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 2023 р.

РОБОЧА ПРОГРАММА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

КВАНТОВА МЕХАНІКА

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

2023 / 2024 навчальний рік

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

28 серпня 2023 року, протокол № 8/23

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:
Нємченко Костянтин Едуардович, доктор фіз.-мат. наук, професор кафедри комп'ютерної фізики

Програму схвалено на засіданні кафедри комп'ютерної фізики

Протокол від 28 серпня 2023 року № 8/23

Завідувач кафедри комп'ютерної фізики

_____ Костянтин НЄМЧЕНКО

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми «Комп'ютерна фізика», «Прикладна фізика енергетичних систем», «Прикладна фізика нетрадиційної енергетики»

Гарант освітньо-професійної програми «Комп'ютерна фізика»

_____ Світлана РОГОВА

Гарант освітньо-професійної програми «Прикладна фізика енергетичних систем»

_____ Руслан СУХОВ

Гарант освітньо-професійної програми «Прикладна фізика нетрадиційної енергетики»

_____ Ілля МАРУЩЕНКО

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

Протокол від 28 серпня 2023 року № 8/23

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

_____ Денис ПРОТЕКТОР

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Квантова механіка” (друга частина) складена відповідно до освітньо-професійних програм підготовки «Комп’ютерна фізика», «Прикладна фізика енергетичних систем» першого (бакалаврського) рівня вищої освіти.

спеціальність: 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 розумінняоснов нерелятивістської квантової механіки, формування наукового підходу до вирішеннязадач, які виникають при розгляді фізичних явищ на основі квантової теорії, необхідних дляrозвитку 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. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. (ЗК1)
2. Здатність спілкуватися іноземною мовою. (ЗК4)
3. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій. (ЗК5)
4. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел. (ЗК7)
5. Навички здійснення безпечної діяльності. (ЗК10)
6. Здатність використовувати теоретичні та практичні знання про широкий спектр обчислювальних методів та математичних алгоритмів, включаючи принципи розробки та узагальнення цих методів та алгоритмів. (ЗК14)
7. Здатність застосовувати обчислювальні методи для отримання інформації з експериментальних даних та вирішення наукових проблем. (ЗК15)
8. Здатність перетворювати наукові проблеми в загальні обчислювальні моделі та зрозуміти, як різні джерела помилок впливають на точність та надійність моделей та обчислені результати. (ЗК17)

Спеціальні компетентності (СК):

1. Здатність використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу фізичних систем. (СК6)
2. Вміння програмувати на мовах високого рівня, компілювати мови та ефективно використовувати комп'ютерну систему алгебри. (СК9)
3. Знайомство з прийомами спільної розробки програмного забезпечення. (СК11)

1.3. Кількість кредитів: 4

1.4. Загальна кількість годин – 120

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Обов’язкова	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
4-й	-й
Семестр	
7-й	-й
Лекції	

16 год.	год.
Практичні, семінарські заняття	
32 год.	год.
Лабораторні заняття	
0 год.	год.
Самостійна робота	
42 год.	год.
у тому числі індивідуальні завдання	
0 год.	

1.6. Заплановані результати навчання:

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен:

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: 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:

Р01. Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв’язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики.

Р02. Застосовувати сучасні математичні методи для побудови й аналізу математичних моделей фізичних процесів.

Р04. Застосовувати фізичні, математичні та комп'ютерні моделі для дослідження фізичних явищ, розробки приладів і наукоємних технологій.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 3. Квантові фізичні системи

Тема 1. Гармонійний осцилятор.

Гармонійний осцилятор. Розв’язок рівняння Шредінгера. Поліноми Ерміта.

Тема 2. Властивості гармонійного осцилятора.

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

Тема 3. Квантовий ротатор.

Обертання в класичному випадку. Обертання в квантовому випадку.

Тема 4. Властивості квантового ротатора.

Оператор проекції моменту імпульсу. Виведення явного вигляду.

Тема 5. Момент імпульсу.

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

Тема 6. Спін частинки. Тотожність частинок

Поняття про спін частинки. Спінорна хвильова функція. Коммутатори.

Тема 7. Квантова статистика. Двоатомні молекули.

Ступені свободи двоатомних молекул. Теплоємність газів.

Тема 8. Квантова статистика Бозе. Фонони у твердому тілі.

Поняття фононів. Теплоємність твердих тіл. Закон Дюлонга –Пті. Формула Дебая.

Тема 9. Квантова статистика Фермі. Електрони у твердому тілі.

Поняття ферміонів. Енергія Фермі.

Тема 10. Квазікласичне наближення. Ентропія класичних систем.

Квазікласичне наближення. Рішення рівняння Шредінгера та зшивання квазікласичних

рішень. Правило квантування Бора-Зомерфельда. Фазовий об’єм. Ентропія класичних систем.

Розділ 4. Побудова атомів

Тема 11. Задача двох тіл.

Задача двох тіл. Рух в центральному полі. Загальні властивості руху в центральному полі. Виродження по проекції і випадкове виродження.

Тема 12. Рівняння Шредінгера в задачі двох тіл

Рівняння для радіальної хвильової функції. Класифікація стаціонарних станів дискретного спектра в центральному полі.

Тема 13. Водородоподібний атом.

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

Тема 14. Побудова атомів.

Таблиця Мєндєлєєва. Принципи та закономірності періодичної таблиці елементів.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин											
	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.	7	1	2			2						
Тема 2.	7	1	2			2						
Тема 3.	7	1	2			2						
Тема 4.	7	1	2			2						
Тема 5.	7	1	2			2						
Тема 6.	7	1	2			2						
Тема 7.	7	1	2			2						
Тема 8.	7	1	2			4						
Тема 9.	7	1	2			4						
Тема 10.	7	1	2			4						
Разом за розділом 3	60	10	20			26						
Розділ 2. Конкретні фізичні системи												
Тема 11.	12	1	3			4						
Тема 12.	12	1	3			4						
Тема 13.	13	2	3			4						
Тема 14.	13	2	3			4						
Разом за розділом 4	50	6	12			16						
Усього годин	90	16	32			42						

4. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Гармонійний осцилятор.	2
2	Властивості гармонійного осцилятора.	2
3	Квантовий ротатор.	2
4	Властивості квантового ротатора.	2

5	Момент імпульсу.	2
6	Спін частинки. Тотожність частинок	2
7	Квантова статистика. Двоатомні молекули.	2
8	Квантова статистика Бозе. Фонони у твердому тілі.	2
9	Квантова статистика Фермі. Електрони у твердому тілі.	2
10	Квазікласичне наближення. Ентропія класичних систем	2
11	Задача двох тіл.	3
12	Рівняння Шредінгера в задачі двох тіл	3
13	Водородоподібний атом.	3
14	Побудова атомів.	3
	Усього	32

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Вивчити поняття гармонійний осцилятора.	2
2	Дослідити властивості гармонійного осцилятора.	2
3	Ознайомитись з поняттям квантовий ротатора.	2
4	Вивчити властивості квантового ротатора.	2
5	Вивчити поняття моменту імпульсу.	2
6	Ознайомитись з поняттям спіну частинки.	2
7	Розв’язати задачі за темою «Квантова статистика. Двоатомні молекули»	2
8	Розв’язати задачі за темою «Квантова статистика Бозе. Фонони у твердому тілі».	4
9	Розв’язати задачі за темою «Квантова статистика Фермі. Електрони твердому тілі».	4
10	Розв’язати задачі за темою «Квазікласичне наближення. Ентропія класичних систем»	4
11	Розв’язати задачі за темою «Задача двох тіл».	4
12	Розв’язати задачі за темою «Рівняння Шредінгера в задачі двох тіл»	4
13	Розв’язати задачі за темою «Водородоподібний атом».	4
14	Розв’язати задачі за темою «Побудова атомів».	4
	Усього	42

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено

7. Методи навчання

При викладанні дисципліни використовуються всі основні методи навчання
1. пояснювально – ілюстративний метод з використанням мультимедійних презентацій
2. проблемні методи навчання з застосуванням
– розв’язання проблемних задач
– тестових завдань
– навчальних дискусій
– активізації самостійного вивчення студентами літератури
3. метод проблемного викладання з постановкою проблеми на початку нової теми

4. евристичний метод з самостійною або керованою викладачем роботою студентів при виконанні поточних завдань
5. 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 задопомогою викладача, оцінюється в 5 балів;
– Задача, при розв'язанні якої присутні незначні помилки в логіці розв'язанні, яківиправив викладач, при правильних розрахунках оцінюється в 4 бали;
– Задача, при розв'язанні якої присутні незначні помилки в логіці розв'язанні, яківиправив викладач, при помилках в розрахунках оцінюється в 3 бали;
– Задача, при розв'язанні якої присутні суттєві помилки в логіці розв'язання, яківиправив 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 0балів.
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 контрольноїроботи (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 грубіпомилки в розрахунках, оцінюється в 4 балів;
– Задача, при розв'язанні якої правильно обрана логіка, але присутні грубі помилки врозрахунках, 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 переписатицю 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 – 12балів.
– 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 грубіпомилки в розрахунках, оцінюється в 16 балів;
– Задача, при розв’язанні якої правильно обрана логіка, але присутні грубі помилки врозрахунках, 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 завдання	
назва теми	назва теми
Розділ 3	
Т1	3
Т2	3
Т3	3
Т4	3
Т5	3
Т6	3
Т7	3
Т8	3
Т9	3
Т10	3
Контрольна робота, передбачена навчальним планом	10
Усього	**40**

Розділ 4	
Т11	5
Т12	5
Т13	5
Т14	3
Усього	**20**
Іспит	40
Сума	100

Т1, Т2 ... Т14 – теми модулів

Нарахування балів при поточному контролі.

1(2) бал – робота в аудиторії
2(3) бали – виконання самостійної роботи

Критерії оцінювання навчальних досягнень

Критерії оцінювання відповідей на контрольній роботі

Теоретичні питання (4 балів)
Наявність відповіді – 2 бал
Правильність відповіді – 2 бал
Відсутність помилок в розрахунках – 2 бал
Розв'язання задачі № 1 (4 балів)
Наявність відповіді – 2 бал
Коректність викладок, визначень – 1 бал
Правильність відповіді – 1 бал

Критерії оцінювання відповідей на підсумковій роботі

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

Відсутність помилок в теоретичній частині – 2 бал

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальноїдіяльності протягом семестру	Оцінка	
	для екзамену	для заліку
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.

10. Посилана на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

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