

Министерство образования и науки РФ
Алтайский государственный университет

С. А. Безносюк, М. С. Жуковский, Т. М. Жуковская

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА НАНОСИСТЕМ

Учебное пособие



Барнаул

Издательство
Алтайского государственного
университета
2013

УДК 53 (075.8)

ББК 22.314я73

Б 399

Рецензенты:

доктор физ.-мат. наук, профессор *В. В. Поляков* (АлтГУ),
доктор физ.-мат. наук, профессор *В. А. Плотников* (АлтГУ)

Безносюк, С. А.

Б 399 Квантовая механика наносистем [Текст] : учебное пособие /
С. А. Безносюк, М. С. Жуковский, Т. М. Жуковская. — Барнаул :
Изд-во Алт. ун-та, 2013. — 130 с.

ISBN 978-5-7904-1487-9

В пособии изложены избранные теоретические вопросы квантовой механики, касающиеся фундаментальных основ наноинжиниринга материалов нового поколения. Подробно рассмотрены различные подходы к построению физических моделей квантования корпускулярных и полевых материальных систем. Дана строгая формулировка математического аппарата квантовой механики конечных механохимических систем (атомов, молекул, кластеров). Последовательно изложены детали квантования четырех базовых физических моделей конечных механохимических наносистем.

Книга может быть полезна для магистрантов, аспирантов и специалистов в области нанофизики, нанохимии и нанобиодизайна новых функциональных материалов. Разделы пособия могут быть использованы в магистерских учебных программах «Наноинжиниринг функциональных и биомиметических материалов», «Компьютерная нанотехнология», «Нанофизика», «Нанохимия».

УДК 53 (075.8)

ББК 22.314я73

*Настоящее издание опубликовано в плане реализации
Программы стратегического развития
Алтайского государственного университета*

ISBN 978-5-7904-1487-9

© Безносюк С. А., Жуковский М. С.,
Жуковская Т. М., 2013

© Оформление. Издательство
Алтайского государственного
университета, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	6
-------------------	---

Глава 1

ЗАКОНЫ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ	8
1.1. Механическое состояние системы корпускул в формализме Гамильтона.....	9
1.2. Функция Лагранжа.....	10
1.3. Уравнение движения Гамильтона	11

Глава 2

КВАНТОВАНИЕ КЛАССИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПОЛЯ И СИСТЕМ КОРПУСКУЛ.....	12
2.1. Ультрафиолетовая катастрофа и квантование электромагнитного поля абсолютно черного тела	12
2.1.1. Волновое уравнение электромагнитного поля	13
2.1.2. Квантование волнового вектора и частоты электромагнитных волн в кубической полости.....	15
2.1.3. Квантование энергии электромагнитной волны	18
2.1.4. Вычисление полной тепловой энергии допустимых волн с частотой ν	22
2.1.5. Асимптотики формулы Планка	23
2.2. Модели квантования динамики корпускул	25
2.2.1. Парадоксы классической механики корпускул.....	25
2.2.2. Постулаты Бора.....	28
2.2.3. Модель атома Бора — Зоммерфельда.....	29
2.2.4. Уравнение Гамильтона в сферической системе координат	30
2.2.5. Условие квантования радиуса орбиты	32
2.2.6. Уточнения модели Бора. Условия квантования Бора — Зоммерфельда.....	34
2.2.7. Волны де Бройля и условия квантования Бора — Зоммерфельда.....	38
2.2.8. Волны де Бройля и уравнение Шрёдингера.....	39
2.2.9. Уравнение Дирака.....	42
2.2.10. Интерпретация решений уравнения Шрёдингера.....	43
2.2.11. Концепция Моделунга (квантовая жидкость)	44
2.2.12. Концепция Бора — Гейзенберга — Борна	45

Глава 3

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ ЛИНЕЙНЫХ ОПЕРАТОРОВ В ЛИНЕЙНЫХ ВЕКТОРНЫХ ПРОСТРАНСТВАХ.....	47
3.1. Алгебра линейных операторов в линейном векторном пространстве	47
3.2. Примеры линейных векторных пространств.....	48
3.3. Операторы проектирования в гильбертовом пространстве Дирака.....	54

Глава 4

ПОСТРОЕНИЕ ФОРМАЛИЗМА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	59
4.1. Основные постулаты квантовой механики	59
4.2. Построение квантовой динамики систем в формализме Гамильтона.....	60
4.2.1. Координатное представление динамических состояний системы.....	60
4.2.2. Введение канонически сопряженных операторов импульсов $\{\hat{p}_s\}$	62
4.2.3. q -представление основных физических величин	63
4.2.4. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.....	64
4.2.5. Статистическая полнота описания объектов в квантовой механике.....	66
4.2.6. Полный набор наблюдаемых динамических величин.....	67
4.2.7. Принцип суперпозиции состояний в квантовой механике...	70
4.2.8. Временное уравнение Шрёдингера	71
4.2.9. Изменение средних значений физических величин со временем	73
4.2.10. Стационарные состояния изолированной системы	74
4.2.11. Уравнение Шрёдингера одной частицы в координатном представлении.....	74

Глава 5

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ОДНОЙ ЧАСТИЦЫ	76
5.1. Точно решаемые квантовые модели.....	76
5.2. Общие замечания к решению стационарного уравнения Шрёдингера.....	78
5.3. Модели внешнего потенциального поля $U(\vec{r})$, допускающие точное решение.....	79

Глава 6	
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ	83
6.1. Математическая модель свободной частицы	83
6.2. Два способа построения квазистационарных состояний свободной частицы	86
6.2.1. Волновой пакет	86
6.2.2. Циклические граничные условия	90
ГЛАВА 7	
ЧАСТИЦА В БЕСКОНЕЧНОЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ	93
7.1. Математическая модель квантования	93
7.2. Решение задачи квантования	95
ГЛАВА 8	
ПЛОСКИЙ И СФЕРИЧЕСКИЙ ЖЕСТКИЕ РОТАТОРЫ	101
8.1. Математическая модель квантования	101
8.2. Оператор углового орбитального момента.....	103
8.3. Решение уравнения Шрёдингера для стационарных состояний плоского жесткого ротатора.....	105
8.4. Другие стационарные состояния жесткого ротатора (или частицы на окружности).....	108
8.5. Стационарные состояния сферического жесткого ротатора	109
8.6. Качественный анализ полученных формул.....	112
ГЛАВА 9	
ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ ИОНЫ	118
9.1. Математическая модель квантования	118
9.2. Решение задачи квантования	119
9.3. Стационарные состояния водородоподобных ионов.....	124
Заключение	127
Библиографический список	128

Учебное издание

Сергей Александрович Безносок,
Марк Сергеевич Жуковский,
Татьяна Михайловна Жуковская

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА НАНОСИСТЕМ

Учебное пособие

Редактор *Е. М. Федяева*
Подготовка оригинал-макета,
оформление обложки — *О. В. Майер*

Издательская лицензия ЛР 020261 от 14.01.1997 г.

Подписано в печать 10.12.2013.

Формат 60x84/16. Бумага офсетная. Печать трафаретная.

Усл.-печ. л. 7,67. Тираж 300. Заказ 406.

Типография Алтайского государственного университета:
656049, Барнаул, ул. Димитрова, 66