соответственно x_0 и p_0. Чему равны средние этих же величин в состоянии $\exp(-ip_0x/\hbar)\Psi(x+a)$?

2.18. Показать, что для системы частиц при отсутствии внешних сил импульс системы будет интегралом движения.

III. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА. КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ

3.1. Найти произведение дисперсий $\overline{\Delta x^2}$, $\overline{\Delta p_x^2}$ для n-го состояния гармонического осциллятора.

3.2. Вычислить средние значения $\overline{x^2}$, $\overline{p_x^2}$ в основном состоянии атома водорода. Проверить выполнение соотношения неопределенности.

3.3. Показать, что в вакуумном состоянии (см. 1.22; 1.41) соотношение неопределенности Гейзенберга представляется в виде равенства.

3.4. Когерентные состояния системы определяются следующим образом:

$$|\bar{q},\bar{p}\rangle = \hat{U}|0\rangle, \quad \hat{U} = \exp\left[-i(\bar{q}\hat{p} - \bar{p}\hat{q})/\hbar\right].$$

Вычислить средние значения координат и импульса в этом состоянии. Доказать, что в когерентных состояниях соотношение неопределенности является равенством. Выразить унитарный оператор, образующий когерентные состояния, через операторы $\hat{a}^+, \hat{a}$.

3.5. Показать, что когерентные состояния являются собственными для оператора $\hat{a}$. Найти спектр собственных значений этого оператора. Что можно сказать о собственных значениях и собственных состояниях оператора $\hat{a}^+$?

IV. МОМЕНТ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ. СПИН

4.1. Построить матрицы S_x, S_y, S_z, S^2 для спина $S = 2$.

4.2. Из собственных функций оператора $\hat{S}_z$ построить линейную комбинацию, которая была бы собственной функцией операторов а) $\hat{S}_x$, б) $\hat{S}_y$, с) $\hat{S}_+$ для $S = 1, 3/2, 2$.

4.3. Показать, что три матрицы Паули вместе с единичной матрицей образуют полный набор линейной алгебры.

4.4. Показать, что матрицы Паули удовлетворяют соотношению

$$\sigma_\alpha \sigma_\beta = \delta_{\alpha\beta} + i e_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma,$$

где $e_{\alpha\beta\gamma}$ – единичный антисимметричный тензор.

4.5. Могут ли проекции спина $S = 1/2$ одновременно иметь нулевые средние значения?

4.6. Показать, что для любого векторного оператора $\vec{A}$ справедливо следующее правило коммутации с оператором полного момента количества движения $[\hat{J}_\alpha, \hat{A}_\beta] = i\hbar e_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\gamma$.

4.7. Показать, что квадрат полного момента коммутирует с квадратами всех составляющих момент частей.

4.8. Доказать, что матричные элементы вектора $\vec{A}$ между функциями с одним и тем же J пропорциональны соответствующим матричным элементам оператора J:

$$\langle n'JM'|\vec{A}|nJM\rangle = K(nn'J)\langle JM'|J|JM\rangle.$$

4.9. Наиболее общий вид спиновой функции частицы с $S = 1/2$ в S_z – представлении есть

$$\Psi = e^{i\alpha}\cos\beta|+\rangle + e^{-i\gamma}\sin\beta|-\rangle.$$

Найти сферические координаты ϑ, φ такого направления в пространстве, проекция спина на которое с достоверностью есть +1/2.

4.10. Составить оператор $\frac{d\hat{\sigma}_x}{dt}$, используя $\hat{\mathcal{H}}$ для частицы со спином, помещенной в магнитное поле $\vec{H}$.

4.11. Вычислить квадрат проекции спина $S = \frac{1}{2}$ на произвольное направление.

4.12. Вычислить $Sp(S_z^2 S_x^2)$.

4.13. Показать, что для системы N спинов

$$Sp\, S_z^2 = \frac{N}{3} S(S+1)(2S+1),$$

где $S_z = \sum_{i=1}^{N} S_{zi}$

4.14. Для двух частиц со спином 1/2 найти спектр и собственные функции оператора $\mathcal{I}(\hat{\vec{S}}_1, \hat{\vec{S}}_2)$.

4.15. Доказать, что для оператора скалярной величины отличны от нуля только матричные элементы между функциями одинаковой четности.

4.16. Сформулировать трансформационные свойства спиноров (двухкомпонентных волновых функций).

4.17. В состоянии с определенными значениями момента l и его проекции m на ось z найти среднее значение и среднюю квадратичную флуктуацию проекции момента на ось $\tilde{z}$, составляющую угол α с осью z.

4.18. Найти собственные функции операторов квадрата момента частицы и его проекции на ось z в импульсном представлении,

У. ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

5.1.. Показать, что при переходе от координатного представления к импульсному четность волновой функции относительно соответствующего аргумента остается неизменной.

5.2. Написать волновые функции в координатном и импульсном представлениях а) для покоящейся частицы; б) для частицы, локализованной в точке $\vec{r}_0$.

5.3. Предполагая энергетический спектр системы известным, записать волновые функции ее стационарных состояний в энергетическом представлении.

5.4 Даны два эрмитовых оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Указать связь между собственными функциями оператора $\hat{A}$ в В-представлении и собственными функциями оператора $\hat{B}$ в А-представлении.

5.5. Пусть $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ и $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m)$ – полные наборы коммутирующих наблюдаемых, $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$ –состояния из соответствующих полных ортонормированных систем. Показать, что

$$\sum_{\beta} \langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}.$$

Как видоизменяется это соотношение, если один из наборов или оба обладают непрерывным спектром собственных значений? Сопоставить с унитарными преобразованиями в конечномерных линейных пространствах.

5.6. Пусть имеются две системы состояний $|\alpha_1\rangle, \dots, |\alpha_m\rangle$ и $|\alpha_1'\rangle, \dots, |\alpha_n'\rangle$, системы $|\beta_1\rangle, \dots, |\beta_m\rangle$ и $|\beta_1'\rangle, \dots, |\beta_n'\rangle$ получаются из них унитарным преобразованием. Показать, что для любого оператора $\hat{f}$ имеет место равенство:

$$\sum_{ii'} |\langle \alpha_i | \hat{f} | \alpha'_{i'} \rangle|^2 = \sum_{jj'} |\langle \beta_j | \hat{f} | \beta'_{j'} \rangle|^2$$

(принцип спектроскопической устойчивости).

5.7. По заданной волновой функции $\psi(x,y,z)$ вычислить вероятность нахождения частицы в интервалах значений z от z_1 до z_2 и p_y – от p_1 до p_2.

5.8. Найти унитарный оператор, осуществляющий преобразование Галилея: $\vec{p} = \vec{p}' + m\vec{v}$, $\vec{r} = \vec{r}' + \vec{v}t$.

5.9. Найти соотношение коммутации для операторов, представляющих эрмитову и антиэрмитову части оператора уничтожения (или рождения) бозонов.

5.10. Построить из операторов координаты x и импульса $\hat{P}_x$ частицы операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$, обладающие свойствами операторов уничтожения и рождения бозонов. Найти волновую функцию вакуумного состояния.

5.11. Найти собственные функции и собственные значения операторов рождения и уничтожения. Найти распределения по числу частиц в этих состояниях. Рассмотреть случаи бозе- и ферми-операторов.

5.12. На основе соотношения антикоммутации $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ для ферми-операторов показать, что собственные значения оператора числа частиц равны 0 и 1.

5.13. Является ли переход от операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ к новым операторам $\hat{a}' = \hat{a} + \alpha$, $\hat{a}^{+\prime} = \hat{a}^+ + \alpha$ (α -комплексное число) унитарным преобразованием? Рассмотреть случаи бозе- и ферми-операторов. Найти распределение по числу исходных частиц в состоянии вакуума "новых" частиц.

5.I4. Рассмотреть преобразование вида $\hat{a}' = \alpha\hat{a} + \beta\hat{a}^+$, $\hat{a}^{+\prime} = \alpha\hat{a}^+ + \beta\hat{a}$ (α, β - вещественные). Когда преобразование унитарно? Каково распределение по частицам в вакууме?

5.I5. Можно ли преобразование вида $\hat{a}' = \hat{a}^+$ и $\hat{a}^{+\prime} = \hat{a}$ рассматривать как операторы уничтожения и рождения некоторых новых частиц? Рассмотреть случаи бозе- и ферми-операторов.

5.I6. Для системы тождественных частиц определенного сорта указать вид следующих операторов в пространстве чисел заполнения:

а) гамильтониана свободных частиц;
б) импульс системы;
в) радиуса-вектора центра инерции.

5.I7. Для системы одинаковых частиц найти в представлении чисел заполнения вид операторов плотности числа частиц в точке $\vec{r}$ и числа частиц, находящихся в некотором объеме.

5.I8. Найти в представлении чисел заполнения оператор произведения плотностей числа частиц в различных точках пространства.

УI. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ПРОСТЕЙШИХ СИСТЕМ

6.I. Найти коэффициент отражения $R(E)$ частицы от прямоугольной потенциальной стенки. Найти зависимость $\delta(E)$, если представить

$$\psi = e^{ikx} + e^{-i(kx+\delta)}.$$

6.2. Определить коэффициент прохождения $D(E)$ частицы через прямоугольный барьер.

6.3. Найти коэффициент прохождения $D(E)$ в поле $U(x) = U_0\delta(x)$.

6.4. Найти энергетический спектр частицы в поле $U(x) = -U_0\delta(x)$, решая задачу в импульсном представлении.

6.5. Найти нормированные волновые функции стационарных состояний в импульсном представлении для частицы в однородном поле.

6.6. Написать уравнение Шредингера для осциллятора в p-представлении и определить распределение вероятностей различных значений импульса.

6.7. Показать, что осцилляторные волновые функции $\psi_n(x)$ с большими n ($n \gg 1$) таковы, что $\psi_n(x)$ имеют максимумы в точках остановки (острые максимумы вокруг классической амплитуды).

6.8. Выразить гамильтониан осциллятора через операторы $\hat{a}^+$, $\hat{a}$. Использовать это представление для нахождения энергетического спектра.

6.9. Найти дискретный спектр частицы в потенциале Морза

$$U(x) = U_0\left(e^{2x/a} - 2e^{x/a}\right).$$

6.I0. Определить значения энергии, которые может принимать частица, помещенная в периодическое поле:

$$V = \begin{cases} 0, & \text{при } nl \leqslant x \leqslant nl+a \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots), \\ V_0, & \text{при } nl-b \leqslant x < nl \end{cases}$$

(Период потенциала $l = a+b$).

6.II. Рассмотреть задачу 6.I0. в случае, если $V = 0$ всюду, кроме точек $x = ln$, в которых $V_0 = \infty$, причем ширина барьера $b \to 0$ так, чтобы $\lim \frac{mV_0 b}{\hbar^2} = const$

(Модель Кронига- Пенни). Определить зависимость энергии E от волнового вектора k вблизи границы разрешенных полос энергии.

6.I2. Рассмотреть полубесконечный кристалл с периодическим потенциалом в области $x > 0$, определенным так же, как в задаче 6.II; а в области $x < 0$ потенциальная энергия W_0. Рассмотреть случай $E < W_0$. (Поверхностные уровни Тамма).

6.I3. Используя метод факторизации, найти энергетический спектр частицы в поле
а) $U(x) = -U_0 ch^{-2}(x/a)$;
б) $U(x) = U_0 tg^2 \pi x/a$, $|x| < \frac{a}{2}$.

6.I4. Найти уровни энергии и волновые функции двумерного гармонического осциллятора.

6.I5. Найти уровни энергии и волновые функции частицы в ∞ - глубокой двумерной потенциальной яме:

$$U(\rho)=\begin{cases} 0\,, & \rho\le a \\ \infty, & \rho>a\,, \quad \rho=\sqrt{x^2+y^2}. \end{cases}$$

6.I6. Найти собственные функции и собственные значения
а) плоского ротатора; б) пространственного ротатора.

6.I7. Найти приближенные волновые функции стационарных состояний и уровни энергии нижней части спектра плоского ротатора, имеющего электрический дипольный момент d , в электрическом поле $\mathcal{E}_0$ ($Id\mathcal{E}_0/\hbar^2 \gg$ I, I - момент инерции ротатора). Указать условия применимости приближения.

6.I8. Найти изменения энергетических уровней и волновых функций стационарных состояний заряженного линейного осциллятора при наложении на него однородного электрического поля, направленного вдоль оси колебаний.

6.I9. Найти сферически-симметричные решения уравнения Шредингера для свободной частицы, нормированные на $\delta(E-E')$.

6.20. Решить уравнение Шредингера для частицы в ∞-глубокой потенциальной яме, задаваемой потенциалом:

$$V(r)=\begin{cases} 0, \text{ при } r\le a \\ \infty, \text{ при } r>a\,, \quad r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}. \end{cases}$$

6.2I. Решить уравнение Шредингера для частицы с моментом l =0 в поле $V=-V_0\exp(-r/a)$, $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$.

6.22. При каком условии на функцию $R(r)$ можно произвести разделение волновых функций в сферических координатах, если потенциальная энергия V имеет вид:

$$V=\Phi(r)+R(r)G(\vartheta,\varphi).$$

6.23. Изобразить графически зависимость радиальных и угловых частей нормированной волновой функции атома водорода $|nlm\rangle$ для состояний $1s, 2s, 2p, 3d$.

6.24. Определить средний потенциал электрического поля, создаваемый атомом водорода в основном состоянии $|100\rangle$.

6.25. Найти среднее электрическое поле атома водорода в основном состоянии на больших расстояниях от атома.

6.26. Вычислить плотности тока в $2p$, $3d$ состояниях атома водорода. Рассчитать, с использованием формулы классической электродинамики, магнитные моменты атома и магнитные поля на ядре в этих состояниях.

6.27. Найти решение уравнения Шредингера для частицы в кулоновском поле, $E = 0$.

6.28. Показать, что если потенциальная энергия частицы $U(r)=U_0 r^n$, то $2\overline{T} = n\overline{U}$, $\hat{T}$ - оператор кинетической энергии. (Теорема вириала).

6.29. Вычислить $\overline{r^{-1}}$, используя теорему вириала.

6.30. Доказать рекуррентную формулу Крамера

$$-\frac{k+1}{n^2}\overline{r^k}+(2k+1)\overline{r^{k-1}}+k\left[\frac{k^2-1}{4}-l(l+1)\right]\overline{r^{k-2}}=0.$$

6.3I. Найти дискретный спектр частицы в поле

$$U(r)=\frac{\alpha}{r^2}-\frac{\beta}{r}.$$

6.32. Определить уровни энергии пространственного осциллятора с потенциальной энергией $U(r)=m\omega^2r^2/2$, кратности вырождения и возможные значения орбитального момента в стационарных состояниях.

6.33. Показать, что среднее значение дипольного момента системы заряженных частиц в состоянии, характеризующемся определенной четностью, равно нулю.

УП. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ, НЕ ЗАВИСЯЩИХ ОТ ВРЕМЕНИ, И ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

7.I. Система с тремя невозмущенными состояниями при наличии возмущения характеризуется матрицей энергии

$$\begin{bmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_2 & b \\ a^* & b^* & E_3 \end{bmatrix}$$

а) Во втором порядке теории возмущений для невырожденного случая найти возмущенные уровни энергии.

б) Полагая $E_2 = E_3$, вычислить уровни энергии во втором приближении теории возмущений.

7.2. Показать, что под действием возмущения расстояние между двумя близкими уровнями увеличивается (уровни "отталкиваются").

7.3. Вычислить поправки первого приближения к волновым функциям и второго приближения к собственным значениям двукратного вырожденного уровня (на базе волновых функций нулевого приближения).

7.4. Определить уровни энергии ангармонического линейного осциллятора с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4,$$

где $\hat{V} = \alpha x^3 + \beta x^4$ является возмущением.

7.5. Вычислить поправки первого, второго и третьего порядков к уровням энергии гармонического осциллятора при наличии возмущения $\hat{V} = \varepsilon x^2$. Сравнить с разложением точного решения. Оценить радиус сходимости ряда.

7.6. На заряженный линейный осциллятор наложено однородное электрическое поле $\mathcal{E}$, направленное вдоль оси колебаний. Рассчитать в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней осциллятора. Сравнить с точным решением (см. 6.18).

7.7. Плоский ротатор с моментом инерции J и электрическим дипольным моментом $\vec{d}$ помещен в однородное электрическое поле $\vec{\mathcal{E}}$, лежащее в плоскости вращения. Рассматривая поле как возмущение, найти поляризуемость основного состояния ротатора.

7.8. В условиях предыдущей задачи найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг и расщепление уровней возбуждённых состояний ротатора. Найти правильные линейные

комбинации.

7.9. Пространственный ротатор с моментом инерции J и дипольным моментом $\vec{d}$, параллельным оси ротатора, помещен в слабое однородное электрическое поле $\vec{\mathcal{E}}$. Найти поляризуемость основного состояния ротатора.

7.I0. В условиях предыдущей задачи рассчитать сдвиг электрических уровней возбужденных состояний ротатора. Каков при этом характер снятия вырождения?

7.II. Найти расщепление I-го возбужденного уровня плоского гармонического осциллятора под действием возмущения $\hat{V} = \alpha xy$ (x, y - плоскость колебаний) в первом порядке теории возмущений. Указать правильные функции нулевого приближения. Сравнить с точным решением.

7.I2. Вычислить, ограничиваясь первым порядком теории возмущений, спектр s - состояний в экранированном кулоновском потенциале: $U(r) = -\frac{e^2}{r}\exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right)$

при $\lambda \gg a$. Оценить максимальное n, при котором применима теория возмущений.

7.I3. Атом щелочного металла в состоянии $2p$ подвергнут действию неоднородного электрического поля, потенциал которого равен $U(\vec{r}) = \beta\,(3z^2 - r^2)$.

Определить правильные линейные комбинации волновых функций и поправки к энергии в первом приближении.

7.I4. Электрон в $3d$ - состоянии помещен в электрическое поле, потенциал которого имеет вид

$$U = D\left\{35\hat{l}_z^4 - 30(l+1)l\cdot\hat{l}_z^2 + 25\hat{l}_z^2 - 6l(l+1) + 3l^2(l+1)^2 + \frac{5}{2}\left(\hat{l}_+^4 + \hat{l}_-^4\right)\right\}.$$

Найти расщепление уровня и правильные линейные комбинации.

7.I5. Показать, что при помещении атома водорода в однородное электрическое поле

а) энергия состояния с квантовыми числами $l = n-1,\ m = n-1$ в линейном по полю приближении не изменяется;

б) не меняется положение центра тяжести расщепленного терма;

в) состояния, отличающиеся только знаком проекции момента, имеют одну и ту же энергию.

7.16. Рассмотреть эффект Штарка для атома водорода, находящегося в состоянии $n=1$.

7.17. Вычислить электрическую поляризуемость атома (или электрическую восприимчивость вещества, содержащего N атомов в см^3). Какие общие соображения можно высказать о поляризуемости атомов щелочных металлов?

7.18. Показать, что взаимодействие заряженной частицы с невозбужденным атомом водорода на больших расстояниях имеет характер притяжения и пропорционально R^{-4}, где R – взаимное расстояние частицы и атома.

7.19. Показать, что два атома водорода в основном состоянии, находящиеся на достаточном удалении, притягиваются по закону R^{-6} (силы Ван-дер-Ваальса).

7.20. Найти энергию взаимодействия на больших расстояниях двух молекул, обладающих постоянными дипольными моментами $\vec{d}_1$ и $\vec{d}_2$. Предполагается, что молекулы находятся в основных состояниях по всем квантовым числам, электронные термы молекул Σ.

7.21. Частица находится в двумерной потенциальной яме $U(x,y)$ вида:

$$U(x,y)=\begin{cases} 0, & \dfrac{x^2}{a^2}+\dfrac{y^2}{b^2}<1, \\ \infty, & \dfrac{x^2}{a^2}+\dfrac{y^2}{b^2}>1 \end{cases}, \text{ причем } b\gg a.$$

Найти уровни энергии и волновые функции частицы нижней части спектра.

7.22. Частица находится внутри непроницаемого эллипсоида вращения, т.е.

$$U(x,y,z)=\begin{cases} 0, & \dfrac{x^2+y^2}{a^2}+\dfrac{z^2}{b^2}\leq 1, \\ \infty, & \dfrac{x^2+y^2}{a^2}+\dfrac{z^2}{b^2}>1, \end{cases} \text{ причем } b\ll a.$$

Найти уровни энергии и волновые функции частицы нижней части спектра.

7.23. То же, что и в предыдущей задаче, но $b\gg a$.

7.24. Гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}}=\frac{\hat{P}_x^2}{2m}+\frac{\hat{P}_y^2}{2M}+\frac{K}{2}(x^2+y^2)+\alpha xy, \quad |\alpha|<K, \quad M\gg m.$$

(Два связанных осциллятора с сильно различающимися массами). Найти в адиабатическом приближении уровни энергии и соответствующие им волновые функции. Сравнить с точным решением.

7.25. Две частицы с сильно различающимися массами находятся в ∞ – глубокой потенциальной яме шириной a. Частицы взаимодействуют друг с другом как непроницаемые точки, т.е.

$$U_{int}(x_1,x_2)=\begin{cases} 0, & |x_1-x_2|>\varepsilon, \\ \infty, & |x_1-x_2|<\varepsilon, \quad \varepsilon\ll a. \end{cases}$$

Найти уровни энергии нижней части спектра и соответствующие им волновые функции.

7.26. Доказать, что в консервативной системе многих микрочастиц движение центра масс отделяется от относительного движения частиц. Рассмотреть случай двух частиц.

7.27. Найти оценку сверху энергии основного состояния гармонического осциллятора, используя пробные функции:

а) $\theta(x,\alpha)=-\exp(-\alpha|x|)$;

б) $\theta(x,\alpha)=1-\alpha|x|, \quad \alpha|x|<1$;

в) $\theta(x,\alpha)=(1+\alpha x^2)\exp(-\alpha x^2)$.

7.28. Вычислить энергию основного состояния ангармонического осциллятора с гамильтонианом

$$\hat{\mathcal{H}}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}+\varepsilon x^4,$$

используя пробную функцию $\theta(x,\alpha)=\exp(-\alpha x^2)$, с точностью до ε^2. Сравнить с результатом задачи 7.5.

7.29. Найти энергию взаимодействия двух атомов водорода в основном состоянии, находящихся на большом расстоянии друг от друга, используя пробные функции

а) $\Psi=C\Psi_{1s}(r_1)\Psi_{1s}(r_2)[1+\alpha z_1z_2]$;

б) $\Psi = C\psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)\left[1+\alpha(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2)\right]$,
где ось z направлена вдоль оси, проходящей через ядра; α – варьируемый параметр.

7.30. Рассмотреть методом линейных комбинаций возможность существования иона He_2^{+++}.

7.31. Показать, что при сближении двух атомов с энергиями E_I и E_2 возникают два уровня с энергиями, большей большего и меньшей меньшего из E_I и E_2. Найти функции "разрыхляющей" и "связывающей" орбиталей.

7.32. Пусть гамильтониан системы имеет вид $\hat{\mathcal{H}}=\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{\mathcal{H}}_1+\hat{\mathcal{H}}_2$, где $[\hat{\mathcal{H}}_0,\hat{\mathcal{H}}_1]=0$ и $[\hat{\mathcal{H}}_0,\hat{\mathcal{H}}_2]\neq 0$. Пользуясь малостью $\hat{\mathcal{H}}_1$ и $\hat{\mathcal{H}}_2$, найти унитарный оператор e^{iS} такой, чтобы преобразованный гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}'=e^{iS}\hat{\mathcal{H}}e^{-iS}$ в первом приближении коммутировал с $\hat{\mathcal{H}}_0$.

УШ. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

8.I. Вычислить в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности барьера вида:

а) $$U(x)=\begin{cases} U_0(1-x^2/a^2), & |x|<a, \\ 0, & |x|>a; \end{cases}$$

б) $$U(x)=\begin{cases} 0, & x<0, \\ U_0(1-x/a), & x>0; \end{cases}$$

в) $$U(x)=\begin{cases} 0, & x<0, \\ U_0\exp(-x/a), & x>0; \end{cases}$$

г) $U(x)=U_0\,ch^{-2}(x/a)$;

д) $U(x)=U_0\dfrac{a^2}{x^2+a^2}$.

8.2. Найти предэкспоненциальный множитель в квазиклассическом выражении для коэффициента прозрачности барьера вида

$$U(x)=\begin{cases} 0, & x<a, \\ \widetilde{U}(x), & x>a. \end{cases}$$

8.3. Найти ВКБ-спектр гармонического осциллятора.

8.4. Найти ВКБ-спектр частицы в потенциале

а) $U(x)=U_0\left[\exp(x/a)-1\right]^2$;

б) $U(x)=-U_0\,ch^{-2}(x/a)$;

в) $U(x)=U_0\,tg^2(\pi x/a)$, $|x|<a/2$;

г) $U(x)=U_0(a/x-x/a)^2$.

8.5. Показать, что с помощью замены в выражении для радиальной волновой функции величины $l(l+1)$ на $(l+\frac{1}{2})^2$ получается волновая функция, обладающая правильным асимптотическим поведением в случае свободного движения.

8.6. Найти ВКБ – спектр частицы в кулоновском поле.

8.7. Найти ВКБ-спектр частицы в потенциале пространственного осциллятора $U(r)=\dfrac{m\omega^2r^2}{2}$.

8.8. Показать, что в ВКБ-приближении условие существования связанного состояния в поле $U(r)=-\gamma/r^2$ совпадает с точным.

IX. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЯВЛЕНИЯ И ТЕОРИЯ КВАНТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

9.I. На заряженный осциллятор, находящийся при $t=-\infty$ в n-м стационарном состоянии, накладывается электрическое поле вида:

а) $\mathcal{E}(t)=\mathcal{E}_0\exp(-|t|/\tau)$;

б) $\mathcal{E}(t)=\mathcal{E}_0\exp\left[-(t/\tau)^2\right]$.

Найти вероятности возбуждений различных состояний осциллятора при $t\to+\infty$ в первом порядке теории возмущений.

9.2. На плоский ротатор, имеющий дипольный момент $\vec{d}$, накладывается однородное, переменное во времени электрическое поле $\vec{\mathcal{E}}(t)=\mathcal{E}(t)\vec{n}$. До включения поля ротатор имел определенное значение m проекции момента. Вычислить в первом порядке теории возмущений вероятности различных значений проекции момента и энергии ротатора при $t \to \infty$. Рассмотреть конкретные зависимости $\mathcal{E}(t)$ вида, указанного в (9.I).

9.3. Пусть возмущение $\hat{V}=0$ при $t \to -\infty$ и $\hat{V}=V_0$ при $t \to +\infty$. Определить вероятность перехода в одно из возбужденных состояний. Рассмотреть случаи "мгновенного" и "адиабатического" включения возмущения на примере потенциала:

$$V(t)=\frac{V_0}{\pi}\left(\frac{\pi}{2}+\operatorname{arctg}\alpha t\right).$$

9.4. Система обладает двумя стационарными состояниями $|1\rangle$, $|2\rangle$ с энергиями $\hbar\omega_1$, $\hbar\omega_2$ $(\omega_1<\omega_2)$. В момент времени $t=0$, когда система находилась в основном состоянии, было включено не зависящее от времени возмущение V. Вычислить вероятность обнаружения системы в том или ином из ее возможных состояний в момент времени $t>0$. Определить период осцилляций.

9.5. Имеется двухуровневая система с энергиями $\hbar\omega_1$ и $\hbar\omega_2$. В момент времени $t=0$ включается периодическое возмущение $V\cos\omega t$, частота которого почти совпадает с частотой $\omega_0=\omega_1-\omega_2$. Определить вероятность обнаружения системы в том или ином из ее возможных состояний в момент времени $t>0$.

9.6. На заряженный гармонический осциллятор мгновенно накладывается внешнее однородное электрическое поле $\mathcal{E}_0$. Найти вероятность перехода в n-е состояние, если при $t<0$ осциллятор находился в основном состоянии.

9.7. Показать, что вне зависимости от того, в каком состоянии находился гармонический осциллятор при $t\to-\infty$, его средняя энергия под действием переменного однородного электрического поля

$$\mathcal{E}(t)=\mathcal{E}_0 f(t) \quad [t\to\pm\infty,\ f(t)\to 0]$$

всегда увеличивается.

9.8. Атом водорода, находящийся в основном состоянии, помещен между пластинами конденсатора. На пластины подается импульс напряжения, в связи с чем на конденсаторе возника-

ет однородное электрическое поле, изменяющееся со временем по закону:

$$\mathcal{E}=0\ (t<0);\quad \mathcal{E}=\mathcal{E}_0 e^{-\frac{t}{\tau}}\ (t>0).$$

Определить вероятность перехода атома в состояния $2s$ $2p$ при $t\to+\infty$ в первом порядке теории возмущений.

9.9 Какой тип перехода требуется для атома водорода в состоянии $3d$, чтобы перейти в основное состояние $1s$?

9.10. На атом водорода, находящийся в основном состоянии, падает линейно поляризованная волна с компонентами вектор-потенциала $A_x=\frac{c}{\omega}\mathcal{E}_0\cos\left[\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)+\delta\right]$, $A_y=0$, $A_z=0$, распространяющаяся в положительном направлении оси z. Найти угловое распределение фотоэлектронов и вычислить вероятность ионизации атома. Считать, что электроны в конечном состоянии можно приближенно описывать плоскими волнами. Эффекты запаздывания не учитывать.

9.11. Световая волна с компонентами вектор-потенциала $A_x=\frac{c}{\omega}\mathcal{E}_0\cos\left[\omega\left(t-\frac{z}{c}\right)\right]$, $A_y=0$, $A_z=0$ взаимодействует с атомом. Считая, что во взаимодействии участвует только один электрон, найти поляризуемость атома.

9.12. Ядро атома водорода, находящегося в стационарном состоянии Ψ_0, испытывает внезапный толчок длительности τ, в результате которого приобретает скорость $\vec{v}$. Предполагая, что $\tau\ll T$ и $\tau\ll\frac{a}{v}$, где T и a характеризуют электронный период и размеры электронной оболочки соответственно, найти вероятность перехода атома в состояние Ψ_n в результате такого "встряхивания".

9.13. Вычислить суммарную вероятность возбуждения и ионизации атома водорода, первоначально находящегося в основном состоянии в результате внезапного "встряхивания", при котором ядру сообщается импульс $\vec{P}$.

9.14. Получить выражение для амплитуды перехода системы из начального (при $t\to-\infty$) n-го состояния дискретного спектра в конечное (при $t\to+\infty$) k-е во втором порядке нестационарной теории возмущений. Предполагается, что возмущение при $t\to\pm\infty$ равно нулю.

9.15. Вычислить вероятность перехода системы под действием возмущений, характеризующихся следующей временной зависимостью

а) мгновенное включение:

$$\hat{V}(t)=\hat{V}_0\,\eta(t) \quad , \text{ т.е.}$$

$$\eta(t)=\begin{cases}0, & t<0\\ 1, & t>0\end{cases} \quad (\hat{V}_0 \text{ не зависит от времени});$$

б) "импульсное" действие:

$$\hat{V}(t)=\hat{V}_0\,\delta(t).$$

9.16. Система с гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}_0$ находится в n-м стационарном состоянии дискретного спектра. При $t=0$ гамильтониан системы внезапно меняется и становится $\hat{\mathcal{H}}=\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{V}$. Найти вероятности различных стационарных состояний системы при $t>0$.

9.17. Гамильтониан системы имеет вид $\hat{\mathcal{H}}=\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{V}_0\,\delta(t)$ при $t<0$ система находилась в n-м стационарном состоянии дискретного спектра. Найти вероятности различных стационарных состояний системы при $t>0$.

9.18. У линейного гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии, в момент времени $t=0$, "точка подвеса" начинает двигаться с постоянной скоростью $\vec{v}$. Найти вероятность возбуждения различных состояний осциллятора при $t>0$.

9.19. Пусть гамильтониан системы, совершающей одномерное движение, явно зависит от времени. Для каждого момента времени t предполагаются известными спектр собственных значений "мгновенного" гамильтониана и полная система соответствующих собственных ортонормированных функций $\psi_n(q,t)$. Записать уравнение Шредингера в представлении, базисом которого является система функций $\psi_n(q,t)$.

9.20. Гамильтониан системы является медленно меняющейся функцией времени t. Предполагая, что система при $t=0$ находится в n-м квантовом состоянии, найти ее волновую функцию при $t>0$ в первом порядке адиабатической теории возмущений.

9.21. На заряженный осциллятор, находящийся при $t\to-\infty$ в основном состоянии, накладывается однородное электрическое поле вида:

а) $\mathcal{E}(t)=\mathcal{E}_0\exp\left(-\frac{|t|}{\tau}\right)$;

б) $\mathcal{E}(t)=\begin{cases}0, & t<0\\ \mathcal{E}_0\left[1-\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right], & t>0.\end{cases}$

Найти вероятности возбуждения различных состояний при $t\to+\infty$ в первом порядке адиабатической теории возмущений.

X ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ И ИЗЛУЧЕНИЯ

10.1. Амплитуда рассеяния при произвольном сферически-симметричном потенциале имеет вид:

$$f(\theta)=\frac{1}{2iK}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left(e^{2i\delta_\ell}-1\right)P_\ell(\cos\theta),$$

где фазы δ_ℓ определяется потенциалом. Выразить полное сечение через эти фазы.

10.2. Показать, что фурье-образ $V(\vec{p})$ сферически-симметричного потенциала рассеяния зависит только от абсолютного значения $\vec{p}$.

10.3. Найти выражение для фазовых сдвигов $\delta_\ell(K)$ в борновском приближении.

10.4. Вычислить в борновском приближении поперечное сечение рассеяния и фазовые сдвиги

а) для экранированного кулоновского потенциала (потенциал Юкавы): $U(r)=\frac{Z_1Z_2e^2}{r}e^{-\frac{r}{r_0}}$;

б) гауссовского потенциала:

$$U(r)=U_0\exp\left[-\left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right];$$

в) прямоугольного потенциала

$$U(r)=\begin{cases}U_0, & r<r_0,\\ 0, & r>r_0.\end{cases}$$

10.5. Найти поперечное сечение рассеяния электрона на двухатомной молекуле с межатомным расстоянием a в борновском приближении, аппроксимируя потенциал отдельных атомов экранированным кулоновским потенциалом. Произвести усреднение по возможным ориентациям молекулы.

10.6. Восстановить потенциал взаимодействия $U(r)$ по фазе рассеяния $\delta_0(k)$ (ℓ =0), считая ее известной при всех энергиях частицы и предполагая, что $|\delta_0(k)| \ll 1$. Рассмотреть случаи

а) $\delta_0(k) = const.$

б) $\delta_0(k) = \frac{\alpha k}{1+\beta k^2}$.

10.7. Найти дифференциальное и полное сечение упругого рассеяния быстрых электронов атомом водорода, находящимся в основном состоянии.

10.8. Найти сечение рассеяния тяжелых заряженных частиц нейтральными атомами, имеющими момент, равный нулю. Скорость рассеиваемых частиц считать много меньшей скоростей атомных электронов.

10.9. Как известно, в результате взаимодействия электрона с позитроном может произойти аннигиляция. Поэтому уровни энергии позитрония имеют конечное время жизни. Найти соотношение между временем жизни основного состояния позитрония и сечением аннигиляции при столкновении медленного позитрония с электроном. Считать, что взаимодействие, ответственное за аннигиляцию, имеет радиус, малый по сравнению с размерами позитрония, и его можно рассматривать как возмущение.

10.10. Найти соотношение между сечениями фотоэффекта с основного состояния атома водорода и радиационной рекомбинации электрона с протоном в основное состояние атома водорода (процесс, обратный фотоэффекту). Влияние спина протона не учитывать.

10.11. Найти время жизни и ширину возбужденного $2p$ -состояния атома водорода. Влиянием спина электрона пренебречь.

10.12. Оценить вероятность электромагнитного перехода атома водорода из $2S_{1/2}$ в $2P_{1/2}$ - состояние. Полученный результат сравнить с вероятностью перехода $2S_{1/2} \to 1S_{1/2}$ с излучением двух фотонов.

10.13. Найти вероятность однофотонного перехода атома водорода из возбужденного $2S_{1/2}$ - состояния в основное - $1S_{1/2}$ - состояние.

10.14. Найти дифференциальное и полное сечение упругого рассеяния фотонов свободной заряженной частицей.

XI. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

11.1. Указать возможные термы следующих конфигураций

$$(ns, n's), (ns, n'p), (ns, n'd), (np, n'p).$$

11.2. Найти возможные термы для конфигураций с одной незаполненной оболочкой $(np)^3, (nd)^2, (nd)^3, (nd)^5, (nf)^2$. Используя правило Хунда, определить термы основных состояний.

11.3. Указать возможные значения полного момента J у термов

$$^1S,\ ^3S,\ ^3P,\ ^2D,\ ^4D.$$

11.4. Из волновых функций одноэлектронной проблемы построить собственные функции, характеризуемые квантовыми числами LSM_LM_S для конфигураций $(np)^3, (nd)^3$.

11.5. Показать, что термы конфигураций $(n\ell)^k$ и $(n\ell)^{4\ell+2-k}$ совпадают.

11.6. Найти для конфигураций $(np)^3$ отношение

$$\varkappa = \left[E(^2P) - E(^2D)\right] / \left[E(^2D) - E(^4S)\right].$$

11.7. Оценить потенциал ионизации отрицательного иона водорода, используя пробную функцию

$$\Phi(\alpha, \beta, r_1, r_2) = e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} + e^{-\beta r_1 - \alpha r_2}.$$

11.8. Определить приближенно энергию основного уровня атома гелия, рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение.

11.9. Определить в модели Томаса-Ферми:

а) число заполненых s-оболочек для атома с зарядом ядра Z;

б) среднее расстояние между электроном и ядром;

в) среднюю энергию кулоновского взаимодействия двух электронов;

г) среднюю кинетическую энергию электрона;

д) энергию, необходимую для полной ионизации атома;

е) среднюю скорость электронов;

ж) средний момент количества движения электрона;

и) среднее радиальное квантовое число электрона.

II.10. Электронная оболочка атома находится в состоянии с полным моментом импульса $\vec{J}\,(M_J=\pm J, \pm(J-1)...)$. Имеется трехмерный изотропный гармонический осциллятор с энергией $E=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$, взаимодействующий с атомом. Гамильтониан взаимодействия

$$\hat{V}=\Lambda(\hat{\vec{J}}\hat{\vec{K}}),$$

$\vec{K}$ – момент импульса осциллятора,, Λ – константа. Найти энергии и волновые функции системы атом + осциллятор. (Найти возможные значения K при заданных значениях n (n =0, 1, 2, 3).

II.II. Система одинаковых N электронов находится в состоянии, описываемом Слэтеровским определителем $\Psi=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P(-1)^P P(u_1 u_2 ... u_N)$, где u_i –одноэлектронные волновые функции электронов со спином $S=\frac{1}{2}$, P – перестановки функций. Выразить матричные элементы $\langle\Psi|\sum\Lambda_i|\Psi\rangle$ и $\langle\Psi|\sum_{ij}\Lambda_{ij}|\Psi\rangle$ через одночастичные и двухчастичные интегралы.

XII. РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

12.1. а) Какой вид принимает уравнение Клейна-Гордона-Фока для заряженной бесспиновой частицы во внешнем электромагнитном поле при преобразовании функции:

$$\Psi\to\Psi_c(\vec{r},t)=\hat{C}\,\Psi(\vec{r},t)=\Psi^*(\vec{r},t)\,?$$

б) Какое преобразование электромагнитного поля следует осуществить одновременно с указанным преобразованием функции $\Psi(\vec{r},t)$, чтобы получающееся при этом уравнение имело такой же вид, что и исходное?

в) На основании полученных результатов дать интерпретацию преобразования $\hat{C}$.

12.2. Показать что внешнее скалярное (по отношению к преобразованию Лоренца) поле оказывает одинаковое действие на бесспиновую частицу и соответствующую ей античастицу.

12.3. Показать, что для бесспиновой частицы в релятивистском случае можно сохранить обычную интерпретацию волновой функции в импульсном представлении, как амплитуды вероятности импульса (в отличие от координатного).

12.4. Найти энергетический спектр s-состояний бесспиновой частицы во внешнем скалярном поле (см. 12.2) вида:

$$U(r)=\begin{cases}-U_0, & r\le a,\\ 0, & r>a.\end{cases}$$

Каков энергетический спектр античастицы в таком поле?

12.5. Найти уровни энергии дискретного спектра заряженной бесспиновой частицы (заряд $-e$) в кулоновском поле ядра с зарядом Z (ядро считать точечным и бесконечно тяжелым).

12.6. Показать, что в достаточно сильном электростатическом поле заряженная бесспиновая частица испытывает притяжение независимо от знака заряда.

12.7. Выяснить, какие из указанных ниже операторов коммутируют с гамильтонианом свободной релятивистской частицы со спином 1/2:

$$\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla;\ \hat{\vec{l}}=\frac{1}{\hbar}[\vec{r}\times\hat{\vec{p}}];\ \hat{\vec{l}}^2;\ \hat{\vec{S}}=\frac{1}{2}\hat{\vec{\Sigma}};\ \hat{\vec{S}}^2;$$

$$\hat{\vec{j}}=\hat{\vec{l}}+\hat{\vec{s}};\ \hat{\vec{j}}^2;\ \hat{\Lambda}=(\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{\Sigma}});\ \hat{I};\ \hat{P}=\beta\hat{I}.$$

Сравнить со случаем нерелятивистской частицы.

12.8. Показать, что для дираковской частицы с массой m=0 оператор γ_5 коммутирует с гамильтонианом. Найти собственные значения указанного оператора и выяснить их физический смысл.

12.9. Показать, что операторы $\hat{P}_\pm=\frac{1}{2}(1\pm\gamma_5)$ являются проекторами.

12.10. Найти энергетический спектр заряженной дираковской частицы в однородном магнитном поле (см. 13.3).

12.11. Показать, что след от произведения нечетного числа матриц Дирака обращается в нуль.

12.12. Показать, что имеет место соотношение

$$(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{A}})(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{B}}) = (\hat{\vec{A}}\hat{\vec{B}}) + 2i\hat{\vec{S}}[\hat{\vec{A}}\times\hat{\vec{B}}]$$

где $\hat{\vec{\alpha}}$ - матрица Дирака, операторы $\hat{\vec{A}}$ и $\hat{\vec{B}}$ коммутируют с $\hat{\vec{\alpha}}$, а $\hat{\vec{S}}$ - оператор спина (S =1/2).

12.13. Показать, что величины $\rho(\vec{r},t) = \Psi^*\Psi$, $\vec{j} = -e\Psi^*\vec{\alpha}\Psi$ удовлетворяют уравнению непрерывности. Убедиться в том, что в нерелятивистском приближении величина $\vec{j}$ переходит в обычную плотность тока вероятности.

XIII. ЧАСТИЦА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

13.1. Найти коммутационные соотношения для компонент скорости заряда в однородном магнитном поле.

13.2. Для заряженной частицы в постоянном однородном магнитном поле найти операторы координат центра тяжести орбиты $\hat{\vec{\rho}}_0$ поперечного (перпендикулярного магнитному полю) движения, квадрата $\hat{\rho}_0^2$ и квадрата радиуса орбиты $\hat{\rho}_\Lambda^2$. Установить коммутационные соотношения

$$[\hat{\vec{\rho}}_0, \hat{\vec{\rho}}_\Lambda], [\hat{\vec{\rho}}_0, \hat{\mathcal{H}}], [\hat{\vec{\rho}}_\Lambda, \hat{\mathcal{H}}].$$

13.3. Найти уровни энергии и волновые функции бесспиновых частиц в однородном магнитном поле при следующих калибровках векторного потенциала:

а) $A_x = 0$, $A_y = H_0 x$, $A_z = 0$;

б) $A_x = -H_0 y$, $A_y = 0$, $A_z = 0$.

13.4. В задаче 13.3 были найдены две полные системы функций $\Psi_{n p_y p_z}$ и $\Psi_{n p_x p_z}$, описывающие стационарные состояния заряженной частицы в однородном магнитном поле при двух различных калибровках потенциала. Найти соотношения между этими волновыми функциями.

13.5. Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний заряженной бесспиновой частицы в однородном магнитном поле, используя следующую калибровку $\vec{A} = \frac{1}{2}[\vec{H}_0\times\vec{r}]$. Какова кратность вырождения энергетических уровней движения частицы? Нормируемы ли на единицу волновые функции стационарных состояний поперечного движения?

13.6. Найти собственные значения операторов квадрата радиуса-вектора $\hat{\rho}_0^2$ центра орбиты поперечного движения и квадрата радиуса орбиты $\hat{\rho}_\Lambda^2$ частицы в однородном магнитном поле. Показать, что $\Psi_{n m p_z}$ (из 13.5) является собственными функциями этих операторов.

13.7. Охарактеризовать поперечное пространственное распределение заряженной частицы в однородном магнитном поле в стационарном состоянии $\Psi_{n m p_z}$ (см 13.5) в случае $m = -en/|e|$. Обсудить случай $n \gg 1$ и произвести предельный переход к классической механике.

13.8. Частица со спином S и $l=0$ находится в постоянном магнитном поле напряженности $\vec{H}_0$. Найти уровни энергии и волновые функции, вычислить среднее значение проекций магнитного момента частицы.

13.9. Вычислить диамагнитную восприимчивость гелия.

13.10. Ядро со спином I =3/2 находится в постоянном магнитном поле напряженности $\vec{H}_0$ и неоднородном электрическом поле, влияние которого можно описать членом

$$\hat{V} = \alpha\left[\hat{I}_z^2 - \frac{1}{3}I(I+1)\right] + \beta\left[\hat{I}_x^2 - \hat{I}_y^2\right].$$

Найти уровни энергии и волновые функции, если

а) $\vec{H}_0 \parallel z$, $\beta = 0$;

б) $\vec{H}_0 \perp z$, $\alpha = 0$.

13.11. Два одинаковых спина $S_1 = S_2 = S$ =1/2 связаны взаимодействием вида $J_x\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + J_y\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + J_z\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}$ и находятся в постоянном магнитном поле $\vec{H}_0$. Найти

а) уровни энергии и волновые функции стационарных состояний;

б) частоты и относительные интенсивности переходов под влиянием переменного (гармонического) магнитного поля амплитуды H и частоты ω, перпендикулярного постоянному полю.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Основные свойства δ-функции:

$\int\limits_{\Delta} f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx = f(x_0)$, где Δ -промежуток произвольной длины, содержащий внутри себя точку x_0.

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|}\,\delta(x);$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\,dk = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} \cos(kx)\,dk;$$

$\delta[\varphi(x)] = \sum\limits_{l} \frac{1}{|\varphi'(x_l)|}\,\delta(x-x_l)$, где x_l -корни уравнения $\varphi(x)=0$.

Полиномы Эрмита.

Удовлетворяют уравнению:

$$\frac{d^2w}{dz^2} - 2z\frac{dw}{dz} + 2nw = 0, \qquad n=0,\mathrm{I},\ldots$$

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2}\frac{d^n}{dz^n}\left(e^{-z^2}\right).$$

Производящая функция:

$$e^{2zt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(z)\frac{t^n}{n!}.$$

Рекуррентные соотношения:

$$H_{n+1}(z) = 2zH_n(z) - 2nH_{n-1}(z),$$

$$\frac{d}{dz}H_{n+1}(z) = 2nH_n(z).$$

Условие ортогональности ($z=x$ -действительно):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}H_m(x)H_n(x)\,dx = \begin{cases} 0, & m\neq n \\ 2^n\sqrt{\pi}\,n!, & m=n. \end{cases}$$

Полиномы Лагерра.

Удовлетворяют уравнению:

$$z\frac{d^2w}{dz^2} + (\alpha+1-z)\frac{dw}{dz} + nw = 0,$$

$n=0,\mathrm{I},2,\ldots$, α - произвольное комплексное число.

$$L_n^{(\alpha)}(z) = \frac{e^z z^{-\alpha}}{n!}\,\frac{d^n}{dz^n}\left(e^{-z}z^{n+\alpha}\right)$$

Производящие функции

$$\frac{e^{-\frac{2t}{1-t}}}{(1-t)^{\alpha+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(\alpha)}(z)\,t^n,$$

если $|t| < \mathrm{I}$, то

$$e^{-zt}(1+t)^{\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(\alpha-n)}(z)\,t^n;$$

Рекуррентные соотношения:

$$nL_n^{(\alpha)}(z) = (2n+\alpha-1-z)L_{n-1}^{(\alpha)}(z) - (n+\alpha-1)L_{n-2}^{(\alpha)}(z), \quad n=2,3,\ldots$$

$$z\frac{dL_n^{(\alpha)}(z)}{dz} = nL_n^{(\alpha)}(z) - (n+\alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(z) = -zL_{n-1}^{(\alpha+1)}(z).$$

Условие ортогональности ($z=x$ -действительно, положительно и α -действительно и $\alpha > -\mathrm{I}$):

$$\int_0^{\infty} e^{-x}x^2 L_m^{(\alpha)}(x)L_n^{(\alpha)}(x)\,dx = \begin{cases} 0, & m\neq n \\ \Gamma(1+\alpha)\cdot\binom{n+\alpha}{n}, & m=n. \end{cases}$$

Полиномы Лежандра.

Удовлетворяют уравнению:

$$(1-z^2)\frac{d^2w}{dz^2} - 2z\frac{dw}{dz} + \left[\nu(\nu+1) - \frac{\mu}{1-z^2}\right]w = 0.$$

Для действительного аргумента $z = x = \cos\vartheta$ и целых действительных неотрицательных $\nu=n$, $\mu=m$

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\,\frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}}\,(x^2-1)^n\,\frac{1}{2^n\cdot n!}.$$

Условие ортогональности:

$$\int_{-1}^{+1} P_n^m(x)\,P_l^m(x)\,dx = \begin{cases} 0, & l\neq n \\ \dfrac{2}{2n+1}\dfrac{(n+m)!}{(n-m)!}, & l=n \end{cases}$$

Рекуррентные соотношения:

$$P_n^{m+2}(\cos\vartheta) - 2(m+1)\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\, P_n^{m+1}(\cos\vartheta) + (n-m)(n+m+1)\,P_n^m(\cos\vartheta) = 0;$$

$$(2n+1)\cos\vartheta\, P_n^m(\cos\vartheta) - (n-m+1)\,P_{n+1}^m(\cos\vartheta) - (n-m)\,P_{n-1}^m(\cos\vartheta) = 0;$$

$$-\sin^2\vartheta\,\frac{d P_n^m(\cos\vartheta)}{d\cos\vartheta} - (n-m+1)\,P_{n+1}^m(\cos\vartheta) + (n+1)\cos\vartheta\, P_n^m(\cos\vartheta) = 0.$$

Функции Бесселя.

Удовлетворяют уравнению

$$z^2\frac{d^2w}{dz^2} + z\frac{dw}{dz} + (z^2-\nu^2)w = 0.$$

Если $\nu = 0, 1, 2, \ldots$, то

$$e^{\frac{z}{2}\left(t-\frac{1}{t}\right)} = J_0(z) + \sum_{n=1}^{\infty}\left[t^n + (-t)^n\right] J_n(z).$$

Функции Матье.

Удовлетворяют уравнению:

$$\frac{1}{4}\frac{d^2w}{dz^2} + (\alpha - 4q\cos 2z)\,w = 0.$$

Вырожденная гипергеометрическая функция.

Удовлетворяет уравнению:

$$z\frac{d^2w}{dz^2} + (c-z)\frac{dw}{dz} - aw = 0,$$

при a, c -целые числа, совпадает с полиномом Лагерра.

Некоторые соотношения между волновыми функциями гармонического осциллятора:

$$q\,\psi_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1},$$

$$\frac{d}{dq}\psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1}.$$

Некоторые радиальные функции $R_{nl}(r)$:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a^3}}e^{-\frac{r}{a}};\quad R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a^3}}e^{-\frac{r}{2a}}\left(1-\frac{r}{2a}\right);\quad R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6a^3}}\cdot\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}};\quad R_{30}(r) = \frac{2}{3\sqrt{3}}e^{-\frac{r}{3a}}\left(1-\frac{2r}{3a}+\frac{2r^2}{27a^2}\right);$$

$$R_{31}(r) = \frac{8}{27\sqrt{6a^3}}\frac{r}{a}\left(1-\frac{r}{6a}\right)e^{-\frac{r}{3a}};\quad R_{32}(r) = \frac{4}{81\sqrt{30a^3}}\frac{r^2}{a^2}e^{-\frac{r}{3a}}.$$

Некоторые сферические функции $Y_{lm}(\vartheta, \alpha)$ [2]:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}};\quad Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta;\quad Y_{1,\pm1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\, e^{\pm i\alpha};$$

$$Y_{20} = -\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\,\frac{3\cos^2\vartheta-1}{2};\quad Y_{2,\pm1} = \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\vartheta\cos\vartheta\, e^{\pm i\alpha};$$

$$Y_{2,\pm2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{\pm 2i\alpha};\quad Y_{30} = -i\sqrt{\frac{7}{16\pi}}\cos\vartheta\,(5\cos^2\vartheta-3);$$

$$Y_{3,\pm1} = \pm i\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\vartheta\,(5\cos^2\vartheta-1)\,e^{\pm i\alpha};$$

$$Y_{3,\pm2} = -i\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\vartheta\cos\vartheta\, e^{\pm 2i\alpha};$$

$$Y_{3,\pm3} = \pm i\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\vartheta\, e^{\pm 3i\alpha};$$

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\vartheta,\alpha)\,Y_{l'm'}(\vartheta,\alpha)\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\alpha = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}.$$

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y^*_{l_1 m_1}(\vartheta,\alpha)\, Y_{lm}(\vartheta,\alpha)\, Y_{l_2 m_2}(\vartheta,\alpha)\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\alpha =$$

$$=(-1)^{-m_1}\, i^{\,l-l_1+l_2}\sqrt{\frac{(2l+1)(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi}}\begin{pmatrix} l_1 & l & l_2\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l & l_2\\ -m_1 & m & m_2\end{pmatrix}.$$

Рекуррентные соотношения:

$$\cos\vartheta\, Y_{lm} = a_{lm}\, Y_{l+1,m} + b_{lm}\, Y_{l-1,m}\,,$$

$$a_{lm} = -i\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\,,\quad b_{lm} = i\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\,.$$

$$n L_n^{(\alpha)}(z) = (2n+\alpha-1-z)L_{n-1}^{(\alpha)}(z) - (n+\alpha-1)L_{n-2}^{(\alpha)}(z),$$

$$z\frac{dL_n^{(\alpha)}(z)}{dz} = nL_n^{(\alpha)}(z) - (n+\alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(z) = -zL_{n-1}^{(\alpha+1)}(z),\ n=2,3\ldots$$

$$R_{nl} = \mathrm{const}\,\rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho),$$

$L_n^{(\alpha)}(\rho)$ – полиномы Лагерра.

Некоторые разложения:

$$\frac{1}{|\vec r-\vec r\,'|} = \begin{cases} \dfrac{1}{r}\displaystyle\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\Theta)\left(\frac{r'}{r}\right)^l, & r'<r;\\ \dfrac{1}{r'}\displaystyle\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\Theta)\left(\frac{r}{r'}\right)^l, & r'>r;\end{cases}\qquad \Theta = (\widehat{\vec r\,\vec r\,'}).$$

$$\frac{1}{|\vec r-\vec r\,'|} = \sum_{K=0}^{\infty}\sum_{q=-K}^{+K}\frac{(r')^K}{r^{K+1}}\frac{4\pi}{2K+1}Y_{K,q}(\vartheta',\alpha')\,Y_{K,-q}(\vartheta,\alpha).$$

$$\frac{1}{|\vec R-\vec r_i+\vec r_j|} = \sum_{K=0}^{\infty}\sum_{q=-K}^{+K}\frac{|\vec r_j|^K}{|\vec R-\vec r_i|^{K+1}}\frac{4\pi}{2K+1}Y_{K,q}(\vartheta_i,\alpha_i)\,Y_{K,-q}(\vartheta_j,\alpha_j).$$

$$\frac{1}{|\vec R-\vec r|} \simeq \frac{1}{R} + \frac{r}{R^2}\frac{4\pi}{3}\Big\{Y_{10}(\Theta,\Phi)Y_{10}(\vartheta,\alpha) + Y_{1,1}(\Theta,\Phi)Y_{1,-1}(\vartheta,\alpha) +$$

$$+ Y_{1,-1}(\Theta,\Phi)Y_{1,1}(\vartheta,\alpha)\Big\} = \frac{1}{R} + \frac{(\vec r\vec R)}{R^3};$$

(если выбрать систему координат с осью z вдоль R).

$$\hat{\vec\alpha} = \begin{pmatrix} & \vec\sigma\\ \vec\sigma & \end{pmatrix};\quad \hat{\vec\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec\sigma & \\ & \vec\sigma\end{pmatrix};\quad \beta = \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1\end{pmatrix};$$

$$\hat{\vec\gamma} = -i\beta\hat{\vec\alpha} = \begin{pmatrix} & i\vec\sigma\\ -i\vec\sigma & \end{pmatrix};\quad \gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = -\begin{pmatrix} & 1\\ 1 & \end{pmatrix};$$

Фундаментальные постоянные

e = 4.80324 10^{-10} ед СГСЭ		(заряд электрона)
μ = 9,1095 10^{-28} г		(масса электрона)
c = 2,997925 10^{10} см·с$^{-1}$		(скорость света)
$\hbar$ = 1,05459 10^{-27} эрг·с		(постоянная Планка)
$a = \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$	= 0,529177 10^{-8} см	(Боровский радиус)
$m_B = \dfrac{e\hbar}{2\mu c}$	= 9,2741 10^{-21} эрг·Гс$^{-1}$	(магнетон Бора)
$m_N = \dfrac{e\hbar}{2\mu_p c}$	= 5,0508 10^{-24} эрг·Гс$^{-1}$	(ядерный магнетон)
$\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c}$	= 1/137,036	(постоянная тонкой **структуры**)