

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Косенок Сергей Михайлович  
Должность: ректор  
Дата подписания: 18.06.2024 12:45:20  
Уникальный программный ключ:  
e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdcf836

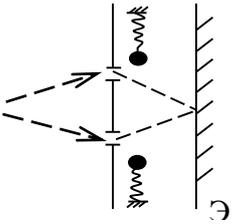
## Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине

### Квантовая теория, 6 и 7 семестры

Код, направление подготовки	03.03.02
Направленность (профиль)	Цифровые технологии в геофизике
Форма обучения	очная
Кафедра-разработчик	Кафедра экспериментальной физики
Выпускающая кафедра	Кафедра экспериментальной физики

Типовые задания для контрольной работы: (6 семестр)

#### Раздел 1. Экспериментальные основания квантовой механики.

1. Рассмотрите мысленный эксперимент по дифракции электронов на двух щелях, за которыми разместили (по разные стороны) две отрицательно заряженные тонкие проволочки и упруго их закрепили (см. рисунок, на котором представлена в разрезе принципиальная схема опыта). По отклонению проволочек можно узнать, через какую щель пролетает электрон. Дать качественное описание того, что будет происходить с дифракционной картиной на экране, если опыт проводить для разных расстояний между проволочками, симметрично их раздвигая.
2. Применяя правила квантования Бора, найти уровни энергии связанных состояний частицы в центрально-симметричном поле, для которого потенциальная энергия  $U$  частицы имеет вид  $U(r) = -\alpha/r^N$  ( $N, \alpha > 0$ ). При каких значениях  $N$  задача теряет смысл? Попробуйте дать физическое толкование того, почему это происходит.
3. Применяя правила квантования Бора, найти уровни энергии связанных состояний частицы в центрально-симметричном поле, для которого потенциальная энергия  $U$  частицы имеет вид  $U(r) = (\alpha/6) r^3$  ( $\alpha > 0$  - постоянная).
4. Найти, с учетом движения ядра, выражение для энергии связи электрона атома водорода в основном состоянии и зависимость постоянной Ридберга от массы ядра.
5. Анализ мысленных экспериментов по дифракции электронов на одной и двух щелях. Понятие о соотношении неопределённостей. Волновая функция и «макрообстановка». Принцип суперпозиции. Как проявляет себя корпускулярно-волновой дуализм в случае дифракции электронов на двух щелях?
6. Применяя правила квантования Бора, найти уровни энергии связанных состояний частицы в центрально-симметричном поле, для которого потенциальная энергия  $U$  частицы имеет вид  $U(r) = \alpha \ln(r/r_0)$  ( $\alpha$  и  $r_0$  - постоянные). При каких значениях  $\alpha$  связанные состояния невозможны?

7. Используя правило квантования Бора найти уровни энергии частицы, движущейся в центрально симметричном поле  $U(r) = -\frac{\alpha}{r} - \frac{\beta}{r^2}$  ( $\alpha, \beta > 0$ ). При каких значениях  $\beta$  задача теряет смысл?
8. Найти импульс фотона, налетевшего на покоившийся свободный электрон, если импульс последнего оказался направленным под углом  $90^\circ$  к импульсу рассеянного фотона, а кинетическая энергия электрона отдачи совпала с энергией рассеянного фотона.
9. Используя соотношение неопределенностей оценить энергию основного состояния электрона в центрально симметричном поле  $U(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^2}$ .
10. При облучении графита рентгеновским излучением с длиной волны  $\lambda$  было обнаружено, что максимальная кинетическая энергия электронов равна  $0,5 \text{ МэВ}$ . Найти длину волны рентгеновского излучения. Под каким углом  $\varphi$  к направлению падающего рентгеновского излучения могут отлетать электроны отдачи, если их импульс равен  $q$ ?
11. Атом водорода двигался со скоростью  $v = 3,5 \text{ м/с}$ , находясь в первом возбуждённом состоянии. В результате перехода в основное состояние атом испускает фотон. Определить угол, под которым вылетает фотон, по отношению к направлению первоначального движения атома, если кинетическая энергия последнего не изменилась.

## **Раздел 2. Математический аппарат квантовой механики.**

12. Рассмотрите оператор  $\hat{A} = a\hat{p} + b\hat{x}$ . Какому ограничению следует подчинить числа  $a$  и  $b$  для того, чтобы оператор  $\hat{A}$  был эрмитовым? Найти собственные функции и собственные значения наблюдаемой  $\hat{A}$ .
13. Дать общее определение квантово-механических средних значений, а также квадратичных дисперсий физических величин (наблюдаемых).
14. Доказать, что если дисперсия наблюдаемой в некотором состоянии равна нулю, то это состояние является собственным вектором оператора этой физической величины.
15. Найти оператор, эрмитово сопряженный оператору  $\hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{D}$ , если среди этих линейных операторов только оператор  $\hat{B}$  является самосопряженным.
16. Используя определение операторов трансляции и инверсии для 3 – мерного случая ( $\hat{T}_a\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a}); \hat{I}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$ ), покажите, что  $\hat{I}\hat{T}_a = \hat{T}_{-\vec{a}}\hat{I}$ .
17. Найти оператор, эрмитово сопряженный оператору масштабного преобразования  $\hat{M}_c\psi(x) = \sqrt{c}\psi(cx)$ .
18. Используя процедуру Грама – Шмидта, построить ортонормированную систему из трёх линейно независимых и не ортогональных векторов  $\psi_1, \psi_2$  и  $\psi_3$  (привести явные формулы).
19. Доказать обобщённое соотношение неопределённости для двух некоммутирующих наблюдаемых:  $\overline{\Delta A^2} \overline{\Delta B^2} \geq \frac{1}{4} \overline{\Delta D^2}$ . Здесь:  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{D}$ .
20. Представить разложение функции, заданной на интервале  $(0, 2\pi)$ , в ряд Фурье как разложение по ортонормированному базису в гильбертовом пространстве. Собственными функциями какого самосопряжённого оператора являются синусы и косинусы в этом разложении?

21. Для волновой функции частицы вида  $\psi(x,0) = Ne^{-\frac{x^2}{b^2}} e^{ik_0x}$  определить  $\overline{(\Delta x)^2}$  и  $\overline{(\Delta p)^2}$ . Проверить справедливость соотношения неопределенностей.
22. Проверить соответствие между классическими и квантовыми скобками Пуассона для наблюдаемых  $x, p, H$  в системе с гамильтонианом  $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} + \lambda \frac{x^4}{4}$  (ангармонический осциллятор).
23. Найти собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{x} + \frac{\hat{d}}{dx}$  в пространстве функций  $L_2(-\infty, \infty)$ . Является ли этот оператор эрмитовым?
24. Доказать, что следующая сумма скалярных произведений вещественна и неотрицательна:  $(\psi, \hat{A}\hat{A}^+\psi) + c(\psi, \hat{B}\hat{A}^+\psi) + c^*(\psi, \hat{A}\hat{B}^+\psi) + |c|^2(\psi, \hat{B}\hat{B}^+\psi) \geq 0$ . Здесь  $\hat{A}, \hat{B}$  - линейные операторы, а  $c$  - комплексное число.

### Раздел 3. Общие свойства уравнения Шредингера

25. Показать, что плотность потока вероятности  $\vec{j}$  для одной частицы отлична от нуля, только если комплексная волновая функция  $\psi(\vec{r})$  имеет фазу, зависящую от координат.
26. Найти для позитрония (система из электрона и позитрона, вращающихся вокруг общего центра инерции) расстояние между частицами в основном состоянии.
27. Доказать, что в процессе эволюции норма вектора состояния остаётся неизменной. Какое свойство оператора Гамильтона оказывается при этом решающим?
28. Записать нестационарное уравнение Шредингера для свободной частицы. Показать, что волновая функция вида (рассмотрите одномерный случай):  $\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) e^{ikx - iE(k)t/\hbar}$ , где  $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ , удовлетворяет этому уравнению (предполагается, что амплитуда Фурье  $C(k)$  - гладкая функция, обеспечивающая сходимость интеграла по  $k$  на  $\pm\infty$ , а в остальном - произвольная).

### Раздел 4. Одномерные квантово-механические задачи

29. Волновая функция частицы имеет вид  $\psi(x) = Ne^{-\frac{x^2}{\sigma^2} + ikx}$  ( $N$  - нормировочный множитель). Определить плотность потока вероятности и найти функцию распределения вероятностей для координаты частицы.
30. Частица находится в бесконечно глубокой «потенциальной яме» в состоянии  $\psi(x) = N(a^2 - x^2)$  ( $|x| \leq a$ ). Разложите это состояние по собственным функциям оператора Гамильтона и определите таким образом вероятности различных значений энергии в этом состоянии.
31. Найти коэффициент Фурье  $C(k)$  для волновой функции  $\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) e^{ikx - iE(k)t/\hbar}$ , где  $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ , если в начальный момент времени  $t=0$   $\psi(x,0) = Ne^{-\frac{x^2}{b^2}} e^{ik_0x}$ . [Указание: использовать значение интеграла  $\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{i\lambda y} e^{-\frac{y^2}{a^2}} = a\sqrt{\pi} e^{-\frac{\lambda^2 a^2}{4}}$ ]

32. Пусть состояние гармонического осциллятора описывается волновой функцией  $\exp(\alpha \hat{a}^+) \psi_0(x)$ , где  $\hat{a}^+$  – оператор рождения,  $\alpha$  – комплексное число, а  $\psi_0(x)$  – волновая функция основного состояния осциллятора. Показать, что это состояние является собственным для оператора уничтожения  $\hat{a}$  и определить соответствующее ему собственное значение [указание: разложить в ряд экспоненту и воспользоваться коммутационным соотношением  $\hat{a}(\hat{a}^+)^n - (\hat{a}^+)^n \hat{a} = n(\hat{a}^+)^{n-1}$ ].
33. Вычислить среднее значение координаты частицы, находящейся в потенциальной яме с непроницаемыми стенками в состоянии, являющемся суммой основного и первого возбужденного состояний.
34. Постройте полный набор операторов для частицы, удерживаемой вблизи начала координат силами с потенциалом  $U(r) = \frac{1}{2}(k_1 x^2 + k_2 y^2 + k_3 z^2)$  (анизотропный осциллятор). Найдите спектр собственных значений гамильтониана этой частицы.
35. Пусть состояние линейного гармонического осциллятора описывается суперпозицией  $\psi(x) = N(e^{-iE_0 t/\hbar} \psi_0(x) + e^{-iE_1 t/\hbar} \psi_1(x))$ . Вычислить среднее значение координаты осциллятора в этом состоянии и определить характер ее зависимости от времени.

*Типовые вопросы к зачету: (6 семестр)*

#### **Экспериментальные основы квантовой механики**

1. Строение атома. Комбинационный принцип Ритца. Опыты Резерфорда. Проблема дискретности спектра частот и проблема устойчивости атома. Постулаты Бора и их применение.
2. Проблема излучения абсолютно чёрного тела. Гипотеза М. Планка. Формула Планка.
3. Фотоэффект и эффект Комптона – демонстрация двойственной природы света. Корпускулярно-волновой дуализм и гипотеза де-Бройля. Связь с постулатами Бора. Опыты Дэвиссона и Джермера, Тартаковского, Вавилова, Бибермана – Сушкина – Фабриканта.

#### **Математический аппарат квантовой механики.**

4. Линейные (векторные) пространства. Линейная зависимость векторов. Базисы. Бесконечномерные векторные пространства. Пространство Гильберта. Норма вектора. Примеры.
5. Понятие линейного оператора. Примеры. Лемма Рисса – Фреше и определение сопряжённого оператора по Эрмиту. Самосопряжённые операторы. Примеры. Матричные самосопряжённые операторы. Свойства операции эрмитового сопряжения.
6. Собственные функции и собственные значения линейных операторов. Основные свойства самосопряжённых операторов с дискретным спектром. Понятие вырождения. Кратность вырождения. Ортогонализация Грама – Шмидта.
7. Теорема Теплица – фон Неймана. Полные наборы наблюдаемых квантовых систем и соответствующие им базисы. Примеры.

#### **Квантово-механическая теория измерений.**

8. Состояния и наблюдаемые (физические величины) в классической и квантовой механике. Принцип соответствия и квантование. Примеры применения процедуры квантования.

9. Постулаты квантово-механической теории измерений. Постулат вероятности. Средние значения физических величин. Дисперсия – количественная мера неопределённости физической величины. Постулат редукции.
10. Обобщённое соотношение неопределённости и одновременная измеримость физических величин. Примеры. Понятие о когерентных состояниях.
11. Стационарные состояния и оператор Гамильтона. Стационарное и нестационарное уравнение Шредингера.

*Типовые задания для контрольной работы (7 семестр):*

### **Раздел 5. Движение в центрально-симметричном поле.**

1. Проверить соответствие классических и квантовых скобок Пуассона для компонент момента количества движения  $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ . Что можно сказать об одновременной измеримости наблюдаемых  $l_x$  и  $l_y$ , а также  $\vec{l}^2$  и  $\hat{l}_z$ ?
2. Покажите, что в состоянии с определенным значением одной из трех компонент МКД, например,  $\hat{l}_z$ , средние значения  $\overline{l_x}$  и  $\overline{l_y}$  равны нулю. Как это можно было бы интерпретировать с точки зрения векторной модели для МКД?
3. Разложить по собственным функциям оператора  $\hat{l}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$  функцию  $\psi(\phi) = N(\cos \phi + \sin \phi)$  ( $N$  – нормировочный множитель). Проверить равенство  $\sum_m |C_m|^2 = 1$  ( $C_m$  – коэффициенты Фурье).
4. Рассмотрите стационарные состояния симметричного 3-мерного гармонического осциллятора (потенциальная энергия  $U(r) = \frac{1}{2}kr^2$ ). Применяя метод разделения переменных, найдите уровни энергии осциллятора. В чем заключается различие между уровнями энергии, находимыми из уравнения Шредингера и уровнями, находимыми на основе полуклассического условия квантования Бора (т.е. с использованием условия  $|\vec{l}| = n\hbar$  для круговых орбит)?
5. Разложить по собственным функциям оператора  $\hat{l}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$  функцию  $\psi(\phi) = N(e^{i\phi} + \sin \phi)$ . Проверить равенство  $\sum_m |C_m|^2 = 1$  ( $C_m$  – коэффициенты Фурье).
6. Доказать, что для электрона в атоме водорода существует сохраняющаяся величина – вектор Рунге – Ленца:  $\hat{A} = \hat{p} \times \hat{\ell} - \frac{e^2}{r} m\vec{r}$ . Подсказка: рассмотрите коммутатор этой величины с гамильтонианом  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$ . Здесь  $\hat{p}$ ,  $\hat{\ell}$  – операторы импульса и момента импульса электрона соответственно.

### **Раздел 6. Теория возмущений. Элементы теории излучения.**

7. Рассмотрите в общем виде амплитуду вероятности перехода из одного стационарного состояния в другое в первом порядке теории возмущений и покажите, что вероятности прямого и обратного переходов (из  $\psi_n$  в  $\psi_k$  и из  $\psi_k$  в  $\psi_n$ ) совпадают.
8. Определите в первом порядке теории возмущений амплитуду вероятности перехода линейного гармонического осциллятора из основного состояния в возбуждённое (т.е. в состояние с  $n \geq 1$ ), если оператор возмущения

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} -\lambda \hat{x} \sin \omega t, & |t| \leq T \\ 0, & |t| > T \end{cases}$$

( $\lambda, \omega$  - вещественные параметры).

9. Считая стационарные состояния некоторой квантовой системы известными, определить зависимость амплитуды перехода первого порядка теории возмущений от  $T$ , где  $2T$  – это время действия возмущения  $\hat{V}(t) = \begin{cases} -\lambda \hat{x} (T - |t|), & |t| \leq T \\ 0, & |t| > T \end{cases}$ .
10. Рассмотрите переходы между стационарными состояниями линейного гармонического осциллятора под действием возмущения  $\hat{V}(t) = -\lambda \hat{x} \cos \omega t, (|t| \leq T)$  в первом порядке теории возмущений. Покажите, что эти переходы осуществляются либо с поглощением, либо с излучением одного кванта  $\hbar \omega_0$  ( $\omega_0$  - собственная частота осциллятора). Считая, что  $\omega$  близка к  $\omega_0$ , вычислите вероятность вынужденного испускания кванта.
11. Рассмотрите в первом порядке теории возмущений амплитуду вероятности перехода для частицы, находящейся в глубокой потенциальной яме ( $|x| \leq a$ ). Оператор возмущения  $\hat{V}(t) = -\lambda \hat{x} \sin \omega t, (|t| \leq T)$ . Почему, если частица находилась вначале в основном состоянии, переходы возможны только в нечетные стационарные состояния?
12. Используя коммутационные соотношения операторов координаты и момента импульса, выведите правила отбора по квантовым числам  $\ell$  и  $m$ .

### Раздел 7. Спин электрона.

13. Найдите (нормированные) собственные векторы операторов спина электрона  $\hat{s}_1 = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_1, \hat{s}_2 = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_2, \hat{s}_3 = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_3$ ,  $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3$  - матрицы Паули. Разложите произвольный (нормированный) вектор (спинор)  $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$  по собственным векторам матрицы  $\hat{s}_2$ . Каков физический смысл коэффициентов разложения?
14. Используя гейзенберговы уравнения движения для спина электрона, покажите, что они совпадают с классическими уравнениями, определяющими прецессию магнитного момента в магнитном поле с индукцией  $\vec{B}$ . Указание: гамильтониан взаимодействия магнитного момента с магнитным полем  $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \vec{\mu} = g_s \vec{s}$ . Частным случаем какого общего утверждения является полученное соответствие?
15. Покажите, что синглетная волновая функция двух электронов соответствует нулевому значению полного спина.

### Раздел 8. Квантовая механика систем, состоящих из одинаковых частиц.

16. Вычислить квантовые дефекты  $S, P, D$  – термов атома лития, если известно, что энергия связи валентного электрона в основном состоянии равна  $5,39$  эВ, первый потенциал возбуждения равен  $1,85$  эВ, а длина волны головной линии диффузной серии равна  $610$  нм.
17. Опишите структуру спиновой волновой функции двух электронов в синглетном и триплетном состояниях.

18. Почему в синглетном спиновом состоянии двух электронов пространственная волновая функция допускает в среднем более близкое их расположение, чем в триплетном?
19. Опишите процедуру получения распределения электронной плотности в многоэлектронном атоме в приближении Томаса – Ферми.

### **Раздел 9. Основы зонной теории**

20. С помощью соотношения неопределённостей найти число свободных электронов с кинетическими энергиями, попадающими в интервал  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ , если металл находится при температуре  $0^\circ K$ . Считать, что образец имеет форму прямоугольного параллелепипеда объёмом  $V$ . Указание: физически различимы только такие электронные состояния, для которых  $x$ -,  $y$ -,  $z$ - проекции импульсов отличаются на величину, превосходящую  $\Delta p_1 = \frac{2\pi\hbar}{\ell_1}$ ,  $\Delta p_2 = \frac{2\pi\hbar}{\ell_2}$ ,  $\Delta p_3 = \frac{2\pi\hbar}{\ell_3}$ , соответственно.  
Объём образца  $V = \ell_1 \ell_2 \ell_3$ .
21. Определив концентрацию свободных электронов и дырок, показать, что при достаточно низких температурах уровень Ферми в чистом беспримесном полупроводнике находится посередине запрещённой зоны.
22. Докажите теорему о том, что число пространственных состояний электрона в кристалле с  $N$  атомами равно  $N$  (используйте или граничные условия Борна – Кармана или нулевые условия).
23. Почему сопротивление чистых полупроводников падает с ростом температуры, а у проводников растёт?

### *Типовые вопросы к экзамену (7 семестр):*

1. Основные математические средства описания атомных систем (наблюдаемые, состояния). Постулаты квантово-механической теории измерений.
2. Квантово-механический принцип соответствия. Примеры.
3. Нестационарное уравнение Шредингера. Задача Коши для нестационарного УШ.
4. Общие свойства одномерного движения. Связь характера спектра оператора Гамильтона с характером движения частицы.
5. Частица в потенциальной яме конечной глубины. Стандартные условия. Дискретный спектр и собственные функции гамильтониана. Характерные особенности пространственного поведения волновых функций. Предел бесконечно глубокой потенциальной ямы.
6. Линейный гармонический осциллятор. Операторы рождения и уничтожения и их свойства. Собственные значения оператора Гамильтона.
7. Стационарные состояния осциллятора. Чётность. Характерные особенности пространственного поведения волновых функций стационарных состояний.
8. Движение частицы в поле потенциального барьера. Непрерывность спектра и проблема нормировки волновых функций непрерывного спектра.
9. Коэффициенты отражения и прохождения сквозь потенциальный барьер. Сохранение числа частиц. Туннельный эффект.
10. Операторы момента импульса. Их выражение в декартовых и сферических координатах. Собственные функции и собственные значения. Одновременная измеримость.
11. Движение частицы в центрально-симметричном поле. Разделение переменных. Общие свойства движения в зависимости от вида потенциала.

12. Квантовая механика водородоподобного атома. Уровни энергии и кратность их вырождения (без учёта и с учётом спина электрона). Спектроскопические обозначения уровней.
13. Свойства волновых функций стационарных состояний водородоподобного атома: пространственное поведение, зависимость от квантовых чисел, чётность.
14. Модель валентного электрона. Гамильтониан и уровни энергии. Частичное снятие вырождения. Спектральные серии для атомов щелочных металлов.
15. Опыт Штерна и Герлаха. Понятие о спине электрона.
16. Математическое описание спина. Операторы спина и их свойства. Волновая функция электрона с учётом спина, спиноры. Вероятностная интерпретация.
17. Принцип неразличимости и его математическая формулировка. Теорема о связи спина и свойств симметрии волновых функций тождественных фермионов и бозонов. Детерминант Слэтера. Принцип Паули.
18. Генезис периодической системы элементов Менделеева. Атомные оболочки. Экспериментальные свидетельства существования оболочек.
19. Квантовая механика молекулы водорода. Поправки первого порядка к уровням энергии. Орто- и пара-водород. Природа химической связи.
20. Стационарная теория возмущений. Поправки первого порядка к уровням энергии и к волновым функциям (случай невырожденных уровней).
21. Теория квантовых переходов. Постановка задачи. Амплитуда вероятности перехода.
22. Нестационарная теория возмущений. Амплитуда перехода в первом порядке теории возмущений.
23. Взаимодействие атома с монохроматической электромагнитной волной в дипольном приближении. Резонансный характер вынужденных квантовых переходов.
24. Адиабатическое приближение для электронных состояний в кристалле. Периодический потенциал Теорема Блоха и квазиимпульс.
25. Зонный характер спектра электронных состояний в кристалле. Понятие обратной решётки.
26. Граничные условия Борна – Кармана. Зона Бриллюэна и заполнение квазинепрерывного спектра состояний в зоне Бриллюэна. Классификация кристаллических твёрдых тел по типу проводимости.
27. Вынужденные электродипольные переходы и коэффициенты Эйнштейна.
28. Вывод формулы М. Планка по Эйнштейну.