

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Навчально-науковий інститут високих технологій**

Кафедра теоретичних основ високих технологій



**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник директора

з науково-педагогічної роботи

Галина ГРАБЧУК

«22» березня 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**ОСНОВИ КВАНТОВОЇ ФІЗИКИ**

*(повна назва навчальної дисципліни)*

**для студентів**

галузь знань 10 Природничі науки  
*(шифр і назва)*

спеціальність 102 Хімія  
*(шифр і назва спеціальності)*

освітній рівень бакалавр  
*(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)*

освітня програма Хімія (високі технології)  
*(назва освітньої програми)*

спеціалізація  
*(за наявності)* \_\_\_\_\_  
*(назва спеціалізації)*

вид дисципліни вибіркова/

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2021/2022</u>
Семестр	<u>5,6</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>6</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

Викладач:

Лозовський Валерій Зіновійович, завідувач кафедри теоретичних основ високих технологій  
Колежук Олексій Костянтинівич, професор кафедри теоретичних основ високих технологій  
Васильєв Тарас Анатолійович, асистент кафедри нанофізики конденсованих середовищ

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ («\_\_») «\_\_» 20\_\_ р.  
*(підпис, ПІБ, дата)*

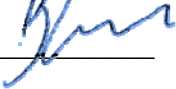
на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ («\_\_») «\_\_» 20\_\_ р.  
*(підпис, ПІБ, дата)*

**КИЇВ – 2022**

Розробник(и): *(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)*  
Колежук О.К., д.ф.-м.н., ст.н.с., професор кафедри теоретичних основ високих технологій  
Лозовський В.З., д.ф.-м.н., проф., зав. кафедри теоретичних основ високих технологій

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри теоретичних основ високих технологій

  
\_\_\_\_\_ (Лозовський В.З.)  
(підпис) (прізвище та ініціали)

Протокол № 11 від «3» березня 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол від «5» березня 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_ (Русінчук Н.М.)  
(підпис) (прізвище та ініціали)

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – формування у майбутніх фахівців з високих технологій у хімії навичок кількісного підходу до опису та аналізу мікроскопічних природних явищ у складних системах, фізичних процесів, вміння користуватися методами сучасної фізики для вирішення завдань сучасної хімії.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):**

1. Успішне опанування курсів з вищої математики, загальної фізики
2. Знання основ теорії функцій комплексної змінної, теорії ймовірностей, векторної та лінійної алгебри

**3. Анотація навчальної дисципліни:**

Мета курсу: дати студентам розуміння закономірностей, що проявляються на мікро- та нанометрових масштабах у складних хімічних та біологічних системах. Студент повинен оволодіти математичним апаратом квантової теорії та статистичної фізики, і вміти практично застосовувати його. На цій основі отримати чіткі уявлення про фізичну природу явищ, що підкоряються квантовим статистичним закономірностям. Студенти повинні навчитися використовувати наближені методи квантової механіки та статистичної фізики. Курс покликаний формувати цілісне бачення світу.

**4. Завдання (навчальні цілі):** досягнення інтегральних компетентностей студента – сприяти досягненню здатності вирішувати завдання в галузі хімічних та біологічних наук і на межі предметних галузей, що передбачає застосування теорій та методів природничих наук і характеризується комплексністю та невизначеністю умов; досягнення загальної компетентності – здатності до абстрактного мислення, аналізу і синтезу.

Навчальні цілі дисципліни спрямовані на досягнення таких загальних та фахових компетентностей:

ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК7. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК11. Здатність бути критичним і самокритичним.

ФК1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

ФК14. Здатність розуміти взаємозв'язок «Хімічна речовина» - «Біологічна роль».

ФК15. Здатність прогнозувати появу біологічної активності хімічної сполуки.

ФК19. Здатність провести ідентифікацію будови нових синтезованих нанорозмірних матеріалів.

**5. Результати навчання за дисципліною:** (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

### 5й семестр

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати основні поняття, принципи, закони,	Лекція	Теоретичні	10%

\* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

	квантової механіки.		питання на заліку	
1.2	Мати уявлення: про область застосовності, типові задачі і методи квантової механіки, її роль та місце в природознавчих науках, сучасні напрямки застосування.		Домашні завдання	15%
2.1	Вміти розв'язувати прості одновимірні та тривимірні задачі квантового руху; використовувати основні методи наближеного розв'язку типових задач (стаціонарна і нестаціонарна теорія збурень).	практичне заняття	Робота на практичних заняттях	10%
			модульні контрольні роботи	35%
4.1	Вміти самостійно розбиратися в математичному апараті, що є в літературі з квантової механіки	самостійна робота	Розв'язання практичних завдань на заліку	30%
4.2	Розвиток творчого підходу до розв'язування задач; розвиток логічного та аналітичного мислення.	практичне заняття, самостійна робота студентів		

### 6й семестр

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.3	Знати основні поняття, принципи, закономірності статистичної фізики і квантової статистики.	Лекція	Теоретичні питання на іспиті	15%
1.4	Мати уявлення: про область застосовності, типові задачі і методи статистичної фізики, її роль та місце в природознавчих науках, сучасні напрямки застосування, про методи чисельного моделювання в задачах статистичної фізики.		Домашні завдання	15%
			Робота на практичних заняттях	10%
2.2	Вміти розв'язувати прості задачі квантової статистики; застосовувати основні моделі статистичної фізики для розв'язку типових задач.	практичне заняття	модульні контрольні роботи	35%
4.3	Вміти самостійно розбиратися в математичному апараті, що є в літературі з статистичної фізики та квантової статистики.	самостійна робота	Розв'язання практичних завдань на іспиті	25%
4.2	Розвиток творчого підходу до розв'язування задач; розвиток логічного та аналітичного мислення.	практичне заняття, самостійна робота студентів		

\* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

\*

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання (необов'язково для вибіркових дисциплін які не входять до блоків спеціалізації)**

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	4.1	4.2	4.3
	Програмні результати навчання								
ПРН 26. Розуміти зміну/появу біологічної функції при перебігу біохімічних перетворень.	+	+			+		+	+	
ПРН 27. Прогнозувати появу біологічної активності хімічної сполуки.			+	+		+		+	+

**7. Схема формування оцінки.**

**7.1 Форми оцінювання студентів**

**5й семестр:**

**- семестрове оцінювання:**

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /36 балів**, а саме:

1. *Робота на практичних заняттях: РН 1.1,1.2, 2.1, 4.2 – 10 балів/6 балів.*
2. *Домашні завдання: РН 1.1,1.2, 2.1, 4.1, 4.2 – 15 балів/9 балів.*
3. *Модульні контрольні роботи: РН 1.1,1.2, 2.1, 4.1, 4.2 – 35 балів/ 21 бал.*

**- підсумкове оцінювання у формі заліку.**

Максимальна/мінімальна кількість балів кількість балів які можуть бути отримані студентом на заліку - **40 балів/24 бали**.

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за залік не може бути меншою 24 балів.

Студент допускається до заліку, якщо під час семестру набрав не менше ніж 36 балів, за умови виконання всіх контрольних робіт та домашніх завдань.

Форма проведення заліку: змішана письмово/усна. Студент отримує білет із одним теоретичним питаннями та двома задачами для їх розв'язання. Результати навчання, які будуть оцінюватись: РН 1.1,1.2, 2.1, 4.1, 4.2.

На підготовку до усної відповіді та розв'язання задач студенти мають дві години. Відповідь на теоретичне запитання оцінюється (максимум/мінімум) у 10/6 балів, розв'язання задач оцінюється (максимум/мінімум) кожна у 15/9 балів.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	36	60
Залік	24	40
<b>Всього</b>	<b>60</b>	<b>100</b>

**6й семестр:**

**- семестрове оцінювання:**

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /36 балів**, а саме:

1. *Робота на практичних заняттях: РН 1.3,1.4, 2.2, 4.2 – 10 балів/6 балів.*
2. *Домашні завдання: РН 1.3,1.4, 2.2, 4.3, 4.2 – 15 балів/9 балів.*

3. Модульні контрольні роботи: РН 1.3,1.4, 2.2, 4.3, 4.2 – 35 балів/ 21 бал.

- підсумкове оцінювання у формі іспиту.

Максимальна/мінімальна кількість балів кількість балів які можуть бути отримані студентом на іспиті - **40 балів/24 бали.**

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за залік не може бути меншою 24 балів.

Студент допускається до заліку, якщо під час семестру набрав не менше ніж 36 балів, за умови виконання всіх контрольних робіт та домашніх завдань.

Форма проведення іспиту: письмова робота. Студент отримує білет із двома теоретичними питаннями та задачею. Результати навчання, які будуть оцінюватись: РН 1.3,1.4, 2.2, 4.3, 4.2.

На виконання роботи студенти мають дві години. Відповіді на теоретичні запитання оцінюється (максимум/мінімум) кожне у 10/6 балів, розв'язання задачі оцінюється (максимум/мінімум) 20/12 балів.

<b>Оцінювання</b>	<b>Min</b>	<b>Max</b>
Семестрове оцінювання	36	60
Іспит	24	40
<b>Всього</b>	<b>60</b>	<b>100</b>

### 7.2 Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання: модульна контрольна робота №1 – на п'ятому практичному занятті 5-го семестру, модульна контрольна робота №2 – на десятому практичному занятті 5-го семестру, модульна контрольна робота №3 – на п'ятому практичному занятті 6-го семестру, модульна контрольна робота №4 – на десятому практичному занятті 6-го семестру. Оцінювання самостійних робіт (домашніх завдань) впродовж семестрів.

### 7.3 Шкала відповідності оцінок

<b>Відмінно / Excellent</b>	90-100
<b>Добре / Good</b>	75-89
<b>Задовільно / Satisfactory</b>	60-74
<b>Незадовільно / Fail</b>	0-59
<b>Зараховано / Passed</b>	60-100
<b>Не зараховано / Fail</b>	0-59

**8. Структура навчальної дисципліни.  
Тематичний план лекцій і практичних занять**

№ п/п	Назва теми*	Кількість годин		
		лекції	семінари/ практичні/ лабораторні вибрати необхідне	Самостійна робота
<b>ЗМ1: Основні поняття квантової теорії</b>				
1	<i>Квантовий стан і хвильова функція.</i> Поняття квантового стану, гільбертів простір, скалярний добуток станів, повний ортонормований базис, принцип суперпозиції. Поняття хвильової функції, її фізичний зміст; випадки скінченновимірного і нескінченновимірного гільбертового простору. Умова нормування хвильової функції. Корпускулярно-хвильовий дуалізм. Довжина хвилі де Бройля.	2	2	5
2	<i>Фізичні величини в квантовій теорії. Принцип невизначеності Гайзенберга.</i> Властивості операторів фізичних величин. Власні функції і власні значення самоспряжених операторів. Комутатори. Необхідна умова існування спільної системи власних функцій для двох операторів. Загальна форма співвідношення невизначеності для двох некомутуючих операторів. Обчислення середніх значень. Оператор імпульсу. Стан з певним імпульсом на кільці, поняття про розмірне квантування. Стан з певним імпульсом в нескінченному просторі, проблема нормування, дельта-функція Дірака.	2	2	5
3	<i>Еволюція квантового стану.</i> Рівняння Шредінгера. Гамільтоніан, стаціонарні стани. Частинка в нескінченно глибокій потенціальній ямі. Еволюція середніх значень фізичних величин. Закони збереження. Проблема вимірювання. Редукція хвильової функції. Сплутані стани.	2	2	5
4	<i>Бозони і ферміони.</i> Принцип нерозрізнюваності тотожних частинок. Симетрійні властивості багаточастинкової хвильової функції. Принцип Паулі. Ферміонні хвильові функції у вигляді детермінанта Слетера.	2	2	5
	<i>Контрольна робота № 1</i>		x	
<b>ЗМ2: Методи квантової теорії простих систем</b>				
5	<i>Одновимірний рух частинки в кусково-постійних потенціалах</i> Граничні умови, яким повинна задовольняти хвильова функція (випадки: несингулярні потенціали, скачок маси, дельта-функція). Рух в класично дозволений і класично заборонений області. Квантове тунелювання.	2	2	5
6	<i>Гармонічний осцилятор.</i> Оператори народження та знищення та власні стани одновимірного	2	2	5

	гармонічного осцилятора. Когерентні стани. Метод розділення змінних при розв'язанні багатовимірних задач квантової механіки.			
7	<i>Рух частинки в центральному полі.</i> Оператор моменту імпульсу (кутового моменту), його властивості і власні стани. Дослід Штерна-Герлаха. Спін. Оператор спіну $\frac{1}{2}$ , його властивості, матричне представлення і власні стани. Електронні хвильові функції і енергетичні рівні атома водню.	2	2	5
8	<i>Теорія збурень.</i> Стаціонарна теорія збурень - для невидроджених станів і у випадку виродження. Нестационарна теорія збурень. Імовірність переходу між стаціонарними станами під дією збурення, залежного від часу. Короткочасне збурення. Періодичне збурення, золоте правило Фермі.	2	2	5
9	<i>Двоелектронні системи.</i> Атом гелію. Спінові стани системи з двох електронів. Кулонівська і обмінна енергія. Молекула водню, наближений опис: метод молекулярних орбіталей, метод валентних зв'язків.	2	2	5
10	<i>Взаємодія випромінювання з атомами.</i> Переходи між електронними станами в атомі під дією зовнішнього електромагнітного випромінювання. Правила відбору для електродипольних переходів	2		5
	<i>Модульна контрольна робота №2</i>		x	
	<b>ВСЬОГО (5-й сем.)</b>	<b>20</b>	<b>20</b>	<b>50</b>

№ п/п	Назва теми*	Кількість годин		
		лекції	семінари/ практичні/ лабораторні вибрати необхідне	Самостійна робота
<b><u>ЗМ3: Основи статистичної фізики</u></b>				
11	<i>Основні поняття статистичної фізики.</i> Статистичний розподіл. Середні значення, ергодичність. Дисперсія середнього значення екстенсивних/інтенсивних величин. Статистичний оператор, його властивості. Ентропія, її властивості. Зростання ентропії в процесі встановлення статистичної рівноваги. Мікроканонічний ансамбль: поняття температури та хімічного потенціалу. Співвідношення між термодинамічними величинами (тиск, температура, хімічний потенціал) і ентропією/енергією у мікроканонічному ансамблі.	2	2	5
12	<i>Канонічний ансамбль.</i> Статистична сума. Вільна енергія. Обчислення середніх за допомогою	2	2	5



	статистичної суми. Приклади застосування формалізму канонічного ансамблю: гармонічний осцилятор, спіні в магнітному полі, частинки в квантовій ямі («ідеальний класичний газ»), випромінювання абсолютно чорного тіла, розподіл Планка.			
13	<i>Великий канонічний ансамбль.</i> Велика канонічна статсума, термодинамічний потенціал. Екстремальні властивості термодинамічних потенціалів. Приклад застосування формалізму великого канонічного ансамблю: Елементарна модель одношарової адсорбції, ізотерма Ленгмюра.	2	2	5
14	<i>Функції розподілу Фермі-Дірака і Бозе-Ейнштейна.</i> Еквівалентність канонічного і великого канонічного підходу для систем великої кількості частинок.	2	2	5
15	<i>Ідеальні квантові гази.</i> Густина станів. <i>Ідеальний Фермі-газ, рівняння стану.</i> Вироджений Фермі-газ, квантовий тиск. <i>Ідеальний Бозе-газ, явище бозе-ейнштейнівської конденсації.</i> Умова застосовності класичної статистики Больцмана, теплова довжина хвилі де Бройля.	2	2	5
	<i>Контрольна робота № 3</i>		x	
<b><u>ЗМ4</u></b>				
<b><u>Застосування статистичної фізики</u></b>				
16	<i>Вироджений електронний газ в металах.</i> Розклад Зомерфельда, обчислення температурних поправок. Хімічний потенціал, теплоємність, магнітна сприйнятливність виродженого Фермі-газу.	2	2	5
17	<i>Статистика носіїв заряду в напівпровідниках.</i> Екранування потенціалу зарядженої домішки в класичній плазмі і у виродженому електронному газі.	2	2	5
18	<i>Методи Монте-Карло в статистичній фізиці.</i> Генератори випадкових чисел. Обчислення інтегралів і статистичних середніх методами Монте Карло. Алгоритм Метрополіса, приклад застосування для моделі Ізінга.	2	2	5
19	<i>Поняття про фазові переходи.</i> Метод середнього поля на прикладі моделі Ізінга.	2	2	5
20	<i>Нерівноважні процеси.</i> Основне кінетичне рівняння, принцип детального балансу. Рівняння Больцмана, наближення часу релаксації. Дифузія, співвідношення Ейнштейна.	2	2	5
	<i>Контрольна робота №4</i>		x	
	<b>ВСЬОГО (6-й сем)</b>	<b>20</b>	<b>20</b>	<b>50</b>
	<b>ВСЬОГО (5-й і 6-й сем)</b>	<b>50</b>	<b>50</b>	<b>160</b>

**Загальний обсяг** 180 год.<sup>1</sup>, в тому числі (вибрати необхідне):

Лекцій – 40 год.

Семінари – \_\_\_ год.

Практичні заняття - 40 год.

Лабораторні заняття - \_\_\_\_\_ год.

Тренінги - \_\_\_\_\_ год.

Консультації - 1 год.

Самостійна робота - 99 год.

## **9. Рекомендовані джерела<sup>2</sup>:**

### **Основна:**

- [1] Tang C.L. Fundamentals of Quantum Mechanics. – Cambridge University Press, 2005.
- [2] Вакарчук І.О. Квантова механіка. – Львів: Вид-во ЛДУ, 1998. – 616 с.
- [3] Федорченко А.М. Теоретична фізика. Квантова механіка, термодинаміка і статистична фізика. Т.2./ Федорченко А. М. – Київ: Вища школа, 1993. – 378 с.
- [4] Гречко Л.Г., Сугаков В.И., Томасевич О.Ф., Федорченко А.М. Сборник задач по теоретической физике. М.: Высшая школа, 1984. – 319 с.
- [5] Збірник задач із квантової механіки : навч. посіб. / В. І. Висоцький, М. В. Максюта, І. О. Ястремський. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2019. – 287 с
- [6] Кобилянський В.Б. Статистична фізика. – К.: Вища школа, 1972.
- [7] Федорченко А.М. Вступ до курсу статистичної фізики та термодинаміки.-Київ: Вища школа, 1973.– 188 с.
- [8] K. Huang: Statistical mechanics, 2nd ed. (Wiley, New York, 1987)

### **Додаткова:**

- [1] Федорченко А.М. Теоретична фізика. Т.2.. – Київ, Вища школа, 1993.
- [2] McMahon D. Quantum mechanics demystified. – McGraw-Hill, 2006. – 393 p.
- [3] H.Schulz. Statistische Physik beruhend auf Quantentheorie: Eine Einfuehrung. – Verlag Harri Deutsch, Frankfurt, 2005. – 334p.

## **10. Додаткові ресурси:**

<http://iht.univ.kiev.ua/Kolezhuk/teach-SCP.html>

<https://canvas.instructure.com/enroll/DMX9Y7>

<https://canvas.instructure.com/enroll/W96W4Y>

---

<sup>1</sup> Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

<sup>2</sup> В тому числі Інтернет ресурси