Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кафедра комп'ютерної фізики

"ЗАТВЕРДЖУЮ"

Директор навчально-наукового інституту комп'ютерної фізики та енергетики

Ірина ГАРЯЧЕВСЬКА

"28" серпня 2024 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

КВАНТОВА МЕХАНІКА. ЧАСТИНА 1

рівень вищої освіти	перший (бакалаврський)
галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
освітня програма	«Комп'ютерна фізика» «Прикладна фізика енергетичних систем» «Прикладна фізика нетрадиційної енергетики»
вид дисципліни	обов'язкова

навчально – науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики

2024 / 2025 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою навчально-наукового інституту комп'ютерної фізики та енергетики

28 серпня 2024 року, протокол № 8/24

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:
Немченко Костянтин Едуардович, професор кафедри комп'ютерної фізики, д.ф.-м.н., професор

Програму схвалено на засіданні кафедри комп'ютерної фізики

Протокол від 28 серпня 2024 року № 8/24

Завідувач кафедри комп'ютерної фізики

_____ Костянтин НЄМЧЕНКО

Програму погоджено з гарантом освітньо – професійної програми комп'ютерна фізика

Гарант освітньо-професійної програми комп'ютерна фізика

_____ Світлана РОГОВА

Програму погоджено з гарантом освітньо – професійної програми прикладна фізика енергетичних систем

Гарант освітньо-професійної програми прикладна фізика енергетичних систем

_____ Денис ПРОТЕКТОР

Програму погоджено з гарантом освітньо – професійної програми прикладна фізика нетрадиційної енергетики

_____ Ілля МАРУЩЕНКО

Програму погоджено методичною комісією навчально-наукового інституту комп`ютерної фізики та енергетики

Протокол від 28 серпня 2024 року № 8/24

Голова методичної комісії Навчально-наукового інституту комп'ютерної фізики та енергетики

_____ Денис ПРОТЕКТОР

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Квантова механіка» складена відповідно до освітньо-професійних програм підготовки «Комп'ютерна фізика», «Прикладна фізика енергетичних систем», «Прикладна фізика нетрадиційної енергетики» першого (бакалаврського) рівня вищої освіти

спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Підготовка фахівців зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали до розуміння основ нерелятивістської квантової механіки, формування наукового підходу до вирішення задач, виникаючих при розгляді фізичних явищ на основі квантової теорії, необхідних для розвитку фізичних та енергетичних технологій на об`єктах енергетики.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

Забезпечити формування у студентів знань основних фактів і методів нерелятивістського наближення квантової механіки, отримання навиків застосування наукових знань на практиці при аналізуванні та вирішенні фізичних задач, які виникають при вирішенні фізичних проблем мікроскопіки.

Загальні компетентності (ЗК)

1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності. (ЗК-2)
2. Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово. (ЗК-3)
3. Здатність спілкуватися іноземною мовою. (ЗК-4)
4. Здатність до проведення досліджень на відповідному рівні. (ЗК-6)
5. Навички міжособистісної взаємодії. (ЗК-8)
6. Здатність використовувати теоретичні та практичні знання про широкий спектр обчислювальних методів та математичних алгоритмів, включаючи принципи розробки та узагальнення цих методів та алгоритмів(ЗК-15)
7. Розуміння обмеження чисельних методів, включаючи помилки наближення, помилки округлення та обмеження щодо застосування конкретних алгоритмів(ЗК-17)
8. Оволодіння великої кількості вдосконалених алгоритмів для вирішення широкого кола проблем та способи використання їх у доступному програмному забезпеченні. (ЗК-19)

Спеціальні компетентності (СК)

1. Здатність брати участь у виготовленні експериментальних зразків, інших об'єктів дослідження. (СК-3)
2. Здатність до постійного розвитку компетентностей у сфері прикладної фізики, інженерії та комп'ютерних технологій. (СК-5)
3. Вміння підвищувати ефективність чисельних алгоритмів та відповідного програмного забезпечення. (СК-10)
4. Здатність до розробки гіпотез та запропонування способів їх перевірки за допомогою відповідних аналітичних, експериментальних та чисельних інструментів. (СК-12)

1.3. Кількість кредитів 5

1.4. Загальна кількість годин 150 год.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни

Обов'язкова	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
4-й	-й
Семестр	
7-й	-й
Лекції	
32 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
32 год.	год.
Лабораторні заняття	
0 год.	год.
Самостійна робота	
86 год.	год.
у тому числі індивідуальні завдання	
0 год.	

1.6. Заплановані результати навчання

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен:

Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики.

Зокрема**, знати**: основні поняття, визначення, закони та факти квантової механіки − хвильова функція, хвилі де-Бройля, стан квантової системи, довжина хвилі, рівняння Шредінгера, квантування моменту, спін та інш. Борнівська теорія збурень. Бра та кет-вектори, Гільбертів та Банахів простір станів. Квантова Кеплерова задача. Тунельний ефект.

Вміти: розв'язувати складні задачі та практичні проблеми прикладної фізики та наноматеріалів, що передбачає застосування теорій та методів фізики, математики та інженерії й характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

Зокрема, **вміти** застосувати отримані знання на практиці при описі фізичних мікроскопічних явищ при надмалих та великих енергіях; вміти розв'язувати типові задачі з находження зв'язаних станів, коефіцієнтів проходження частинок при розсіюванні на потенціалі, обчислювати терми атомів.

Програмні результати навчання за освітньою програмою:

РН01. Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики.

РН02. Застосовувати сучасні математичні методи для побудови й аналізу математичних моделей фізичних процесів.

РН07. Класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики.

РН15. Вміння представляти і захищати отримані наукові і практичні результати в усній та письмовій формі

РН16. Базові знання у сфері штучного інтелекту, нейронних мереж та великих даних та вміння застосовувати ці знання фізичних дослідженнях

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Основні поняття та загальна теорія.

Тема 1. Вступ.

Місце квантової механіки в сучасній фізичній науці. Основні експериментальні факти, що лежать в основі квантової механіки. Хвилі де-Бройля.

Тема 2. Хвильова функція.

Принципи побудови та постулати квантової механіки. Поняття хвильової функції. Оператори фізичних величин. Принцип суперпозиції.

Тема 3. Оператори величин.

Оператори координати і імпульсу, рівняння на власні значення і власні функції, розкладання, координатне та імпульсне представлення хвильової функції.

Тема 4. Матриці операторів.

Матриці операторів. Унітарні перетворення базису. Одночасна вимірність фізичних величин. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга.

Тема 5. Рівняння Шредінгера.

Часове рівняння Шредінгера. Загальне рішення рівняння Шредінгера у випадку стаціонарного гамільтоніана. Стаціонарні стани. Щільність потоку ймовірності.

Тема 6. Залежність від часу.

Залежність середніх від часу. Інтеграли руху. Закони збереження та симетрії. Збереження парності.

Тема 7. Загальні властивості станів.

Загальні властивості стаціонарних станів одновимірного руху для дискретного спектра. Квантування енергії в потенціальній ямі. Осцілляційна теорема.

Тема 8. Прямокутна потенційна яма.

Нескінченно глибока прямокутна потенціальна яма. Спектр, стаціонарні стани, розкладання по власних функціях гамільтоніана, середні.

Розділ 2. Конкретні фізичні системи.

Тема 9. Осцилятор.

Гармонійний осцилятор. Рівні енергії і хвильові функції. Нульова енергія. Оператори народження та знищення.

Тема 10. Тунельний ефект.

Загальні властивості стаціонарних станів одновимірного руху в разі безперервного спектру. Проходження потенційних бар'єрів. Тунельний ефект.

Тема 11. Приклади.

Приклади: теорія альфа-розпаду ядра за Гамовим та холодна емісія електронів з поверхні металу.

Тема 12. Момент імпульсу.

Момент імпульсу: оператори, комутаційні співвідношення, рішення рівнянь на власні значення. Матриці операторів моменту.

Тема 13. Спін частинки.

Поняття про спін частинки. Спінорна хвильова функція. Коммутатори.

Тема 14. Задача двох тіл.

Задача двох тіл. Рух в центральному полі. Загальні властивості руху в центральному полі. Виродження по проекції і випадкове виродження. Рівняння для радіальної хвильової функції. Класифікація стаціонарних станів дискретного спектра в центральному полі.

Тема 15. Водородоподібний атом.

Водородоподібний атом. Рівні енергії і хвильові функції. Кратність виродження. Сферичний осцилятор. Рішення рівняння Шредінгера в декартових і сферичних координатах.

Тема 16. Квазікласичне наближення.

Квазікласичне наближення. Рішення рівняння Шредінгера та зшивання квазікласичних рішень. Правило квантування Бора-Зомерфельда. Квазікласичний коефіцієнт проходження крізь бар’єр.

3. Структура навчальної дисципліни

	Кількість годин

Назви розділів і тем	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Основні поняття та загальна теорія												
Тема 1. Вступ.	8	2	2			4						
Тема 2. Хвильова функція.	8	2	2			4						
Тема 3. Оператори величин.	8	2	2			4						
Тема 4. Матриці операторів	8	2	2			4						
Тема 5. Рівняння Шредінгера.	8	2	2			4						
Тема 6. Залежність від часу.	10	2	2			6						
Тема 7. Загальні властивості станів.	10	2	2			6						
Тема 8. Прямокутна потенційна яма.	10	2	2			6						
Разом за розділом 1	70	16	16			38						
Розділ 2. Конкретні фізичні системи												
Тема 9. Осцилятор.	10	2	2			6						
Тема 10. Тунельний ефект.	10	2	2			6						
Тема 11. Приклади.	10	2	2			6						
Тема 12. Момент імпульсу.	10	2	2			6						
Тема 13. Спін частинки.	10	2	2			6						
Тема 14. Задача двох тіл.	10	2	2			6						
Тема 15. Водородоподібний атом.	10	2	2			6						
Тема 16. Квазікласичне наближення.	10	2	2			6						
Разом за розділом 2	80	16	16			48						
Усього годин	150	32	32			86						

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Вступ.	2
2	Хвильова функція.	2
3	Оператори величин.	2
4	Матриці операторів	2

5	Рівняння Шредінгера.	2
6	Залежність від часу.	2
7	Загальні властивості станів.	2
8	Прямокутна потенційна яма.	2
9	Осцилятор.	2
10	Тунельний ефект.	2
11	Приклади.	2
12	Момент імпульсу.	2
13	Спін частинки.	2
14	Задача двох тіл.	2
15	Водородоподібний атом.	2
16	Квазікласичне наближення.	2
	Разом	32

5. Завдання для самостійної робота

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Ознайомитись з основними принципами квантової механіки	4
2	Розв’язати задачі за темою «Хвильова функція»	4
3	Розв’язати задачі за темою «Оператори величин».	4
4	Розв’язати задачі за темою «Матриці операторів»	4
5	Розв’язати задачі за темою «Рівняння Шредінгера».	4
6	Розв’язати задачі за темою «Залежність від часу».	6
7	Розв’язати задачі за темою «Загальні властивості станів».	6
8	Розв’язати задачі за темою «Прямокутна потенційна яма».	6
9	Розв’язати задачі за темою «Осцилятор».	6
10	Розв’язати задачі за темою «Тунельний ефект».	6
11	Розв’язати задачі за темою «Приклади задач для тунельного ефекти»	6
12	Розв’язати задачі за темою «Момент імпульсу».	6
13	Розв’язати задачі за темою «Спін частинки».	6
14	Розв’язати задачі за темою «Задача двох тіл».	6
15	Розв’язати задачі за темою «Водородоподібний атом»	6
16	Розв’язати задачі за темою «Квазікласичне наближення.»	6
	Разом	56

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено

7. Методи навчання

При викладанні дисципліни використовуються такі методи навчання

1. проблемні методи навчання з застосуванням
   - розв’язання проблемних задач
   - навчальних дискусій
   - активізації самостійного вивчення студентами літератури
2. метод проблемного викладання з постановкою проблеми на початку нової теми
3. Дослідницький метод при самостійному вирішенні студентами завдань контрольних робіт

8. Методи контролю

Сумарна кількість балів, яку студент отримує по закінчені вивчення дисципліни

складається з кількості балів, отриманих по кожному з двох розділів та кількості балів, отриманих на підсумковому семестровому контролі – екзамені.

При оцінюванні кожного розділу враховуються робота студента на практичних заняттях (максимум 7 балів), самостійна робота (максимум 3 бали), та правильність виконання завдань письмової контрольної роботи по закінченні кожного розділу (максимум 20 балів). Таким чином за кожний з двох розділів студент може отримати максимум 30 балів. Максимальна кількість балів за екзамен складає 40.

Система рейтингових балів та критерії оцінювання в кожному з двох розділів:

1. Експрес-контроль (ваговий бал – 3) проводиться тричі в кожному розділі у формі усного опитування з метою перевірки якості самостійної роботи студента і освоєння лекційного матеріалу. Тривалість експрес-контролю 5-10 хвилин. Кожен експрес-контроль включає запитання, за правильну відповідь на яке студент отримує 1 бал. Відсутність студента на занятті або невиконання експрес-контролю приносить студенту 0 балів.
2. Контроль на практичних заняттях (ваговий бал – 7) проводиться з метою перевірки якості роботи студента на практичних заняттях в аудиторії. Студент отримує задачу, яку зобов'язаний розв'язати у дошки перед загальною аудиторією.

   Критерії оцінювання:
   - Повністю самостійно та правильно розв'язана задача оцінюється в 7 балів;
   - Задача, при розв'язанні якої правильно обрана логіка, але присутні незначні грубі помилки в розрахунках, які виправив викладач, оцінюється в 6 балів;
   - Задача, при розв'язанні якої правильно обрана логіка, але розрахунки виконані за допомогою викладача, оцінюється в 5 балів;
   - Задача, при розв'язанні якої присутні незначні помилки в логіці розв'язанні, які виправив викладач, при правильних розрахунках оцінюється в 4 бали;
   - Задача, при розв'язанні якої присутні незначні помилки в логіці розв'язанні, які виправив викладач, при помилках в розрахунках оцінюється в 3 бали;
   - Задача, при розв'язанні якої присутні суттєві помилки в логіці розв'язання, які виправив викладач, оцінюється в 2 бали;
   - Задача, при розв'язанні якої всю логіку розв'язання викладач наводить замість студента, оцінюється в 1 бал;
   - Повна нездатність розв'язати задачу навіть з допомогою викладача оцінюється в 0 балів.

   Якщо інший студент, що знаходиться в аудиторії розв'язує задачу самостійно, скоріше ніж хід розв'язання викладається на дошці, то він також отримує оцінку згідно з критеріями, що зазначені вище.
3. Модульний контроль (ваговий бал –- 20) проводиться у вигляді модульної контрольної роботи (МКР) тривалістю 2 академічні години. Кожна з МКР складається з чотирьох задач, кожна з яких оцінюється в 5 балів.

   Критерії оцінювання:
   - Повністю правильно розв'язана задача оцінюється в 5 балів;
   - Задача, при розв'язанні якої правильно обрана логіка, але присутні незначні грубі помилки в розрахунках, оцінюється в 4 балів;
   - Задача, при розв'язанні якої правильно обрана логіка, але присутні грубі помилки в розрахунках, оцінюється в 3 бали;
   - Задача, при розв'язанні якої присутні незначні помилки в логіці розв'язання оцінюється в 2 бали;
   - Задача, при розв'язанні якої присутні суттєві помилки в логіці розв'язання оцінюється в 1 бал;
   - Повністю неправильно виконане завдання, або відсутність студента на МКР оцінюється в 0 балів.

Якщо студент отримав оцінку менше 5 балів за МКР, то він може переписати цю роботу, але не більше двох разів.

Екзаменаційна робота (ваговий бал - 40). Необхідною умовою допуску студента до екзамену з дисципліни є позитивний рейтинг з усіх форм семестрової атестації, але не менше 10 балів.

Екзаменаційний білет містить одне теоретичне питання і одну задачу.

Критерії оцінювання відповіді на теоретичне питання:

- Повністю розкрите теоретичне питання оцінюються в 20 балів
- Якщо питання висвітлювалося в повному об'ємі, але з незначними помилками – 16 балів.
- Якщо питання висвітлювалося в повному об'ємі, але з істотними помилками – 12 балів.
- Часткова відповідь на питання – 8 бали,
- Часткова відповідь на питання при наявності помилок – 4 бали,
- Відсутність відповіді – 0 балів.

Критерії оцінювання розв'язання екзаменаційної задачі:

- Повністю правильно розв'язана задача оцінюється в 20 балів;
- Задача, при розв'язанні якої правильно обрана логіка, але присутні незначні грубі помилки в розрахунках, оцінюється в 16 балів;
- Задача, при розв'язанні якої правильно обрана логіка, але присутні грубі помилки в розрахунках, оцінюється в 12 балів;
- Задача, при розв'язанні якої присутні незначні помилки в логіці розв'язання оцінюється в 8 бали;
- Задача, при розв'язанні якої присутні суттєві помилки в логіці розв'язання оцінюється в 4 бали;

Повністю неправильно виконане завдання оцінюється в 0 балів.

9. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завадання	
назва теми	кількість балів
Розділ 1	
Т1	3
Т2	3
Т3	4
Т4	4
Т5	4
Т6	4
Т7	4
Т8	4
Усього	30
Розділ 2	
Т9	3
Т10	3
Т11	3
Т12	3
Т13	3
Т14	3
Т15	3
Т16	3

Контрольна робота	6
Усього	30
Іспит	40
Сума	100

Критерії оцінювання навчальних досягнень

Нарахування балів при поточному контролі.

1(2) бал – робота в аудиторії
2 бали – виконання самостійної роботи

Критерії оцінювання відповідей на контрольній роботі

Теоретичні питання (3 балів)
Коректність викладок, визначень – 1 бал
Правильність відповіді – 1 бал
Відсутність помилок в розрахунках – 1 бал
Розв'язання задачі (3 балів)
Коректність викладок, визначень – 1 бал
Правильність відповіді – 1 бал
Відсутність помилок в розрахунках – 1 бал

Критерії оцінювання відповідей на підсумковій роботі

Питання 1 – теоретичне питання (5 балів)
Відсутність помилок в теоретичній частині – 2 бали
Коректність викладок – 1 бал
Послідовність викладок – 1 бал
Логічність викладок – 1 бал
Питання 2 дослідницька задача. (15 балів)
Наявність відповіді – 1 бал
Коректність викладок – 2 бали
Логічність викладок – 1 бал
Коректність визначень – 1 бал
Повнота відповіді – 1 бал
Правильність відповіді – 2 бали
Наявність графічного відображення – 2 бали
Знання цілей задачі – 1 бал
Відсутність помилок в розрахунках – 2 бали
Відсутність помилок в теоретичній частині – 2 бали
Питання 3 – дослідницька (15 балів)
Наявність відповіді – 1 бал
Коректність викладок – 2 бали
Логічність викладок – 1 бал
Коректність визначень – 1 бал
Повнота відповіді – 1 бал
Правильність відповіді – 2 бали
Наявність графічного відображення – 2 бали

Знання цілей задачі – 1 бал
Відсутність помилок в розрахунках – 2 бали
Відсутність помилок в теоретичній частині – 2 бали

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

10. Рекомендована література

Основна література

1. Eckert, Michael (2006). The Dawn of Fluid Dynamics: A Discipline Between Science and Technology. Wiley. p. ix. ISBN 3-527-40513-5.
2. Anderson, J. D. (2007). Fundamentals of Aerodynamics (4th ed.). London: McGraw–Hill. ISBN 978-0-07-125408-3.
3. Nangia, Nishant; Johansen, Hans; Patankar, Neelesh A.; Bhalla, Amneet Pal S. (2017). "A moving control volume approach to computing hydrodynamic forces and torques on immersed bodies". Journal of Computational Physics. 347: 437–462. arXiv:1704.00239. Bibcode:2017JCoPh.347..437N. doi:10.1016/j.jcp.2017.06.047. S2CID 37560541.
4. White, F. M. (1974). Viscous Fluid Flow. New York: McGraw–Hill. ISBN 0-07-069710-8.
5. Wilson, DI (February 2018). "What is Rheology?". Eye. 32 (2): 179–183. doi:10.1038/eye.2017.267. PMC 5811736. PMID 29271417.
6. Platzer, B. (2006-12-01). "Book Review: Cebeci, T. and Cousteix, J., Modeling and Computation of Boundary-Layer Flows". ZAMM. 86 (12): 981–982. Bibcode:2006ZaMM...86..981P. doi:10.1002/zamm.200690053. ISSN 0044-2267.
7. Shengtai Li, Hui Li "Parallel AMR Code for Compressible MHD or HD Equations" (Los Alamos National Laboratory) [1] Archived 2016-03-03 at the Wayback Machine
8. "Transient state or unsteady state? -- CFD Online Discussion Forums". www.cfd-online.com.
9. Pope, Stephen B. (2000). Turbulent Flows. Cambridge University Press. ISBN 0-521-59886-9.
10. See, for example, Schlatter et al, Phys. Fluids 21, 051702 (2009); doi:10.1063/1.3139294
11. Landau, Lev Davidovich; Lifshitz, Evgenii Mikhailovich (1987). Fluid Mechanics. London: Pergamon. ISBN 0-08-033933-6.
12. Ortiz de Zarate, Jose M.; Sengers, Jan V. (2006). Hydrodynamic Fluctuations in Fluids and Fluid Mixtures. Amsterdam: Elsevier.
13. Landau, Lev Davidovich; Lifshitz, Evgenii Mikhailovich (1959). Fluid Mechanics. London: Pergamon.

11. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. Інтернет.
2. Бібліотеки ХНУ ім. Каразіна та ІПМаш НАН України