

ПРОГРАММА ПО КУРСУ «АТОМНАЯ ФИЗИКА»

Тема 1

Вывод свойств вещества и поля из первопринципов микро-мира. Теория Друде и «парадокс длины пробега» как пример ограниченности классического описания свойств вещества. Модель атома Томсона и ее место в современной физике. Опыты Резерфорда. Планетарная модель атома и проблема устойчивости атомов. Сериальные закономерности в спектре атома водорода. Комбинационный принцип. Постулаты Бора. Принцип соответствия. Правила квантования Бора. Экспериментальные доказательства дискретной структуры атомных уровней. Опыты Франка и Герца. Водородоподобные атомы. Изотопический сдвиг атомных уровней, μ -атомы, позитроний. Релятивистское обобщение модели Бора. Постоянная тонкой структуры. Критический заряд $Z = 137$. Модель атома водорода Бора-Зоммерфельда. Место теории Бора в современной физике. Атомная система единиц.

Тема 2

Проблемы «одновременного проявления» корпускулярных и волновых свойств систем: опыт Ханбери-Брауна и Твисса и его развитие. Тезис, антитезис и синтез концепции корпускулярно-волнового дуализма для волн и частиц. Атом, его состояние; измерения и наблюдаемые. Операторы физических величин, характеризующих состояние атома, и их свойства. Среднее значение и дисперсия для наблюдаемой величины. Вывод вида операторов координаты и импульса в координатном представлении. Собственные значения и функции этих операторов. Оператор момента импульса и его проекции в декартовой и сферической системах координат. Оператор L_z , его собственные значения и функции.

Каноническое коммутационное соотношение, соотношения неопределённостей Гейзенберга. Интегралы движения в квантовой механике. Проблема введения скорости изменения физической величины во времени. Теорема Эренфеста. Изменение положения и скорости центра масс волнового пакета во времени. Нестационарное уравнение Шредингера как задача на исследование эволюции волновой функции и его решение. Связь между стационарным и нестационарным уравнениями Шредингера. Стационарные и нестационарные состояния. Предельный переход к классической механике и оптике.

Тема 3

Задача на нахождение собственных функций гамильтониана, дискретный и непрерывный энергетический спектр. Влияние пространственной симметрии системы. Стационарные состояния одно-, двух- и трехмерной потенциальной ямы. Плотность состояний. Осцилляторная теорема. Вырождение энергетических уровней. Задача на две связанные ямы, локализованные и делокализованные состояния, расщепление энергетических уровней. Примеры использования результатов в современных квантовых технологиях. Уравнение непрерывности и его физический смысл. Плотность потока вероятности. Обобщенный физический смысл плоской волны. Плотность потока вероятности.

Гармонический осциллятор, «осцилляторная система единиц», гамильтониан в безразмерном виде. Собственные значения и собственные функции оператора Гамильтона для гармонического оператора в координатном представлении. Неклассичность стационарных состояний осциллятора, средние значения и дисперсии координаты и импульса в этих состояниях. «Осцилляции» для нестационарных состояний. Динамика волновых пакетов. Когерентное состояние осциллятора, аналогия с классической частицей. Сжатые состояния гармонического осциллятора и их динамика в координатном

представлении. Двух- и трехмерный гармонический осциллятор, вырождение энергетических уровней.

Уравнение Шредингера с центрально-симметричным потенциалом. Интегралы движения. Разделение переменных. Оператор L^2 , его собственные значения и функции. Уравнение Шредингера с центрально-симметричным потенциалом: радиальное уравнение. Уровни энергии. Квантовые числа. Атом водорода. Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний, их свойства. Плотность вероятности и плотность потока вероятности в атоме водорода. Предельный переход к классической механике: квазиклассическое приближение ВКБ (Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна).

Тема 4

Магнетон Бора. Экспериментальное определение магнитных моментов атомов. Необходимость введения спина. Собственный магнитный момент электрона, спиновое гироманнитное отношение. Оператор спина электрона, состояния с конкретным значением проекции спина электрона на выделенную ось. Понятие о правилах сложения моментов количества движения в микромире. Суммарный момент количества движения электрона.

Стационарная теория возмущений. Нахождение поправок в первом порядке для собственных значений и собственных функций. Поправки второго порядка для энергии системы.

Применение теории возмущений к атому водорода: релятивистские поправки и учет спин-орбитального взаимодействия. Тонкая структура спектра атома водорода. Формула тонкой структуры (Дирака). Учет конечности размеров и массы ядра. Сверхтонкая структура спектра атома водорода.

Тема 5

Принцип тождественности микрочастиц, симметрия относительно перестановок в составных системах, бозоны и фермионы, принцип запрета Паули. Чистые и смешанные состояния. Матрица плотности и ее применение для описания составных систем.

Общие принципы описания многоэлектронного атома. Представление о распределении объемного заряда и электростатического потенциала в атоме. Методы описания многоэлектронных систем. Теория возмущений.

Приближение самосогласованного поля и метод Хартри-Фока. Выход за рамки факторизованных функций. Вариационный метод. Современные методы моделирования спектров многоэлектронных систем.

Одноэлектронное состояние в многоэлектронном атоме. Заполнение атомных состояний электронами. Атомные оболочки и подоболочки. Правило Маделунга-Клечковского. Электронная конфигурация. Периодическая система элементов Менделеева.

Атомы щелочных металлов, экранировка заряда ядра, поляризационные эффекты. Метод квантового дефекта. Спектры щелочных металлов.

Атом гелия. Симметрия двухэлектронной волновой функции. Оператор квадрата суммарного спина двух электронов и его собственные состояния. Стационарные состояния в рамках теории возмущений. Основное состояние атома гелия. Возбужденные состояния атома гелия. Синглетные и триплетные состояния. Обменное взаимодействие. Понятие об автоионизации.

Иерархия взаимодействий в многоэлектронном атоме. Приближение LS- и jj -связей. Терм. Тонкая структура термина. Спин и магнитный момент нуклонов и ядра. Сверхтонкая структура атомных спектров.

Правила Хунда и Ланде. Основные термы и состояния элементов периодической системы Менделеева. Термы и волновые функции для конфигурации двух (не)эквивалентных электронов.

Тема 6

Квантовая система в поле электромагнитной волны. Дипольное приближение. Нестационарная теория возмущений и пределы ее применимости. Золотое правило Ферми. Вероятность перехода. Матричный элемент оператора дипольного момента. Понятие о правилах отбора. Разрешенные и запрещенные переходы. Спектральные серии (атомы водорода, гелия, щелочных металлов).

Общие представления об электромагнитных переходах в многоэлектронном атоме. Правило Лапорта. Примеры «запрещенных» переходов в атомных системах. Интеркомбинационный запрет. Переходы, запрещенные во всех порядках мультипольности.

Квантовые свойства равновесного электромагнитного излучения. Квантовое электромагнитное поле и его взаимодействие с атомом. Электромагнитный вакуум и его взаимодействие с атомами. Спонтанные переходы. Естественная ширина спектральной линии. Лэмбовский сдвиг. Опыт Лэмба и Ризерфорда. Эффект Казимира.

Переходы внутренних электронов в атомах. Характеристическое рентгеновское излучение. Закон Мозли. Эффект Оже. Применение Оже-спектроскопии в современных квантовых технологиях.

Атом в магнитном поле. Слабое и сильное поле. Фактор Ланде. Эффекты Зеемана и Пашена-Бака. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР). Атом в электрическом поле. Эффект Штарка. Квантование магнитного потока. Уровни Ландау. Квантовые биты на основе атомных систем («ридберговский» атом; ионы в ловушке).

Тема 7

Адиабатическое приближение. Молекулярный ион водорода. Молекула водорода. Теория Гайтлера-Лондона. Химическая связь. Ковалентная и ионная связи. Валентность. Насыщение химических связей. Молекулярная орбиталь. Гибридизация орбиталей. Элементы стереохимии. Общие представления о колебательном и вращательном движении ядер в молекулах. Систематика состояний двухатомной молекулы.

Электронно-колебательно-вращательный переход. Правила отбора для электромагнитных переходов в двухатомных молекулах. Спектры двухатомных молекул. Принцип Франка-Кондона.