

ББК  
22.3  
Б189

Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов, Н. И. Петров

# НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$



Лаборатория  
ЗНАНИЙ

Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов, Н. И. Петров

# НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

2-е издание

Допущено Научно-методическим советом по физике  
Министерства образования и науки Российской Федерации  
в качестве учебного пособия для студентов  
высших учебных заведений, обучающихся по техническим  
направлениям подготовки и специальностям



Москва  
Лаборатория знаний

УДК 530.1  
ББК 22.314я73  
Н54

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, доцент, профессор Института физики и прикладной математики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники» **В. В. Бардушкин**;  
доктор физико-математических наук, доцент кафедры общей и прикладной физики Национального исследовательского Московского государственного строительного университета (НИУ МГСУ) **И. В. Поярко**

**Байков Ю. А.**

Н54 Нерелятивистская квантовая механика : учебное пособие / Ю. А. Байков, В. М. Кузнецов, Н. И. Петров. — 2-е изд. — М. : Лаборатория знаний, 2026. — 315 с. : ил.

ISBN 978-5-93208-500-4

Учебное пособие предназначено для подготовки специалистов в области наукоемких технологий, связанных с квантовой физикой микромира, в частности для подготовки студентов по направлению «Нanomатериалы и нанотехнологии». В книге подробно изложены основные виды формализма квантовой механики, включая операторную алгебру, матричную механику и скобочный аппарат Дирака. Значительное внимание уделено приближенным квантово-механическим методам, широко применяемым в квантовой химии. В соответствии с требованиями новых образовательных стандартов в книгу включены элементы развивающегося направления квантовой механики, а именно квантовой теории кубитов, которое связано с проектированием и созданием в будущем квантовых компьютеров. Достаточное место отведено технике конкретных квантово-механических вычислений. Учебное пособие сочетает строгое изложение фундаментальных основ теории с рассмотрением современных задач, требующих квантово-механического подхода.

Для студентов и аспирантов высших технических учебных заведений, а также преподавателей физики и других естественно-научных дисциплин в технических вузах.

554746

УДК 530.1  
ББК 22.314я73

БИБЛИОТЕКА

ФГАОУ ВО  
Сибирский федеральный  
университет

Учебное издание

Байков Юрий Алексеевич  
Кузнецов Вадим Михайлович  
Петров Николай Иванович

**НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**

**Учебное пособие**

Ведущие редакторы *И. Я. Иццоки*, канд. хим. наук *Д. К. Новикова*  
Художник *М. А. Владимирская*

Технические редакторы *Е. В. Денюкова*, *Т. Ю. Федорова*

Корректор *Е. Н. Клитина*. Компьютерная верстка: *В. И. Савельев*, *О. Г. Ланко*

Подписано в печать 26.06.25. Формат 70×100/16.

Усл. печ. л. 26,00. Заказ № ВШ-1098.

Отпечатано в России

Издательство «Лаборатория знаний»

125167, Москва, проезд Аэропорта, д. 3

Телефон: (499) 157-5272, e-mail: info@pilotLZ.ru, http://www.pilotLZ.ru

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Предисловие</b> . . . . .	7
<b>Введение</b> . . . . .	8
<b>Глава 1</b>	
<b>Операторное представление квантовой механики</b> . . . . .	11
1.1. Квантово-механические постулаты. Собственные функции и собственные значения квантово-механических операторов. Уравнения Лагранжа и Гамильтона . . . . .	11
1.2. Волновая функция и ее интерпретация в связи с измерениями . . . . .	18
1.3. Классификация операторов квантовой механики . . . . .	25
1.4. Основное уравнение квантовой механики. Гамильтониан и оператор импульса . . . . .	30
1.5. Уравнение Шредингера. Собственные функции и собственные значения оператора энергии и их свойства. . . . .	37
1.6. Стационарные состояния. Общее решение уравнения Шредингера в произвольный момент времени. Теорема Эренфеста. . . . .	41
1.7. Задача двух тел в системе центра масс . . . . .	48
1.8. Атомные структуры в системе центра масс. . . . .	50
1.9. Приближение Борна—Оппенгеймера. . . . .	56
1.10. Молекулярные структуры в приближении Борна—Оппенгеймера . . . . .	59
1.11. Собственные функции и собственные значения оператора импульса. Условия нормировки в случаях ограниченного и неограниченного пространства. Дельта-функция Дирака и ее свойства . . . . .	61
1.12. Разложение волновой функции по собственным функциям оператора импульса системы, обладающим свойством полноты . . . . .	66
1.13. Собственные функции и собственные значения оператора координаты . . . . .	69
1.14. Коммутаторы и антикоммутаторы квантовой механики. Движение заряженной нерелятивистской частицы в произвольном электромагнитном поле. Оператор силы Лоренца в квантовой механике . . . . .	72
1.15. Соотношения неопределенностей для канонически сопряженных величин. . . . .	79
<b>Глава 2</b>	
<b>Матричное представление квантовой механики</b> . . . . .	86
2.1. Матрицы и их свойства. Нулевая, единичная и постоянная матрицы . . . . .	86

2.2. Преобразование матриц и их диагонализация. . . . .	89
2.3. Свойства эрмитовых и унитарных матриц. Матрица унитарного преобразования. . . . .	91
2.4. Матрица энергии и ее координатное представление. Представление волновой функции в виде унитарной матрицы . . . . .	99
2.5. Уравнения движения в операторной и матричной формах. Интегралы движения. Оператор четности как интеграл движения . . . . .	103
2.6. Система собственных функций оператора энергии как унитарная матрица . . . . .	106

### Глава 3

<b>«Бра-кет» формализм Дирака . . . . .</b>	<b>109</b>
3.1. «Бра-» и «кет-векторы» Дирака и их свойства . . . . .	109
3.2. Аналогия «бра-кет» формализма с матричным представлением квантовой механики. Гипервириальная теорема . . . . .	110
3.3. Проекционные операторы. След проекционного оператора . . . . .	114
3.4. Разложение единицы через проекционные операторы. . . . .	117
3.5. Спектральное разложение эрмитовых и неэрмитовых операторов по их собственным векторам в «бра-кет» формализме . . . . .	118
3.6. Однородные функции и теорема Эйлера для однородных функций . . . . .	120
3.7. Теорема вириала в классической механике. . . . .	121

### Глава 4

<b>Вариационный принцип в квантовой механике . . . . .</b>	<b>123</b>
4.1. Среднее значение энергии основного состояния квантовой системы . . . . .	123
4.2. Связь вариационного принципа с уравнением Шредингера . . . . .	125
4.3. Вариационный принцип для возбужденных состояний . . . . .	127
4.4. Дифференциальная теорема Гельмана—Фейнмана . . . . .	129
4.5. Интегральная теорема Гельмана—Фейнмана. . . . .	130
4.6. Теорема вириала в квантовых системах с однородной потенциальной энергией . . . . .	132
4.7. Связь вариационного принципа с изменением масштаба пространственных координат . . . . .	135
4.8. Теорема вириала в приближении Борна—Оппенгеймера . . . . .	137

### Глава 5

<b>Теория возмущений . . . . .</b>	<b>141</b>
5.1. Невырожденная теория возмущений . . . . .	141
5.2. Резольвента и ее применение в теории возмущений . . . . .	144
5.3. Теорема Вигнера. Вычисление точных поправок к энергии. . . . .	148
5.4. Вариационный метод в теории возмущений. . . . .	153
5.5. Вырожденная теория возмущений . . . . .	157
5.6. Теория возмущений Бриллюэна—Вигнера. . . . .	160
5.7. Сравнение различных методов теории возмущений . . . . .	163

**Глава 6****Момент импульса и его представление в квантовой механике . . . 170**

- 6.1. Операторы компонент момента импульса и их коммутаторы . . . . . 170
- 6.2. Собственные функции оператора момента импульса . . . . . 174
- 6.3. Собственные значения оператора момента импульса и его компонент . . 177
- 6.4. Матричное представление момента импульса и его проекций . . . . . 180
- 6.5. Выражения для матричных элементов операторов компонент момента импульса . . . . . 183
- 6.6. Сложение операторов момента импульса и его компонент . . . . . 186

**Глава 7****Тожественные частицы и спин. Квантово-механические спиноры . . . . . 190**

- 7.1. Симметричные и антисимметричные волновые функции квантовых систем . . . . . 190
- 7.2. Линейные комбинации несимметризованных волновых функций. Различимость тождественных частиц . . . . . 191
- 7.3. Детерминант Слэтера и принцип Паули для тождественных частиц. . . 193
- 7.4. Спин-орбитали . . . . . 196
- 7.5. Спиновые состояния многоэлектронных систем . . . . . 198
- 7.6. Операторы перестановок и антисимметризации . . . . . 203
- 7.7. Понятие проекционного оператора . . . . . 205
- 7.8. Оператор антисимметризации и его коммутационные свойства . . . . . 208
- 7.9. Спиновые функции электрона и их представление в матричной форме . 210
- 7.10. Двух- и трехэлектронные спиновые функции . . . . . 212
- 7.11. Симметричные и антисимметричные спиноры двух- и трехэлектронных систем. . . . . 214

**Глава 8****Квантово-механическое описание состояний атомов легких и тяжелых химических элементов. . . . . 217**

- 8.1. Атом водорода. Собственные функции (водородные орбитали) и собственные значения оператора Гамильтона для атома водорода и водородоподобных атомов . . . . . 217
- 8.2. Самосогласованное поле. Обменное взаимодействие электронов в атоме гелия и молекуле водорода . . . . . 226
- 8.3. Вариационный метод в модели двухэлектронной системы. Приближение Хартри . . . . . 233
- 8.4. Уравнение Томаса—Ферми для многоэлектронных атомов . . . . . 239

**Глава 9****Взаимосвязь «бра-кет» формализма Дирака с операторным и матричным представлениями квантовой механики . . . . . 246**

- 9.1. Зависимость амплитуд вероятности от координаты. Волновая функция как амплитуда вероятности . . . . . 246
- 9.2. Связь уравнений Гамильтона и Шредингера . . . . . 251

9.3. Симметрия и законы сохранения . . . . .	252
9.4. Средние энергии в «бра-кет» представлении . . . . .	258
<b>Глава 10</b>	
<b>Квантовая механика кубитов.</b> . . . . .	264
10.1. Матрица плотности квантовых систем и ее свойства . . . . .	264
10.2. Одно- и двухкубитовые квантовые системы. Чистые и смешанные состояния однокубитовых систем . . . . .	267
10.3. Основные виды однокубитовых квантовых операций . . . . .	269
10.4. Квантовые состояния двухкубитовых систем. Квантовая когерентность векторов состояний кубитов. . . . .	271
10.5. Интерферометр Маха-Цендера и его описание однокубитовыми операциями . . . . .	272
10.6. Двухкубитовые квантовые операции. . . . .	274
10.7. Запутанные состояния кубитов и их описание матрицей плотности двухкубитовых систем . . . . .	276
10.8. Вектор состояния двухкубитовых систем и его разложение по базисным функциям кубитов (разложение Шмидта) . . . . .	280
10.9. Энтропия фон Ноймана и ее связь с матрицей плотности двухкубитовых систем . . . . .	281
10.10. Классификация кубитовых состояний для бозонов и фермионов . . . . .	282
<b>Глава 11</b>	
<b>Решение квантовомеханических задач.</b> . . . . .	289
Приложение 1. Квазиклассическое приближение (приближение Вентцеля— Крамерса—Бриллюэна: ВКБ-метод) . . . . .	289
Приложение 2. Задачи на операторную алгебру . . . . .	293
Приложение 3. Задачи на матричную форму квантовой механики . . . . .	298
Приложение 4. Нахождение собственных значений и собственных вектор-столбцов матриц и спиноров электронов (матриц Паули) методом Гаусса . . . . .	303
Приложение 5. Квантовая теория кубитов . . . . .	309
<b>Заключение</b> . . . . .	311
<b>Литература</b> . . . . .	312

# ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемая читателям книга «Нерелятивистская квантовая механика» представляет собой расширенное и дополненное издание книги Ю. А. Байкова и В. М. Кузнецова «Квантовая механика», вышедшей в издательстве «Бином. Лаборатория знаний» в 2013 году и написанной по материалам лекций, читаемых в РХТУ им. Д. И. Менделеева в расширенном курсе физики для подготовки специалистов по направлению «Нanomатериалы и нанотехнологии».

Выбор тематики для данного учебного пособия определялся требованиями новых образовательных стандартов для высших технических учебных заведений. В книге подробно изложены основные виды формализма квантовой механики, включая операторную алгебру, матричную механику Гейзенберга и «скобочный» аппарат Дирака. Последний весьма существенен в связи с тем, что в образовательные стандарты включены элементы нового развивающегося направления нерелятивистской квантовой механики, а именно теории кубитовых систем, связанной с проектированием и созданием квантовых компьютеров. Этой теме в книге посвящается отдельная глава. Значительное внимание уделено рассмотрению методов решения уравнения Шредингера в различных приближениях, в том числе методам теории возмущений, приближению Борна–Оппенгеймера и методам Хартри–Фока, которые широко применяются в современной квантовой химии.

Кроме того рассмотрена техника конкретных квантово-механических вычислений, например, более подробно, чем в других изданиях, изложен материал, посвященный вычислению коммутаторов при определении силы Лоренца, вычислению энтропии фон Ноймана для кубитовых систем и решению ряда других важных задач.

Учебное пособие сочетает строгое изложение фундаментальных основ теории с рассмотрением важных современных задач, требующих квантово-механического описания. В новой редакции учебного пособия добавлена новая глава (гл. 11), состоящая из пяти приложений. Она написана при участии Н. И. Петрова, доцента кафедры физики РХТУ им. Д. И. Менделеева, и посвящена практическому применению формализма квантовой механики, предоставляя читателям возможность ознакомиться с аппаратом и методами бра-кет Дирака при решении весьма значимых современных квантово-механических задач. Такое дополнение будет полезным при изучении современных методов нерелятивистской квантовой механики студентами, аспирантами, научными сотрудниками и преподавателями физико-математических и технических вузов.



# ВВЕДЕНИЕ

Современное состояние науки о материалах требует глубоких и прочных знаний в области фундаментальных достижений физики и химии микромира. Поскольку объем поступающей научной информации из года в год растет, возникает проблема систематизации и упорядочения известных ранее научных данных с вновь приобретаемыми. В последнее время большую значимость приобрели вопросы, связанные с нанотехнологиями и получением на их основе различных наноматериалов. Для решения многих практических задач в этой области требуются специалисты с достаточно широким кругозором в областях физики и химии микромира. В силу того, что физические и химические процессы, происходящие в микромире, основаны на формализме квантовой механики, возникает проблема изложения этой дисциплины с учетом современных достижений в ее развитии. Предлагаемая книга основана на курсе лекций, читаемых студентам РХТУ им. Д. И. Менделеева по направлениям подготовки, требующим прохождения углубленного курса физики, частью которого является квантовая механика.

Одна из важнейших целей, стоящих перед авторами, состояла в том, чтобы дать читателю ясное понимание формализма квантовой механики, в частности, операторной алгебры и матричной механики, для решения прикладных вычислительных задач, неизбежно возникающих при исследовании процессов молекулярно-атомных взаимодействий в веществе, которые составляют основу физики и химии микромира. Особое внимание было уделено описанию различных приближенных подходов квантово-механического формализма, играющих значительную роль при проведении конкретных квантово-механических вычислений и оценок физических параметров в атомных и молекулярных системах. Это относится прежде всего к анализу молекулярных гамильтонианов в приближении Борна—Оппенгеймера, методу теории возмущений Рэлея—Шредингера и Бриллюэна—Вигнера и особенно к методам Хартри—Фока, столь часто используемым в квантовой химии.

Большое внимание авторы уделили изложению вариационного принципа в квантовой трактовке формальных методов, которые применяются в операторной алгебре и матричной механике Гайзенберга. В частности, это относится к получению уравнения Шредингера, а также к доказательствам теорем Гельмана—Фейнмана и теоремы вириала для квантовых систем с однородной потенциальной энергией в приближении Борна—Оппенгеймера.

Особое место в книге отведено «бра-кет» формализму Дирака и его связи с операторной алгеброй, что очень важно для изложения новейших иссле-

дований в области квантовой механики кубитов. В частности, это относится к описанию одно- и двухкубитовых систем и соответствующих квантовых операций. Это направление в квантовой механике интенсивно развивается во всем мире и имеет большие перспективы, связанные с созданием квантовых компьютеров.

Одной из задач авторов являлось ознакомить читателей с техникой конкретных квантово-механических вычислений с использованием известных теорем и канонических операторной алгебры, матричной механики, операций с кубитовыми системами. Наглядно это лучше всего проявляется при использовании формализма матричной алгебры спиноров одно-, двух- и трехэлектронных систем, с помощью которого можно получить много информации, связанной с изучением квантовых состояний легких химических элементов периодической системы Менделеева.

В предлагаемом варианте курса «Нерелятивистская квантовая механика» авторы отошли от традиционной трактовки соотношения неопределенностей, поскольку точные квантово-механические расчеты указывают на несколько иной числовой коэффициент связи этого соотношения с постоянной Планка. Более подробно, чем ранее, изложена процедура вычисления коммутаторов при определении оператора силы Лоренца и в некоторых других задачах. Вместе с тем, учитывая учебную направленность издания, при изложении традиционных разделов квантовой механики авторы опирались на методику изложения таких известных учебников и монографий, как «Механика» и «Квантовая механика» Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица; «Квантовая механика» Л. Шиффа; «Квантовая механика» Э. Ферми; «Фейнмановские лекции по физике» Р. Фейнмана, Р. Лейтона и М. Сэндса, а также на недавно вышедшую книгу И. Майера «Избранные главы квантовой химии».

Прочтение предлагаемого варианта курса, по мнению авторов, продолжит знакомство читателя с основами математического анализа, матричной и линейной алгебры, а также с квантовыми представлениями о микромире в рамках углубленного курса физики РХТУ им. Д. И. Менделеева. Книга рассчитана на студентов, аспирантов, преподавателей и научных работников, занимающихся изучением физики и химии микромира, а также проблемами, стоящими перед современным материаловедением, в частности, в таких областях, как наноматериалы и технологии их получения.

Авторы признательны профессору НИУ МФТИ Ю. В. Петрову за просмотр рукописи и ряд замечаний.