

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
КОМИТЕТ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ТЕРМИНОЛОГИИ

Сборники рекомендуемых терминов

Выпуск 104

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Терминология



«НАУКА»

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
КОМИТЕТ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ТЕРМИНОЛОГИИ

СБОРНИКИ РЕКОМЕНДУЕМЫХ ТЕРМИНОВ

Выпуск 104

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Терминология

Ответственный редактор выпуска
доктор физико-математических наук
Н. П. КЛЕПИКОВ



МОСКВА
«НАУКА»
1985

Квантовая механика. Терминология. М.: Наука, 1985. (Сборники рекомендуемых терминов; Вып. 104).

Настоящая терминология рекомендуется Комитетом научно-технической терминологии АН СССР к применению в научной литературе, учебном процессе, справочно-информационных изданиях и т. п.

Терминология рекомендуется Министерством высшего и среднего специального образования СССР для высших и средних специальных учебных заведений.

Рекомендуемые термины просмотрены с точки зрения норм языка Институтом русского языка Академии наук СССР.

ВВЕДЕНИЕ

Квантовая механика — один из наиболее фундаментальных разделов современной теоретической физики. Она возникла в двадцатые годы нашего столетия для количественного описания движения частиц, входящих в состав молекул, атомов и атомных ядер, взаимодействия этих систем с электромагнитным полем, а также для описания рассеяния частиц.

Квантовая механика излагается в многочисленных учебниках для высших учебных заведений, переводных книгах, во все возрастающем потоке научных и популярных публикаций, применяется в ряде технических разработок.

Проникновение квантовомеханических терминов во множество прикладных областей делает полезным публикацию наиболее важных устоявшихся научных терминов. Всякая научная терминология вырабатывается научной общественностью в повседневной практической деятельности, и трудности отбора терминологии, усложненной многообразием применений квантовой механики и, соответственно этому, существованием общих и специальных терминов, значительны. Поэтому основной задачей авторов предлагаемой рекомендации явился отбор именно общепринятых и общеупотребительных терминов.

Терминология квантовой механики опирается как на общезначимую, так и на математическую терминологию, многие понятия и соответствующие термины, широко используемые в квантовой механике, не являются специфическими для нее. Такие термины не включены в настоящий сборник в качестве самостоятельных позиций, но при использовании их в определениях из нескольких равнозначных терминов-синонимов выбирался наиболее современный термин, преимущественно используемый в физике частиц, атомов и молекул (так, вместо термина «момент количества движения» используется термин «угловой момент»).

Термины «классическая система» и «квантовая система» не определяют, поскольку последний термин означает, в сущности, всякую физическую систему, а первый, как известно, систему, в которой действие всегда велико по сравнению с постоянной Планка. Не дается также определение понятия состояния физической системы, так как и оно относится к основным понятиям естествознания.

Квантовая механика в своем развитии послужила основанием для построения релятивистской квантовой механики частиц и релятивистской квантовой теории поля. Эти разделы теоретической физики интенсивно развиваются и далеки еще от своего завершения. В настоящем сборнике составители ограничились терминологией нерелятивистской квантовой механики (в пределах ее основных понятий), квантовой механики атомов, молекул и явлений столкновения, рассеяния и ядерных реакций. Не рассматриваются термины, относящиеся к квантовой теории твердого тела и других сред, а также к техническим приложениям квантовой механики.

При формулировании определений понятий последовательно проводилось разграничение между объектами (частицы, атомы, молекулы и т. д.), характеристиками их состояний (энергия, импульс, угловой момент и т. д.)

и теми элементами квантовой механики (волновые функции и операторы), которые описывают (вообще говоря, многими эквивалентными способами) состояния и характеристики рассматриваемых объектов.

Задача дать всеобъемлющие определения понятий авторами не ставилась. Приводятся в основном определения, применимые в пределах рассматриваемого круга физических явлений. Более того, определения ряда понятий сознательно сужены в соответствии с потребностями их применения только по отношению к кругу явлений того раздела, в котором они расположены; отдельные определения могут показаться излишне пространными, однако они не избыточны, а лишь учитывают многие связи вводимых понятий с введенными ранее.

Нерелятивистская квантовая механика, как и всякая наука, предполагает использование некоторого уровня феноменологии. Так, составные физические системы в ряде задач можно рассматривать как элементарные, поэтому, например, термин «спин» означает угловой момент системы в целом, тогда как термин «полный угловой момент» используется для выражения того же понятия применительно к системе, структура которой рассматривается явно.

Заметим, что термин «фазовое пространство» употребляется среди физиков в нескольких совершенно различных смыслах: это либо $6N$ -мерное пространство для N частиц, параметризуемое значениями всех координат и импульсов частиц системы, либо $8N$ -мерное пространство, где дополнительные измерения параметризуются временами и энергиями частиц, либо, наконец, $(3N-4)$ -мерное пространство компонент импульсов частиц, связанных заданием их суммарной энергии и импульса. В определении № 70 этот термин используется в первом смысле, а в определении № 124 — в последнем.

Предлагаемая терминология состоит из следующих разделов: I — Основные понятия; II — Квантовая механика атома; III — Приближенные методы; IV — Квантовая механика молекул; V — Столкновения, рассеяние и ядерные реакции.

* * *

Для создания научно обоснованной терминологии, т. е. системы определений понятий и терминов, при Комитете научно-технической терминологии АН СССР была образована научная комиссия под общим научным руководством члена-корреспондента АН СССР Д. В. Ширкова в составе: Н. П. Клепиков (председатель), Б. Л. Воронов, В. П. Кузнецов, М. И. Резанов, Я. А. Смородинский, Н. Ф. Степанов, И. Е. Ожигов (КНТТ АН СССР), Г. Г. Самбурова (КНТТ АН СССР). На отдельных этапах работы в комиссии принимали участие И. В. Аборенков, И. В. Александров, Б. А. Лысов, Ю. А. Музыка, В. И. Перель.

Научная комиссия в 1982 г. подготовила и опубликовала проект терминологии, который был разослан для широкого обсуждения всем заинтересованным организациям и отдельным ученым. Полученные отзывы касались как вопросов построения терминологической системы в целом, так и отдельных понятий и терминов. Особенно полезными оказались отзывы и конкретные конструктивные рекомендации чл.-кор. АН СССР Е. Л. Фейнберга (ФИАН), д-ра физ.-мат. наук М. И. Широкова (лаборатория теоретической физики ОИЯИ), зам. директора Института физики ЛитССР

З. Рудзикаса, д-ра физ.-мат. наук Л. А. Фальковского (Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау). После тщательного анализа и рассмотрения всех полученных отзывов, а также внесения необходимых уточнений и дополнений научная комиссия в указанном выше составе, кроме И. Е. Ожигова, подготовила настоящую рекомендацию.

Всем организациям и лицам, оказавшим большую помощь в подготовке данной терминологии своими замечаниями, предложениями и консультациями, Комитет научно-технической терминологии выражает глубокую благодарность.

В своей работе комиссия руководствовалась принципами и методикой, выработанными Комитетом¹.

* * *

Ниже даются пояснения к тексту и оформлению публикуемой терминологии.

В первой колонке указаны номера терминов.

Во второй — помещены термины, рекомендуемые для определяемого понятия. Они расположены в систематическом порядке в соответствии с принятой в данной работе систематикой и классификацией понятий. Как правило, для каждого понятия предлагается один основной термин, напечатанный полужирным шрифтом. Однако в нескольких случаях наравне с основным термином предлагаются параллельные термины. Например, к «представлению взаимодействия» (№ 26) добавлены «картина взаимодействия», «картина Дирака» и «смешанное представление». Предполагается, что при последующем пересмотре терминологии должен быть оставлен один из этих терминов. Как исключение к одному из терминов дано сокращение в виде аббревиатуры (№ 84). Нерекомендуемые термины (также 2-я колонка) выделены знаком *Нрк.*

В третьей колонке даны определения понятий. Разумеется, определение, в противоположность термину, не может претендовать на его постоянное использование в буквальной форме. В зависимости от характера изложения формулировка определения может изменяться, однако при этом не должны нарушаться границы понятия.

Некоторые определения снабжены примечаниями, которые имеют характер пояснений или указывают на возможность построения и применения соответствующих терминов.

В качестве справочных сведений приведены термины на английском, немецком и французском языках, которые являются эквивалентами русских терминов, соответствующих определенным понятиям. Однако здесь следует иметь в виду, что приводимые иностранные синонимы не являются абсолютными, поскольку терминология в области квантовой механики не является окончательно упорядоченной в научной литературе на этих языках.

¹ См.: Лотте Д. С. Основы построения научно-технической терминологии. М.: Изд-во АН СССР, 1961; Краткое научно-методическое пособие по разработке и упорядочению научно-технической терминологии. М.: Наука, 1979.

ТЕРМИНОЛОГИЯ

I. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

1 Квантование

- E* Quantization
- D* Quantisierung.
- Quantelung*
- F* Quantification

Построение квантовомеханического описания физической системы, отвечающего данному классическому, состоящее в том, что динамическим переменным системы сопоставляются операторы в некотором пространстве состояний, подчиняющиеся определенным коммутационным соотношениям.

2 Каноническое квантование

- E* Canonical quantization
- D* Kanonische Quantelung. Quanti-¹
- sierung*
- F* Quantification canonique

Квантование, отвечающее каноническому (гамильтонову) формализму классического описания, при котором для обобщенной координаты x и сопряженного ей импульса p коммутационное соотношение имеет вид

$$[p, x] = -i\hbar,$$

а все остальные коммутаторы координат и импульсов равны нулю.

3 Пространство состояний

- E* Space of states
- D* Zustandsraum
- F* Espace d'états

Гильбертово пространство, в котором любое состояние данной квантовой системы может быть представлено либо вектором, либо матрицей плотности.

Примечания. 1. Состояние, описываемое вектором, называется «чистым состоянием»; соответствующий вектор называется «вектором состояния» (векторы, отличающиеся ненулевым постоянным комплексным множителем, описывают одно и то же состояние).

2. Состояние, описываемое матрицей плотности, называется «смешанным состоянием»; частный случай смешанного состояния, когда матрица плотности вырождается в проекционный оператор на некоторый вектор, отвечает чистому состоянию.

4 Матрица плотности

- E* Density matrix
- D* Dichtematrixe
- F* Matrice de densité

Положительно определенный самосопряженный оператор ρ , удовлетворяющий условию

$$Sp\rho^2 \leq Sp\rho = 1.$$

Примечание. Среднее значение любой наблюдаемой a определяется формулой

$$\bar{a} = Sp\rho a.$$

5 Наблюдаемая

- E* Observable
- D* Beobachtbare
- F* Observable

Принципиально наблюдаемая физическая величина (координата, импульс, энергия, угловой момент, спин и т. д.), которой в пространстве состояний сопоставляется некоторый самосопряженный оператор (оператор этой наблюдаемой).

6 Спектр наблюдаемой

- E* Spectrum of observable
- D* Spektrum der Beobachtbaren
- F* Spectre d'observable

Множество значений наблюдаемой, которыми может обладать данная физическая система, совпадающее со спектром соответствующего оператора наблюдаемой.

Примечание. Состояние, в котором некоторая наблюдаемая имеет строго определенное значение, называется «собственным состоянием наблюдаемой»; оно описывается соответствующим собственным вектором оператора этой наблюдаемой.

7 Полный набор наблюдаемых

- E* Complete set of observables
- D* Vollständiger Satz der Beobachtbaren
- F* Complet d'observables

Максимальный набор независимых физических величин, исчерпывающе характеризующий состояние системы, когда операторы соответствующих наблюдаемых коммутируют и их совместный спектр не вырожден.

- 8 **Квантовые числа**
E Quantum numbers
D Quantenzahlen
F Nombres quantiques
- 9 **Представление**
E Representation
D Darstellung
F Représentation
- 10 **Волновая функция**
E Wave function
D Wellenfunktion
F Fonction d'onde
- 11 **Принцип суперпозиции**
E Principle of superposition
D Superpositionsprinzip
F Principe de superposition
- 12 **Дополнительность**
E Complementarity
D Komplementarität
F Complémentarité
- 13 **Принцип соответствия**
E Correspondence principle
D Korrespondenzprinzip
F Principe de correspondance
- 14 **Четность**
E Parity
D Parität
F Parité
- 15 **Спин частицы**
E Spin
D Spin
F Spin
- 16 **Гамильтониан**
E Hamiltonian
D Hamiltonian
F Hamiltonien
- 17 **Стационарное состояние**
E Stationary state
D Stationärer Zustand
F Etat stationnaire
- Числа, через которые выражаются возможные значения наблюдаемых.
- Примечание. Термин «квантовые числа» употребляется преимущественно по отношению к дискретному спектру наблюдаемых.
- Реализация пространства состояний, как пространства функций на спектре некоторого полного набора наблюдаемых.
- Примечания. 1. Если пространство состояний понимается как абстрактное гильбертово пространство, то представление есть выбор в качестве базиса собственных векторов некоторого полного набора наблюдаемых и описание векторов состояния через координаты в этом базисе.
2. Представление именуется по названию соответствующего полного набора наблюдаемых: координатное представление, импульсное представление и т. д.
3. Операторы наблюдаемых из полного набора в своем представлении диагональны, т. е. действуют как операторы умножения.
- Вектор состояния в определенном представлении (например, $\Psi(x)$ — в координатном представлении, $\Psi(p) = \int e^{ipx} \Psi(x) dx$ — в импульсном).
- Принцип, состоящий в том, что если некоторые два состояния квантовой системы описываются в пространстве состояний соответственно векторами Ψ_1 и Ψ_2 , то вектор $\Psi = \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2$, где λ_1, λ_2 — произвольные комплексные числа, $|\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 \neq 0$, также описывает некоторое возможное состояние той же системы.
- Возможность полного описания квантовой системы посредством различных взаимоисключающих полных наборов наблюдаемых, например, в координатном или импульсном представлении.
- Принцип, состоящий в том, что в пределе больших квантовых чисел наблюдаемые должны переходить в соответствующие классические величины, а квантовые уравнения движения — в классические уравнения; формально этот переход отвечает пределу $\hbar = 0$.
- Наблюдаемая, не имеющая классического аналога и определяющая изменение вектора состояния квантовой системы при инверсии пространственных координат.
- Угловой момент покоящейся частицы.
- Примечание. Термин применяется также к атомным ядрам, рассматриваемым как целое.
- Оператор полной энергии квантовой системы.
- Состояние квантовой системы, описываемое собственным вектором гамильтониана, не зависящего от времени.

- 18 **Основное состояние**
E Ground state
D Grundzustand
E Etat fondamental
- 19 **Возбужденное состояние**
E Excited state
D Angeregter Zustand
F Etat excité
- 20 **Энергетический уровень**
E Energy level
D Energieniveau
F Niveau d'énergie
- 21 **Вырождение уровня**
E Degeneracy of a level. Level degeneration
D Entartung von Energieniveau. Energieniveau-entartung
F Dégénération de niveau d'énergie
- 22 **Случайное вырождение**
E Accidental degeneracy
D Zufällige Entartung
F Dégénération accidentale
- 23 **Снятие вырождения**
E Splitting
D Zerspaltung
F Désagrégation
- 25 **Представление Шрёдингера**
 Картина Шрёдингера
E Schrödinger representation
D Schrödinger-Bild
F Représentation de Schrödinger
- 25 **Представление Гейзенберга**
 Картина Гейзенберга
E Heisenberg representation
D Heisenberg-Bild
F Représentation de Heisenberg
- 26 **Представление взаимодействия**
 Картина взаимодействия; картина Дирака; смешанное представление
- Состояние квантовой системы, отвечающее наименьшему значению энергии.
- Любое состояние квантовой системы, отличное от основного.
- Возможное значение полной энергии консервативной квантовой системы. Иначе: Собственное значение гамильтониана, не зависящего от времени.
- Ситуация, когда данному энергетическому уровню отвечает несколько различных состояний.
- Вырождение уровня энергии системы, не обусловленное ее симметрией в трехмерном координатном пространстве.
- Расщепление вырожденного энергетического уровня под влиянием возмущения.
- Описание временной эволюции квантовой системы, при котором операторы любых наблюдаемых не зависят от времени; зависимость от времени вектора состояния определяется уравнением Шрёдингера.
- Описание временной эволюции квантовой системы в пространстве состояний, при котором вектор состояния не зависит от времени, а зависимость от времени операторов наблюдаемых определяется уравнением Гейзенберга.
- Описание временной эволюции квантовой системы, при котором зависимость от времени операторов наблюдаемых определяется гамильтонианом взаимодействующих частей системы, а зависимость от времени вектора состояния определяется гамильтонианом взаимодействия этих частей.

E Interaction representation. Interaction picture.
 Dirac picture
D Wechselwirkungsdarstellung. Wechselwirkungsbild.
 Dirac-Bild
F Représentation d'interaction. Représentation intermédiaire

- 27 **Правила отбора**
E Selection rules
D Auswahlregeln
F Règles de sélection

- 28 **Перестановка частиц**
E Permutation of particles
D Permutation der Teilchen
F Permutation des particules

- 29 **Бозоны**
E Bosons
D Bosonen
F Bosons

- 30 **Фермионы**
E Fermions
D Fermionen
F Fermions

- 31 **Вторичное квантование**
 Представление вторичного квантования; представление чисел заполнения
E Second quantization
D Zweite Quantelung.
F Quantification seconde

Правила, определяющие возможность квантовых переходов между определенными состояниями квантовой системы под влиянием данного возмущения в рассматриваемом приближении и указывающие те матричные элементы, которые равны нулю.

Переход к другой нумерации тождественных частиц, входящих в данную систему, и соответствующее преобразование вектора состояния системы.

Частицы, для которых состояние квантовой системы, содержащей несколько тождественных частиц данного типа, описывается вектором состояния (матрицей плотности), симметричным (т. е. неизменным) относительно любых перестановок этих частиц.

Примечания. 1. Известны бозоны разных типов: фотоны, π -мезоны, α -частицы и т. д.

2. Все бозоны имеют целый спин; этот факт доказывает в релятивистской квантовой теории поля, исходя из общих принципов.

3. Система бозонов данного типа подчиняется статистике Бозе—Эйнштейна; в данном квантовом состоянии может находиться произвольное число частиц.

Частицы, для которых состояние системы, содержащей несколько тождественных частиц данного типа, описывается вектором состояния (матрицей плотности), антисимметричным (т. е. меняющим знак) относительно перестановки любой пары этих частиц.

Примечания. 1. Известны фермионы разных типов: электроны, нуклоны и т. д.

2. Все фермионы имеют полуцелый спин, этот факт доказывается в релятивистской квантовой теории поля, исходя из общих принципов.

3. Система фермионов данного типа подчиняется статистике Ферми—Дирака; в данном квантовом состоянии может находиться не более одной частицы.

Реализация гильбертова пространства состояний системы многих частиц как пространства функций от числа частиц с заданными квантовыми числами.

Примечания. 1. В этом представлении диагональными являются операторы числа частиц с заданными квантовыми числами.

2. Формально оно сводится к замене одночастичной волновой функции (например, в x - или p -представлении) на операторы рождения и уничтожения частиц в состоянии, описываемом этой волновой функцией; операторы рождения и уничтожения (для бозонов и фермионов) подчиняются соответственно бозевским или фермиевским соотношениям коммутации.

- 32 **Вероятность перехода**
E Transition probability
D Übergangswahrscheinlichkeit
F Probabilité de transition
- 33 **Потенциальный барьер**
E Potential barrier
D Potentialbarriere
F Barrière de potentiel
- 34 **Туннельный эффект**
E Tunnelling
D Tunneleffekt
F Effet de tunnel
- 35 **Квазистационарное состояние**
E Quasi-stationary state
D Quasistationärer Zustand
F Etat quasi stationnaire
- 36 **Интеграл перекрытия**
E Overlap integral
D Überlappungsintegral
F Intégrale de recouvrement

Вероятность обнаружения квантовой системы в некотором определенном квантовом состоянии в результате эволюции системы, если первоначально система находилась в некотором другом определенном состоянии.

Потенциал в некоторой области конфигурационного пространства, делающий эту область недоступной, согласно классическому описанию, для данной системы (частицы) при заданной энергии.

Эффект проникновения квантовой системы (частицы) через область потенциального барьера, разделяющего две классически доступные области.

Состояние, не являющееся стационарным, но проявляющее свойства стационарного состояния в течение достаточно малых промежутков времени.

Скалярное произведение двух векторов пространства состояний.

Примечание. В квантовой механике молекул применяется термин «интеграл перекрывания».

II. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА АТОМА

- 37 **Электронная оболочка**
E Electron(ic) shell
D Elektronenhülle
F Enveloppe d'électrons
- 38 **Электронный слой**
E Electron(ic) layer
D Elektronenschicht
F Couche d'électrons
- 39 **Заполненная оболочка**
 Замкнутая оболочка
E Occupied electron shell
D Gefüllte Elektronenschicht
F Couche comblé
- 40 **Атомный остаток**
 Атомный остов
E Atomic core
D Atomrest
F Reste d'atome

Совокупность одноэлектронных состояний в атоме, имеющих определенные значения квантовых чисел n и l и возникающих при описании атома в приближении самосогласованного поля.

Совокупность одноэлектронных оболочек, имеющих определенное значение квантового числа n .

Электронная оболочка, в которой все состояния заняты.

Часть атома, остающаяся при исключении электронов, находящихся на внешних оболочках.

- | | |
|---|--|
| <p>41 Эквивалентные электроны</p> | Атомные электроны, находящиеся на одной электронной оболочке. |
| <p>42 Электронная конфигурация атома
 <i>E</i> Electron configuration
 <i>D</i> Elektronkonfiguration
 <i>F</i> Configuration des électrons</p> | Распределение атомных электронов по электронным оболочкам. |
| <p>43 Атомный форм-фактор
 <i>E</i> Atomic form-factor
 <i>D</i> Atomformfaktor
 <i>F</i> Facteur de forme atomique</p> | Фурье-образ пространственной плотности атомных электронов. |
| <p>44 Спин атома</p> | Суммарный спин всех атомных электронов. |
| <p>45 Полный угловой момент атома
 <i>E</i> Total angular momentum
 <i>D</i> Totaler Atomdrehungsmoment
 <i>F</i> Moment angulaire totale</p> | Угловой момент атома, складывающийся из орбитального момента атома и его спина. |
| <p>46 Статистическая модель атома
 Модель Томаса—Ферми
 <i>E</i> Statistical model of an atom
 <i>D</i> Statistische Atommodell
 <i>F</i> Modèle d'atome statistique</p> | Модель атома, в которой атомные электроны рассматриваются как вырожденный электронный газ. |
| <p>47 Мультиплет
 <i>E</i> Multiplet
 <i>D</i> Multiplet
 <i>F</i> Multiplet</p> | Совокупность уровней энергии электронных состояний атома с данными значениями орбитального момента L и спина S , различающихся значениями полного момента J , допустимыми при данных L и S . |
| <p>48 Мультиплетность
 <i>E</i> Multiplicity
 <i>D</i> Multiplizität
 <i>F</i> Multiplicité</p> | Число $2S + 1$, совпадающее при $L \geq S$ с числом компонент данного мультиплета. |
| <p>49 Зеемановское расщепление уровня
 <i>E</i> Zeeman splitting of anatomic level
 <i>D</i> Zeeman Atomniveauezerspaltung
 <i>F</i> Désagrégation Zeeman d'un niveau</p> | Снятие вырождения атомного уровня энергии, вызываемое внешним магнитным полем. |
| <p>50 Штарковское расщепление
 <i>E</i> Stark splitting
 <i>D</i> Stark Zerspaltung
 <i>F</i> Désagrégation Stark</p> | Снятие вырождения атомного уровня энергии, вызываемое внешним электрическим полем. |

- 51 **Тонкая структура**
E Fine structure
D Feinstruktur
F Structure fine
- 52 **Сверхтонкая структура**
E Hyperfine structure
D Hyperfeinstruktur
F Structure hyperfine
- 53 **Изотопическое смещение**
E Isotopic shift
D Isotopenverschiebung
F Déplacement isotopique
- 54 **Лэмбовский сдвиг**
E Lamb shift
D Lamb Verschiebung
F Déplacement Lamb
- 55 **Спин-орбитальное взаимодействие**
E Spin-orbit interaction
D Spinbahnwechselwirkung
F Interaction spin-orbite
- 56 **Спин-спиновое взаимодействие**
E Spin-spin interaction
D Spin-spin-wechselwirkung
F Interaction spin-spin
- 57 ***LS*-связь**
Связь Рассела—Саундерса
E *LS* coupling
D *LS*-Verbindung
F Lien *LS*
- 58 ***JJ*-связь**
E *JJ* coupling
D *JJ*-Verbindung
F Lien *JJ*
- 59 **Энергия ионизации атома**
E Atomic ionization energy
D Atomionizations-énergie
F Énergie d'ionization d'un atome
- Снятие вырождения атомного уровня энергии, обусловленное релятивистскими эффектами, расщепляющегося на ряд уровней с различными значениями полного момента J , возможными при данных L и S .
- Снятие вырождения атомного уровня энергии, обусловленное взаимодействием атомных электронов с магнитным моментом атомного ядра.
- Относительное смещение атомных уровней энергии в атомах нескольких различных изотопов, обусловленное различием ядер атома.
- Смещение атомного уровня энергии, обусловленное взаимодействием атомных электронов с электромагнитным и электрон-позитронным вакуумом.
- Взаимодействие спина частицы с полем, обусловленным ее орбитальным движением.
- Взаимодействие между спинами частиц системы.
- Схема построения волновых функций атомных состояний, основанная на представлении, что орбитальные моменты атомных электронов складываются в орбитальный момент атома L , а их спиновые моменты — в спин атома S , которые и взаимодействуют между собой.
- Схема построения волновых функций атомных состояний, где состояния отдельных атомных электронов характеризуются полными угловыми моментами j , которые затем складываются в полный угловой момент атома J .
- Минимальная энергия, необходимая для удаления одного электрона из нейтрального атома.

60 **Энергия связи электрона**
E Binding energy of an électron
D Verbindungsenergie eines Elektrons
F Énergie de liaison d'un électron

Минимальная энергия, необходимая для удаления из атома электрона, находящегося в данном состоянии.

61 **Оже-переход**
E Auger transition
D Auger-Übergang
F Transition Auger

Безызлучательный переход, при котором энергия, освобождающаяся при внутриатомном переходе одного электрона, расходуется на вырывание из атома другого электрона.

62 **Дырка**
E Hole
D Loch
F Lacune

Незанятое состояние в электронной оболочке атома или молекулы.

III. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ

63 **Адиабатическое возмущение**
E Adiabatic perturbation
D Adiabatische Störung
F Perturbation adiabatique

Изменение гамильтониана, происходящее за время, большое по сравнению с характерным временем изменения волновой функции исходного состояния.

64 **Внезапное возмущение**
E Sudden perturbation
D Plötzliche Störung
F Perturbation brusque

Изменение гамильтониана, происходящее за время, малое по сравнению с характерным временем изменения волновой функции исходного состояния.

Примечание. Внезапное возмущение иногда называют «встряхиванием».

65 **Отталкивание уровней энергии**
Правило непересечения
E Repulsion of energy levels
D Abstoßung der Energieniveaus
F Répulsion des niveaux énergétique

Невозможность совпадения уровней энергии двух состояний одинаковой симметрии для системы с гамильтонианом, зависящим от параметра, при изменении этого параметра.

66 **Хорошее квантовое число**
E Good quantum number
D Gute Quantenzahl
F Bon nombre quantique

Квантовое число, позволяющее характеризовать волновую функцию данного приближения, если поправки следующего приближения к ней, пропорциональные волновым функциям с другими значениями этого квантового числа, численно малы.

67 **Квазиклассическое приближение**
E Semiclassical approximation
D Quasiklassische Näherung
F Approximation quasiclassique

Метод нахождения волновых функций и уровней энергии путем разложения их по степеням отношения длин де-бройлевских волн частиц к характерным размерам системы.

- 68 **Классическая точка поворота**
E Classical turning point
D Klassischer Umkehrpunkt
F Point limite
- 69 **Клетка фазового пространства**
 Ячейка фазового пространства
E Phase space cell
D Phasenraumzelle
F Cellule de l'espace des phase
- 70 **Адиабатическое приближение**
 Приближение Борна—Оппенгеймера
E Adiabatic approximation
D Adiabatische Näherung
F Approximation adiabatique
- 71 **Метод самосогласованного поля**
E Self-consistent method
D Self-consistent-field-Methode
F Méthode de champ self-consistent
- Точка, разделяющая классически доступную и классически недоступную области одномерного движения системы.
- Часть фазового пространства системы, имеющая объем, равный $(2\pi\hbar)^{\nu}$, где \hbar — постоянная Планка, а ν — число степеней свободы системы.
- Примечание. В квазиклассическом случае на одну клетку фазового пространства приходится одно квантовое состояние.
- Метод расчета систем, состоящих из частиц большой и малой масс, в котором рассматривается движение частиц малой массы в поле заданной конфигурации тяжелых частиц (большой массы).
- Метод расчета многочастичной системы, в котором взаимодействие каждой частицы системы с остальными учитывается в виде потенциальной энергии, получающейся усреднением взаимодействия по состояниям остальных частиц.
- Примечание. Если усреднение взаимодействия производится с волновой функцией, являющейся произведением волновых функций частиц системы, то метод называется «методом Хартри»; если усреднение взаимодействия производится с волновой функцией, являющейся антисимметризованной комбинацией произведений волновых функций частиц системы, то метод называется «методом Хартри—Фока».

IV. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА МОЛЕКУЛ

- 72 **Молекулярный остов**
E Molecular core
D Molekülrumpf
F Squelette moléculaire
- 73 **Спин-орбиталь**
E Spin-orbital
D Spin-Orbital
F Spin-orbitale
- 74 **Орбиталь**
E Orbital
D Orbital
F Orbitale
- 75 **Молекулярная орбиталь**
E Molecular orbital
D Molekülorbital
F Orbitale moléculaire
- Система из фиксированных ядер и распределенных в пространстве с заданной плотностью электронов, создающая эффективный потенциал, в котором движутся выделенные электроны молекулы.
- Функция пространственных и спиновых переменных одного электрона, имеющая смысл волновой функции отдельного электрона в поле эффективности атомного или молекулярного остова.
- Функция пространственных переменных одного электрона, имеющая смысл волновой функции отдельного электрона в поле эффективного атомного или молекулярного остова.
- Орбиталь, являющаяся решением модельного одно-электронного уравнения Шрёдингера для электрона в поле молекулярного остова.

- 76 **Связывающая орбиталь**
E Binding orbital
D Bindende Orbital
F Orbitale liante
- 77 **Разрыхляющая орбиталь**
E Antibinding orbital
D Antibindende Orbital
F Orbitale antiliante
- 78 **Гибридная орбиталь**
E Hybrid orbital
D Hybridorbital
F Orbitale hybridée
- 79 **Гауссова орбиталь**
E Gaussian orbital
D Gauss-Orbital
F Orbitale gaussienne
- 80 **Слейтеровская орбиталь**
E Slater orbital
D Slater-Orbital
F Orbitale de Slater
- 81 **Молекулярный интеграл**
E Molecular integral
D Molekülintegral
F Intégrale moléculaire
- 82 **Кулоновский молекулярный интеграл**
E Coulomb integral
D Coulomb-Integral
F Intégrale coulombienne
- 83 **Обменный молекулярный интеграл**
E Exchange integral
D Austauschintegral
F Intégrale d'échange
- Молекулярная орбиталь, для которой энергия соответствующего одноэлектронного состояния при переходе к системе разъединенных атомов (или фрагментов молекулы) повышается.
- Молекулярная орбиталь, для которой энергия соответствующего одноэлектронного состояния при переходе к системе разъединенных атомов (или фрагментов молекулы) понижается.
- Линейная комбинация атомных орбиталей с одним и тем же главным квантовым числом, учитывающая симметрию поля других атомов молекулы или кристалла.
- Одноцентровая орбиталь вида
- $$x^k y^l z^m e^{-\xi r^2},$$
- где k , l и m — неотрицательные числа; ξ — параметр.
 Примечание. Гауссова орбиталь используется при расчетах молекул в качестве базисной функции для построения молекулярных орбиталей.
- Одноцентровая орбиталь вида
- $$r^n e^{-\xi r} Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$
- где $Y_{l,m}$ — сферические функции.
 Примечание. Слейтеровская орбиталь используется в качестве базисной функции при расчетах атомов и молекул.
- Матричный элемент одного из слагаемых электронного гамильтониана молекулы в базисе молекулярных или атомных орбиталей.
- Примечание. Молекулярные интегралы подразделяются на одноэлектронные (для оператора кинетической энергии электрона и для потенциала взаимодействия электрона с ядрами) и на двухэлектронные (для оператора межэлектронного взаимодействия).
- Двухэлектронный молекулярный интеграл вида
- $$\int r_{1,2}^{-1} \varphi_i^2(1) \varphi_j^2(2) d\tau_1 d\tau_2,$$
- где φ_i и φ_j — молекулярные орбитали.
 Примечание. В методе валентных схем под кулоновским молекулярным интегралом понимается диагональный матричный элемент эффективного одноэлектронного молекулярного гамильтониана в базисе атомных орбиталей.
- Двухэлектронный молекулярный интеграл вида
- $$\int r_{1,2}^{-1} \varphi_i(1) \varphi_j(1) \varphi_i(2) \varphi_j(2) d\tau_1, 2,$$
- где φ_i и φ_j — атомные или молекулярные орбитали.
 Примечание. В методе валентных схем под обменным молекулярным интегралом понимается недиагональный матричный элемент эффективного двухэлектронного гамильтониана в базисе атомных орбиталей.

- 84 **Приближение молекулярных орбиталей в форме линейной комбинации атомных орбиталей**
 MO ЛКАО
E MO LCAO approximation
D MO LCAO Näherung
F Approximation MO LCAO
- 85 **Потенциальная поверхность**
Hрк Электронный терм
E Potential (energy) surface
D Potentialfläche
F Surface de potentiel
- 86 **Энергия диссоциации**
E Dissociation energy
D Dissoziationsenergie
F Energie de dissociation
- 87 **Электронный терм**
E Electronic term
D Elektronenterm
F Term électronique
- 88 **Преддиссоциация**
E Predissociation
D Prädissoziation
F Prédissociation
- 89 **Вибронное взаимодействие**
E Vibronic interaction
D Vibronische Wechselwirkung
F Interaction vibronique
- 90 **Ровибронное взаимодействие**
E Rovibronic interaction
D Rovibronische Wechselwirkung
F Interaction rovibronique
- 91 **Поле лигандов**
E Ligand field
D Ligandenfeld
F Champ coordina-teur
- 92 **Контактное взаимодействие**
E Fermi contact term
D Fermi Kontaktwechselwirkung
F Terme de contact de Fermi
- Приближение, в котором молекулярная орбиталь представляется в виде линейной комбинации атомных орбиталей, центрированных на отдельных ядрах молекулы.
- Собственное значение электронного гамильтониана молекулы в адиабатическом приближении как функция межядерных расстояний.
- Минимальная энергия, необходимая для диссоциации молекул по данному каналу.
- Примечание. Энергия диссоциации, отсчитываемая от минимума потенциальной поверхности данного состояния, обозначается D_e , а от низшего колебательного уровня — D_0 .
- Разность энергий равновесных конфигураций молекулы в возбужденном и основном состояниях.
- Безызлучательный электронный переход возбужденной молекулы из связанного в несвязанное состояние.
- Взаимодействие электронного движения с колебательным движением ядер.
- Взаимодействие электронного движения с колебательным и вращательным движениями ядер.
- Поле атомов или молекул, которые находятся в ближайшем окружении рассматриваемого центра, как правило, атома или иона металла в кристалле или комплексном соединении.
- Сферически-симметричная часть сверхтонкого взаимодействия электронного и ядерного магнитных моментов.

- 93 **Ядерное спин-спиновое взаимодействие**
E Nuclear spin-spin interaction
D Spin-Spin-Wechselwirkung
F Interaction spin-spin nucléaire
- 94 **Лямбда-удвоение**
E Lambda-doubling (Λ -doubling)
D Λ -Verdopplung
F Dédoublement Λ
- 95 **Переходный комплекс**
 Переходное состояние
E Transition complex.
 Transition state
D Übergangszustand
F État de transition
- 96 **Автоионизация**
E Autoionization
D Selbstionisierung
F Autoionisation
- 97 **Ассоциативная ионизация**
E Associative ionization
D Assoziationsionisierung
F Ionisation associative
- 98 **Электронная конфигурация**
E Configuration
D Elektronenkonfiguration
F Configuration électronique
- 99 **Представление конфигурационного взаимодействия**
 Конфигурационное взаимодействие
E Configuration interaction
D Konfigurationswechselwirkung
F Interaction de configuration
- 100 **Метод молекулярных орбиталей**
E Molecular orbital theory
D Molekülorbitalmethode
 MO Methode
F Méthode des orbitals moléculaires
- Взаимодействие ядерных магнитных моментов, как непосредственное, так и обусловленное их взаимодействием с электронной оболочкой молекулы.
- Расщепление электронных терминов линейной молекулы в результате ровибронного и спин-орбитального взаимодействий.
- Состояние молекулы, отвечающее седловой точке электронного термина.
- Спонтанный переход в многоэлектронной системе, сопровождающийся отрывом от нее электрона.
- Вылет электрона при рекомбинации двух атомов или молекул.
- Распределение электронов по атомным или молекулярным орбиталям; определяется указанием занятых орбиталей и соответствующих им чисел заполнения.
- Представление волновой функции многоэлектронной системы в виде линейной комбинации функций, отвечающих определенным электронным конфигурациям.
- Метод расчета электронных состояний молекул, в которых многоэлектронная волновая функция составляется из произведений молекулярных орбиталей и соответствует определенной конфигурации.

- 101 **Метод валентных схем**
 Метод валентных связей
E Valence bond theory
D Valenzbindungs-Methode
F Méthode des liaisons de valence
- 102 **Нулевое дифференциальное перекрытие**
E Zero differential overlap
D Null-differentiale Überlappung
F Recouvrement différentiel nul

Метод расчета приближенной волновой функции, отвечающей заданной электронной конфигурации, на основе специальной схемы идеального спаривания, используемой для конструирования спиновой части этой функции.

Метод построения приближенной волновой функции молекулы, согласно которому базисные функции, выбранные в форме атомных орбиталей, удовлетворяют соотношению $\chi^*_\alpha(\vec{r})\chi_\beta(\vec{r}) = 0$, если индексы $\alpha \neq \beta$ относятся к функциям, центрированным на различных ядрах.

V. СТОЛКНОВЕНИЯ, РАССЕЯНИЕ

И ЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ

- 103 **Канал реакции**
E Reaction channel
D Reaktionskanal
F Canal de réaction
- 104 **Открытый канал реакции**
E Open reaction channel
D Offener Reaktionskanal
F Canal de réaction ouvert
- 105 **Порог канала реакции**
E Reaction channel threshold
D Reaktionskanal-schwelle
F Seuil du canal de réaction
- 106 **Многоканальное рассеяние**
 Многоканальная реакция
E Multi-channel scattering
D Mehrkanalstreuung
F Diffusion à plusieurs canals
- 107 **Виртуальное состояние**
E Virtual state
D Virtualzustand
F État virtuel
- 108 **Полное сечение канала реакции**
 Полное эффективное сечение

Одно из возможных конечных состояний системы, различающихся видом, числом или возбуждением частиц (при заданном составе начальных частиц).

Канал реакции, вероятность перехода в который не равна нулю.

Наименьшее значение энергии системы, при котором данный канал реакции открыт.

Рассеяние с более чем одним открытым каналом реакции.

Состояние квантовой системы, используемое в качестве одного из промежуточных при рассмотрении реакции методами теории возмущений.

Примечание. Виртуальное состояние может отличаться от начального и конечного энергией или числом частиц.

Отношение вероятности перехода системы в единицу времени в открытый канал реакции к плотности потока падающих частиц.

- E* Total cross section of a reaction channel
D Reaktionskanal-querschnitt
F Section efficace total du canal de réaction
- 109 **Дифференциальное сечение канала реакции**
E Differential cross section of a reaction channel
D Reaktionskanaldifferentialquerschnitt
F Section efficace différentiel du canal de réaction
- 110 **Упругое рассеяние**
 Канал упругого рассеяния
E Elastic scattering
D Elastische Streuung
F Diffusion élastique
- 111 **Парциальная волна**
E Partial wave
D Partialwelle
F Onde partiel
- 112 **Фаза рассеяния**
 Фазовый сдвиг
E Phase shift
D Streuungsphase
F Déphasage de diffusion
- 113 **Фазовый анализ**
E Phase shift analysis
D Streuungsphasen-analyse
F Analyse de déphasage
- 114 **Матрица рассеяния**
S-матрица
E Scattering matrix
D Streuungsmatrize
F Matrice le diffusion
- 115 **Матрица амплитуд переходов**
 Матрица амплитуд;
- Отношение вероятности перехода системы в единицу времени в элемент фазового пространства открытого канала реакции к плотности потока падающих частиц.
 Примечания. 1. Для N -частиц в конечном состоянии телесный угол канала имеет размерность $3N - 4$.
 2. Полное сечение есть интеграл от дифференциального по полному телесному углу.
- Канал реакции, в котором вид, внутреннее состояние и число частиц совпадают с исходными.
- Волновая функция несвязанного состояния относительно движения частицы с определенным значением энергии, углового момента и четности.
- Изменение фазы парциальной волны в результате упругого рассеяния.
 Примечание. Если происходит только упругое рассеяние, фазы действительны; в случае многоканального рассеяния фазы имеют положительную мнимую часть.
- Определение фаз рассеяния по экспериментальным данным.
- Унитарный оператор, действие которого на асимптотически удаленную расходящуюся часть волны начального состояния, нормированной на единичный поток, дает асимптотически удаленные расходящиеся волны всех возможных каналов реакции.
 Примечание. Если парциальные волны нормированы на единичный поток, то диагональные элементы S -матрицы равны $\exp(2i\delta_e)$, где δ_e являются фазами рассеяния.
- Матрица, с помощью которой дифференциальное сечение перехода в канал b из начального состояния a находится в виде

M-матрица
E Transition amplitudes matrix
D Übergangsamplitudenmatrize
F Matrice des amplitudes des transitions

$$d\delta_{ab} = |M_{ab}|^2 d\Omega_b,$$

где $d\Omega_b$ — элемент телесного угла канала b .

Пр и м е ч а н и е. Для перехода системы двух частиц в две частицы элементы матрицы амплитуд переходов получаются из элементов S -матрицы по формуле

$$M_{ab} = (S_{ab} - \delta_{ab}) / 2i \sqrt{k_a k_b},$$

где δ_{ab} — элементы единичной матрицы, а $k_a k_b$ — волновые числа начального и конечного состояний.

116 **Амплитуда упругого рассеяния**

E Elastic scattering amplitude
D Amplitude der elastischen Streuung
F Amplitude de diffusion élastique

Элементы матрицы амплитуд для канала упругого рассеяния.

Пр и м е ч а н и е. Аналогично определяется „амплитуда рассеяния”.

117 **Парциальная амплитуда**

E Partial amplitude
D Partialamplitude
F Amplitude partial

Амплитуда рассеяния для определенной парциальной волны.

118 **Парциальная ширина канала**

E Partial channel width
D Reaktionskanalbreite
F Largeur du canal le réaction

Произведение постоянной Планка на отнесенную к единице времени вероятность перехода системы в данный канал.

119 **Полная ширина уровня**

E Total level width
D Gesamtniveaubreite
F Largeur du canal totale

Сумма всех парциальных ширин каналов реакции распада данного уровня.

120 **Азимутальная асимметрия рассеяния**

E Azimutal scattering asymmetry
D Azimutalstreuungssymmetrie
F Asymétrie azimutale de diffusion

Отношение разности сечений рассеяния влево и вправо на одинаковые углы в одной плоскости к сумме тех же сечений.

121 **Борновское приближение**

E Born approximation
D Born Annäherung
F Approximation de Born

Приближение для элементов матрицы амплитуд переходов, в котором они малы и представляются матричными элементами возмущения относительно невозмущенных функций.

122 **Длина рассеяния**

E Scattering length
D Streuunglänge
F Longueur de diffusion

Постоянная a , определяющая свободный член в формуле для фазы рассеяния δ при малых волновых числах k :

$$k \cot \delta = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} k^2 r_0.$$

Пр и м е ч а н и е. Постоянная r_0 , входящая во второе слагаемое, называется эффективным радиусом взаимодействия.

- 123 **Фазовое пространство канала реакции**
Компактное фазовое пространство
E Phase space of the scattering channel
D Phasenraum des Streuungskanals
F Espace de phase du canal de réaction
- 124 **Детальное равновесие**
E Detailed balance
D Detailgleichgewicht
F Balance détaillé
- 125 **Фазовый объем**
E Phase volume
D Phasenraumumfang
F Volume d'espace de phase
- 126 **Диаграмма Далица**
E Dalitz plot
D Dalitz Diagramme
F Diagramme Dalitz
- 127 **Поляризация пучка**
E Beam polarization
D Bündelpolarization
F Polarisation du faisceau
- 128 **Выстроенность пучка**
E Alignment
- Подпространство, выделяемое в пространстве всех импульсов частиц конечного состояния канала реакции условиями сохранения энергии и импульса в реакции.
- Равенство сечений, деленных на элементы фазовых пространств конечных состояний, для прямой и обратной реакции при определенной поляризации частиц.
- Объем фазового пространства конечного состояния канала реакции.
- Область фазового пространства трех частиц, остающаяся после факторизации его по области изменения углов Эйлера.
- Псевдовектор, равный среднему спиновому моменту частиц пучка, отнесенному к модулю его максимально возможного значения.
Примечание. Аналогично определяется «поляризация мишени».
- Тензор, равный среднему квадрупольному моменту частиц пучка, отнесенному к максимальному значению модуля одного из диагональных элементов.
Примечание. Аналогично определяется «выстроенность мишени».

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ РУССКИХ ТЕРМИНОВ

Основные рекомендуемые термины даны полужирным шрифтом; параллельные, нерекомендуемые и термины, приведенные в примечаниях,— светлым шрифтом.

Числа обозначают номера терминов.

Номера нерекомендуемых терминов заключены в скобки.

Номера терминов, приведенных в примечаниях, отмечены звездочкой.

Термины, имеющие в своем составе несколько слов, расположены по алфавиту своих главных слов (имен существительных в именительном падеже). В этом случае запятая, стоящая после какого-либо слова в термине, указывает на то, что при применении данного термина (в соответствии с написанием, принятым в данном сборнике) слова, стоящие после запятой, должны предшествовать словам, находящимся до запятой. Например, термин «набор наблюдаемых, полный» следует читать «полный набор наблюдаемых» (7); термин «момент атома, полный угловой» следует читать «полный угловой момент атома» (45).

А		Ж	
Автоионизация	96	<i>jj-связь</i>	58
Амплитуда, парциальная	117	И	
Амплитуда упругого рассеяния	116	Интеграл, кулоновский молекуляр-	
Анализ, фазовый	113	ный	82
Асимметрия рассеяния, азимуталь-		Интерграл, молекулярный	81
ная	120	Интеграл, обменный молекуляр-	
Б		ный	83
Барьер, потенциальный	33	Интеграл перекрывания	36*
Бозоны	29	Интеграл перекрытия	36
В		Ионизация, ассоциативная	97
Вектор состояния	3*	К	
Вероятность перехода	32	Канал реакции	103
Возмущение, адиабатическое	63	Канал реакции, открытый	104
Возмущение, внезапное	64	Канал упругого рассеяния	110
Волна, парциальная	111	Картина взаимодействия	26
Взаимодействие, вибронное	89	Картина Гейзенберга	25
Взаимодействие, контактное	92	Картина Дирака	26
Взаимодействие, конфигурацион-		Картина Шрёдингера	24
ное	99	Квантование	1
Взаимодействие, ровибронное	90	Квантование, вторичное	31
Взаимодействие, спин-орбитальное	55	Квантование, каноническое	2
Взаимодействие, спин-спиновое	56	Клетка фазового пространства	69
Взаимодействие, ядерное спин-спи-		Комплекс, переходный	95
новое	93	Конфигурация атома, электронная	42
Вырождение, случайное	22	Конфигурация, электронная	98
Вырождение уровня	21	Л	
Выстроенность мишени	128*	<i>LS-связь</i>	57
Выстроенность пучка	128	Лямбда-удвоение	94
Г		М	
Гамильтониан	16	Матрица амплитуд	115
Д		Матрица амплитуд переходов	115
Диаграмма Далицца	126	Матрица плотности	4
Длина рассеяния	122	Матрица рассеяния	114
Дополнительность	12	Метод валентных связей	101
Дырка	62	Метод валентных схем	101

Метод молекулярных орбиталей	100	Приближение, квазиклассическое	67
Метод самосогласованного поля	71	Приближение молекулярных орби- талей в форме линейной ком- бинации атомных орбиталей	84
Метод Хартри	71*	Принцип соответствия	13
Метод Хартри-Фока	71*	Принцип суперпозиции	11
М-матрица	115	Пространство канала реакции, фа- зовое	123
Модель атома, статистическая	46	Пространство, компактное фазовое	123
Модель Томаса—Ферми	46	Пространство состояний	3
МО ЛКАО	84		
Момент атома, полный угловой	45		
Мультиплет	47		
Мультиплетность	48		

Н

Наблюдаемая	5
Набор наблюдаемых, полный	7

О

Оболочка, замкнутая	39
Оболочка, заполненная	39
Оболочка, электронная	37
Объем, фазовый	125
Оже-переход	61
Орбиталь	74
Орбиталь, гауссова	79
Орбиталь, гибридная	78
Орбиталь, молекулярная	75
Орбиталь, разрыхляющая	77
Орбиталь, связывающая	76
Орбиталь, слейтеровская	80
Остаток, атомный	40
Остов, атомный	40
Остов, молекулярный	72
Отталкивание уровней энергии	65

П

Перекрытие, нулевое дифферен- циальное	102
Перестановка частиц	28
Поверхность, потенциальная	85
Поле лигандов	91
Поляризация мишени	127*
Поляризация пучка	127
Порог канала реакции	105
Правила отбора	27
Правило непересечения	65
Преддиссоциация	88
Представление	9
Представление взаимодействия	26
Представление вторичного кван- тования	31
Представление Гейзенберга	25
Представление, импульсное	9*
Представление конфигурационно- го взаимодействия	99
Представление, координатное	9*
Представление, смешанное	26
Представление чисел заполнения	31
Представление Шрёдингера	24
Приближение, адиабатическое	70
Приближение Борна—Оппенгей- мера	70
Приближение, борновское	121

Р

Равновесие, детальное	124
Рассеяние, многоканальное	106
Рассеяние, упругое	110
Реакция, многоканальная	106
Расщепление уровня	49
Расщепление, Штарковское	50

С

Связь Рассела—Саундерса	57
Сдвиг, лэмбовский	54
Сдвиг, фазовый	112
Сечение канала, дифференциаль- ное	109
Сечение канала реакции, полное	108
Сечение, полное эффективное	108
Слой, электронный	38
Смещение, изотопическое	53
Снятие вырождения	23
Состояние, виртуальное	107
Состояние, возбужденное	19
Состояние, квазистационарное	35
Состояние наблюдаемой собствен- ное	6*
Состояние, основное	18
Состояние, переходное	95
Состояние, смешанное	3*
Состояние, стационарное	17
Состояние, чистое	3*
Спектр наблюдаемой	6
Спин атома	44
Спин-орбиталь	73
Спин частицы	15
Структура, сверхтонкая	52
Структура, тонкая	51
S-матрица	114

Т

Терм, электронный	(85)
Терм, электронный	87
Точка поворота, классическая	68

У

Уровень, энергетический	20
-----------------------------------	----

Ф

Фаза рассеяния	112
Фермионы	30
Форм-фактор, атомный	43
Функция, волновая	10

Ч

Четность	14
Числа, квантовые	8
Число, хорошее квантовое	66

Ш

Ширина канала, парциальная	118
Ширина уровня, полная	119

Э

Электроны, эквивалентные	41
Энергия диссоциации	86
Энергия ионизации атома	59
Энергия связи электрона	60
Эффект, туннельный	34

Я

Ячейка фазового пространства	69
--	----

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ АНГЛИЙСКИХ ТЕРМИНОВ

A		G	
Accidental degeneracy	22	Gaussian orbital	79
Adiabatic approximation	70	Good quantum number	66
Adiabatic perturbation	63	Ground state	18
Alignement	128	H	
Antibinding orbital	77	Hamiltonian	16
Associative ionization	97	Heisenberg representation	25
Atomic core	40	Hole	62
Atomic form-factor	43	Hybrid orbital	78
Atomic ionization energy	59	Hyperfine structure	52
Auger transition	61	I	
Autoionization	96	Interaction picture	26
Azimuthal scattering asymmetry	120	Interaction representation	26
B		Isotopic shift	53
Beam polarization	127	J	
Binding energy of an electron	60	<i>JJ</i> coupling	58
Binding orbital	77	L	
Born approximation	121	Lambda-doubling (Λ -doubling)	94
Bosons	29	Lamb shift	54
C		Level degeneration	21
Canonical quantization	2	Ligand field	91
Classical turning point	68	<i>LS</i> coupling	57
Complementarity	12	M	
Complete set of observables	7	MO LCAO approximation	84
Configuration	98	Molecular core	72
Configuration interaction	99	Molecular integral	81
Correspondence principle	13	Molecular orbital	75
Coulomb integral	82	Molecular orbital theory	100
D		Multiplet	47
Dalitz plot	126	Multi-channel scattering	106
Degeneracy of a level	21	Multiplicity	48
Density matrix	4	N	
Detailed balance	124	Nuclear spin-spin interaction	93
Differential cross section of a reaction channel	109	O	
Dirac picture	26	Observable	5
Dissociation energy	86	Occupied electron shell	39
E		Open reaction channel	104
Elastic scattering	110	Orbital	74
Elastic scattering amplitude	116	Overlap integral	36
Electron configuration	42	Q	
Electron(ic) layer	38	Quantization	1
Electron(ic) shell	37	Quantum numbers	8
Electronic term	87	Quasi-stationary state	35
Energy level	20	P	
Exchange integral	83	Parity	14
Exited state	19	Partial amplitude	117
F		Partial channel width	118
Fermi contact term	92		
Fermions	30		
Fine structure	51		

Partial wave	111	Spin-orbital	73
Permutation of particles	28	Spin-orbit interaction	55
Phase shift	112	Spin-spin interaction	56
Phase shift analysis	113	Splitting	23
Phase space cell	69	Stark splitting	50
Phase space of the scattering channel	123	Stationary state	17
Phase volume	125	Statistical model of an atom	46
Potential barrier	33	Sudden perturbation	64
Potential (energy) surface	85		
Predissociation	88	T	
Principle of superposition	11	Total angular momentum	45
		Total cross section of a reaction channel	108
R		Total level width	119
Reaction channel	103	Transition amplitudes matrix	115
Reaction channel threshold	105	Transition complex	95
Representation	9	Transition probability	32
Repulsion of energy levels	65	Transition state	95
Rovibronic interaction	90	Tunnelling	34
S		V	
Scattering length	122	Valence bond theory	101
Scattering matrix	114	Vibronic interaction	89
Schrödinger representation	24	Virtual state	107
Second quantization	31		
Selection rules	27	W	
Self-consistent method	71	Wave function	10
Semiclassical approximation	67		
Slater orbital	80	Z	
Space of states	3	Zeeman splitting of an atomic level	49
Spectrum of observable	6	Zero differential overlap	102
Spin	15		

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ НЕМЕЦКИХ ТЕРМИНОВ

A

Abstoßung der Energieniveaus	65
Adiabatische Näherung	70
Adiabatische Störung	63
Amplitude der elastischen Streuung	116
Angeregter Zustand	19
Antibindende Orbital	77
Assoziationsionisierung	97
Atomformfaktor	43
Atomionizationsenergie	59
Atomrest	40
Auger Übergang	61
Austauschintegral	83
Auswahlregeln	27
Azimalstreuungsasymmetrie	120

B

Beobachtbare	5
Bindende Orbital	76
Born Annäherung	121
Bosonen	29
Bündelpolarization	127

C

Coulomb-Integral	82
----------------------------	----

D

Dalitz Diagramme	126
Darstellung	9
Detalgleichgewicht	124
Dichtematrix	4
Dirac-Bild	26
Dissoziationsenergie	86

E

Elastische Streuung	110
Elektronenhülle	37
Elektronenkonfiguration	98
Elektronenschicht	38
Electronterm	87
Elektronkonfiguration	42
Energieniveau	20
Energieniveauentartung	21
Entartung von Energieniveau	21

F

Feinstruktur	51
Fermi-Kontaktwechselwirkung	92
Fermionen	30

I

Isotopenverschiebung	53
--------------------------------	----

J

<i>JJ</i> -Verbindung	58
---------------------------------	----

H

Hamiltonian	16
Heisenberg-Bild	25
Hybridorbital	78
Hyperfeinstruktur	52

G

Gauss-Orbital	79
Gefüllte Elektronenschicht	39
Gesamtniveaubreite	119
Grundzustand	18
Gute Quantenzahl	66

K

Kanonische Quantelung	2
Klassischer Umkehrpunkt	68
Komplementarität	12
Konfigurationswechselwirkung	99
Korrespondenzprinzip	13

L

Lamb Verschiebung	54
Ligandenfeld	91
Loch	62
LS-Verbindung	57
Λ -Verdopplung	94

M

Mehrkanalstreuung	106
MO LCAO Näherung	84
Molekülintegral	81
Molekülorbital	75
Molekülorbitalmethode	100
Molekülrumpf	72
MO Methode	100
Multiplet	47
Multiplicität	48

N

Null-differential Überlappung	102
---	-----

O

Orbital	74
Offener Reaktionskanal	104

P

Parität	14
Partialamplitude	117
Permutation der Teilchen	28
Phasenraum des Streuungskanaals	123
Phasenraumumfang	125
Phasenraumzelle	69
Plötzliche Störung	64
Prädissoziation	88
Partialwelle	111
Potentialbarriere	33

Potentialfläche	85	Streuungsphase	112
Q		Streuungsphasenanalyse	113
Quantelung	1	Superpositionsprinzip	11
Quantenzahlen	8	T	
Quantisierung	1,2	Totaler Atomdrehungsmoment	45
Quasiklassische Näherung	67	Tunneleffekt	34
Quasistationärer Zustand	35	U	
R		Übergangswahrscheinlichkeit	32
Reaktionskanaldifferentialquer-		Übergangsamplitudenmatrize	115
schnitt	109	Übergangszustand	95
Reaktionskanal	103	Überlappungsintegral	36
Reaktionskanalbreite	118	V	
Reaktionskanalquerschnitt	108	Valenzbindungs-Methode	101
Reaktionskanalschwelle	105	Verbindungsenergie eines Elek-	
Rovibronische Wechselwirkung	90	trons	60
S		Vibronische Wechselwirkung	89
Schrödinger-Bild	24	Virtualzustand	107
Selbstionisierung	96	Vollständiger Satz der Beobacht-	
Self-consistent-field-Methode	71	baren	7
Slater-Orbital	80	W	
Spektrum der Beobachtbaren	6	Wechselwirkungsbild	26
Spin	15	Wechselwirkungsdarstellung	26
Spinbahnwechselwirkung	55	Wellenfunktion	10
Spin-Orbital	73	Z	
Spin-Spin-Wechselwirkung	56, 93	Zeeman Atomniveauezerspaltung	49
Stark Zerspaltung	50	Zerspaltung	23
Stationärer Zustand	17	Zufällige Entartung	22
Statistische Atommodell	46	Zustandsraum	3
Streuungslänge	122	Zweite Quantelung	31
Streuungsmatrix	114		

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ФРАНЦУЗСКИХ ТЕРМИНОВ

A

Amplitude de diffusion élastique	116
Amplitude partial	117
Analyse de déphasage	113
Approximation adiabatique	70
Approximation de Born	121
Approximation MO LCAO	84
Approximation quasiclassique	67
Asymétrie azimutale de diffusion	120
Autoionisation	96

B

Balance détaillé	124
Barrière de potentiel	33
Bon nombre quantique	66
Bosons	29

C

Canal de réaction	103
Canal de réaction ouvert	104
Cellule de l'espace des phases	69
Champ coordinateur	91
Complémentarité	12
Complet d'observables	7
Configuration des électrons	42
Configuration électronique	98
Couche d'électrons	38
Couche comblé	39

D

Dédoublément Λ	94
Dégénération de niveau d'énergie	21
Déphasage de diffusion	112
Déplacement isotopique	53
Déplacement Lamb	54
Désagrégation	23
Désagrégation Stark	50
Désagrégation Zeeman d'un niveau	49
Diagramme Dalitz	126
Diffusion à plusieurs canaux	106
Diffusion élastique	110
Dégénération axidental	22

E

Effet de tunnel	34
Energie de dissociation	86
Energie de liaison d'un électron	60
Energie d'ionization d'un atome	59
Enveloppe d'électrons	37
Espace de phases du canal de réaction	123
Espace d'états	3
Etat de transition	95
Etat excité	19
Etat fondamental	18
Etat quasi stationnaire	35
Etat stationnaire	17

Etat virtuel	107
--------------	-----

F

Facteur de forme atomique	43
Fermions	30
Fonction d'onde	10

H

Hamiltonien	16
-------------	----

I

Intégrale coulombienne	82
Intégrale d'échange	83
Intégrale de recouvrement	36
Interaction de configuration	99
Interaction rovibronique	90
Interaction spin-orbite	55
Interaction spin-spin	56
Interaction spin-spin nucléaire	93
Interaction vibronique	89
Ionisation associative	97

L

Lacune	62
Largeur du canal de réaction	118
Largeur du canal total	119
Lien JJ	58
Lein LS	57
Longueur du diffusion	122

M

Matrice de diffusion	114
Matrice de densité	4
Matrice des amplitudes des transitions	115
Méthode de champ self-consistent	71
Méthode de liaisons de valence	101
Méthode des orbitales moléculaires	100
Modèle d'atome statistique	46
Moment angulaire totale	45
Multiplet	47
Multiplicité	48

N

Niveau d'énergie	20
Nombres quantique	8

O

Observable	5
Onde partiel	111
Orbitale	74
Orbitale antiliante	77
Orbitale de Slater	80
Orbitale gaussienne	79

Orbitale hybridée	78	Représentation intermédiaire	26
Orbitale liante	76	Recouvrement différentiel nul	102
Orbitale moléculaire	75	Répulsion des niveaux énergétique	65
		Reste d'atome	40
P		S	
Parité	14	Section efficace différentiel du canal de réaction	109
Permutation des particules	28	Section efficace total du canal de réaction	108
Perturbation adiabatique	63	Spin	15
Perturbation brusque	64	Seuil du canal de réaction	105
Point limite	68	Spectre d'observable	6
Polarisation du faisceau	127	Spin-orbitale	73
Prédissociation	88	Squelette moléculaire	72
Principe de correspondance	13	Structure hyperfine	52
Principe de superposition	11	Structure fine	51
Probabilité de transition	32	Surface de potentiel	85
Q		T	
Quantification	1	Terme électronique	87
Quantification canonique	2	Terme de contact de Fermi	92
Quantification seconde	31	Transition Auger	61
R		V	
Règles de sélection	27	Volume d'espace de phase	125
Représentation	9		
Représentation de Heisenberg	25		
Représentation de Schrödinger	24		
Représentation d'interaction	26		

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
Терминология	6
I. Основные понятия	6
II. Квантовая механика атома	10
III. Приближенные методы	13
IV. Квантовая механика молекул	14
V. Столкновения, рассеяние и ядерные реакции	18
Алфавитный указатель русских терминов	22
Алфавитный указатель английских терминов	25
Алфавитный указатель немецких терминов	27
Алфавитный указатель французских терминов	29

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Терминология

СБОРНИК РЕКОМЕНДУЕМЫХ ТЕРМИНОВ

ВЫПУСК 104

Утверждено к печати

Комитетом

научно-технической терминологии АН СССР

Редактор издательства *Л.В. Кудрявцева*

Технический редактор *И.И. Джисоева*

Корректор *Л.А. Агеева*

Фотонабор выполнен во 2-й типографии
издательства "Наука"

ИБ № 31050

Подписано к печати 13.07.85. Формат 60 × 90 1/16

Бумага для глубокой печати

Гарнитура литературная. Печать офсетная

Усл.печ.л. 2,0. Усл.кр.-отт. 2,1. Уч.-изд.л. 2,2

Тираж 5700 экз. Тип. зак. 781

Цена 10 коп.

Ордена Трудового Красного Знамени

издательство "Наука" 117864 ГСП-7

Москва В-485, Профсоюзная ул., д. 90

Ордена Трудового Красного Знамени

1-я типография издательства "Наука"

199034, Ленинград В-34, 9-я линия, 12

10 коп.