



# ОСНОВИ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ

## Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

### Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>153 Автоматизація та приладобудування</i>
Спеціальність	<i>153 Мікро- та наносистемна техніка</i>
Освітня програма	<i>Мікро- і наноелектроніка</i>
Статус дисципліни	<i>Нормативна</i>
Форма навчання	<i>очна(денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>5 кредитів ЕКТС</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Іспит / Модульні контрольні роботи, ДКР</i>
Розклад занять	<i><a href="http://rozklad.kpi.ua">rozklad.kpi.ua</a></i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: к.т.н. ЛУПИНА Борис Іванович, <a href="mailto:b.lupyna@kpi.ua">b.lupyna@kpi.ua</a> , <a href="mailto:b.lupyna-me@ill.kpi.ua">b.lupyna-me@ill.kpi.ua</a> , моб. +38 050 949 82 76 (mobile + Telegram + Viber) Практичні / Семінарські: к.т.н. ЛУПИНА Борис Іванович, <a href="mailto:b.lupyna@kpi.ua">b.lupyna@kpi.ua</a> , <a href="mailto:b.lupyna-me@ill.kpi.ua">b.lupyna-me@ill.kpi.ua</a> , моб. +38 050 949 82 76 (mobile + Telegram + Viber)
Розміщення курсу	Посилання на дистанційний ресурс: код класу 74sgm57 <a href="https://meet.google.com/lookup/epvp2zicjg">https://meet.google.com/lookup/epvp2zicjg</a>

### Програма навчальної дисципліни

#### 1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Метою вивчення навчальної дисципліни «Основи квантової теорії» є ознайомлення студентів з законами мікросвіту та розуміння їх відмінності від законів класичної механіки; сприяння у оволодінні навичками по застосуванні теоретичних знань квантової механіки при вирішенні практичних завдань сучасної мікро- та наносистемної техніки. Навчальна дисципліна «Основи квантової теорії» передбачає вивчення основних принципів квантової теорії, її фізичних засад, математичного апарату для розрахунку найпростіших квантових систем (потенціальна яма, потенціальний бар'єр, квантовий гармонічний осцилятор тощо).

Майбутньому фахівцю зі спеціальності Мікро- та наносистемної техніки необхідно вивчати дану дисципліну, оскільки вона дає фундаментальні знання з квантово-механічного опису електро-фізичних характеристик сучасних пристроїв мікро- та наносистемної техніки, властивостей матеріалів, які використовуються в конструюванні та виробництві окремих вузлів мікро- та наносистемної техніки, на атомарному рівні.

Вивчення навчальної дисципліни «Основи квантової теорії» забезпечить студентів наступні компетентності: здатність розуміти принципи функціонування та будувати теоретичні моделі сучасних пристроїв мікро- та наносистемної техніки, описувати їх електричні та фізичні характеристики, обґрунтовано вибирати матеріали з оптимальними властивостями для розробки сучасних електронних пристроїв зі їх функціональним призначенням.

Після засвоєння навчального модуля «Основи квантової теорії» студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

*знання: предмет та головні задачі квантової механіки; головні принципи (суперпозиції, причинності, невизначеностей Гейзенберга, відповідності, тотожності частинок, принцип заборони Паулі); основи математичного апарату квантової механіки; квантово-механічний опис та особливості руху мікрочастинок в силових полях; властивості квантових систем, що складені з тотожних частинок; квантово-механічний опис та головні властивості методологічно важливих квантових систем (атом водню, багатоелектронні атоми у періодичній таблиці елементів), теоретичні та конструктивні засади квантової електроніки.*

*уміння: інтерпретувати вектори стану (хвильові функції); аналізувати розв'язок простих модельних задач квантової механіки (наприклад, долання потенціальних бар'єрів); пояснювати явища мікросвіту із застосуванням ідей квантової механіки (наприклад, тунельний ефект, існування періодичної системи хімічних елементів); формулювати та аналізувати головні принципи квантової механіки; знаходити комутатори простих операторів, власні значення та власні функції простих квантових операторів.*

*досвід: розуміння предмету, головних задач, принципів, основних положень і меж застосування квантової механіки, фізичний зміст квадрата модуля хвильової функції; співвідношення невизначеностей; квантово-механічний опис та особливості руху мікрочастинок у силових полях; аксіоматику квантової механіки; властивості квантових систем, що складаються з тотожних частинок.*

## **2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)**

*Для успішного вивчення даної дисципліни студенти мають засвоїти наступні дисципліни (пререквізити дисципліни):*

- бакалаврські курси: “Загальна фізика, розділи Механіка, Електромагнетизм, Оптика, Атомна фізика”, “Математичний аналіз”, “Імовірнісні основи обробки даних”.*

*Результати навчання даної дисципліни використовуються для вивчення наступних дисциплін (постреквізити дисципліни):*

- бакалаврські курси: «Фізика твердого тіла», «Фізика напівпровідників», «Фізика діелектриків», «Твердотільна електроніка», «Фізико-технологічні основи наноелектроніки».*
- переддипломна практика та дипломне проектування.*

## **3. Зміст навчальної дисципліни**

- 1. Основи квантової теорії.*
- 2. Основи квантової механіки. Постулати квантової механіки.*
- 3. Оператори, дії над операторами, операторна форма квантової теорії.*
- 4. Рівняння Шредінгера.*
- 5. Найпростіші задачі квантової теорії.*
- 6. Рух частинки в силовому полі заданої симетрії.*
- 7. Структура та властивості атомів, періодична система елементів Д.І.Менделєєва.*
- 8. Механічні та магнітні власні моменти електрона.*
- 9. Розв'язок задач квантової механіки наближеними методами.*
- 10. Система однакових мікрочастинок в квантовій теорії.*
- 11. Квантова теорія багатоелектронних атомів. Утворення молекул.*
- 12. Квантова теорія переходів між енергетичними рівнями.*
- 13. Квантова теорія поведінки електрона в зовнішніх полях.*
- 14. Основи квантової теорії розсіювання. Взаємодія рухомої зарядженої частинки з атомом.*

15. Квантова теорія випромінювання. Спонтанне та вимушене випромінювання. Квантова система в збудженому стані. Процеси поглинання і емісії фотонів атомами. Правила відбору. Розсіяння випромінювання на квазічастинках, спектроскопія.

16. Основи квантової електроніки. Квантові генератори. Мазери, лазери.

#### 4. Навчальні матеріали та ресурси

Базова література:

1. Молчанов В. І. Квантова механіка: навч. посіб. Київ: НТУУ «КПІ», 2013. 156 с.

2. Вакарчук І. О. Квантова механіка: Підручник. 3-тє вид., доп. Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2007. 848 с:

3. Юхновський І. Р. Основи квантової механіки: Навчальний посібник. 2-ге вид., перероб. і доп. Київ: Либідь, 2002. 392 с.

4. Висоцький В.І. Квантова механіка та її використання у прикладній фізиці: підручник. Київ: Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2008. 367 с. ISBN 978-966-439-127-3.

5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Москва: Наука, 1989. 767 с.

6. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. 6 издание. Москва: Наука, 1983. 664с.

7. Давыдов А. С. Квантовая механика. Москва: Наука, 1973. 704 с.

8. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Збірник задач з квантової механіки: Навч. посіб. Київ.: Вища школа, 2003. 230 с.

Додаткова література:

1. «Модельювання приладів мікро- і наноелектроніки»: [Електронний ресурс]: підручник для аспірантів спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка», та освітньо-наукової програми «Мікро- та наносистемна техніка» / В.О. Москалюк, В.І.Тимофєєв; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 22,9 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. –164 с.

2. Елементи та пристрої квантової електроніки. Навчальний посібник/ Ю.І. Колесник, А.В. Кіпенський. – Харків: НТУ «ХПІ», 2016. – 318.

3. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Основи статистичної фізики і термодинаміки: Навчальний посібник. – К: Вища школа, 2004. – 255 с.

Зазначену літературу можна знайти в бібліотеці КПІ ім.І.Сікорського, на сайті кафедри мікроелектроніки (<http://me.kpi.ua/index.php?id=61>) або в інтернеті.

## 5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

*Методика вивчення дисципліни полягає у викладенні теоретичної частини матеріалу на лекційних заняттях та ознайомлення студентів на практичних заняттях з конкретними прикладами застосування основних законів та постулатів квантової теорії.*

*В лекційному матеріалі головний акцент зроблено на постановку фізичної задачі, формування у студентів фізичних уявлень, а також на виведення основних формул.*

*Застосовуються стратегії активного і колективного навчання, які визначаються наступними методами і технологіями:*

*1) метод проблемного викладу (лекції);*

*2) особистісно-орієнтовані (розвиваючі) технології, засновані на методах «мозкового штурму» та «аналізу ситуацій» (практичні заняття);*

*3) доповнення традиційних навчальних занять засобами взаємодії на основі мережевих комунікаційних можливостей (технологія Google Classroom та електронні презентації для лекційних і практичних занять).*

## «Основи квантової теорії»

### Лекції:

Лекція 1. Історична довідка. Основні експерименти на початок 20-го століття, які не знаходили пояснення в рамках класичної механіки. Зв'язок дисципліни «Основи квантової теорії» зі спеціальністю «153 Мікро- та наносистемна техніка».

Лекції 2 та 3. Дифракція мікрочастинок. Гіпотеза де Бройля. Корпускулярно-хвильовий дуалізм. Групова та фазова швидкості. Досліди Д.Франка і Г. Герца, Е. Резерфорда, К. Девіссона – Л. Джермера.

Лекція 4. Стаціонарні орбіти електрона в атомі, теорія і постулати Бора, правило квантування Бора-Зоммерфельда, стала Рідберга, формула Бальмера, комбінаційний принцип Рітца.

Лекція 5. Хвильова функція. Ймовірність місцезнаходження мікрочастинки. Інтерпретація хвильової функції М. Борна. Статистичне тлумачення хвиль де Бройля. Статистичний характер явищ мікросвіту.

Лекція 6. Оператори в квантовій теорії. Математичні дії над операторами. Лінійні та самоспряжені оператори. Оператор комутатор. Співвідношення невизначеності Гейзенберга. Середні значення фізичних величин.

Лекція 7 та 8. Квантові статистичні ансамблі. Вимірювальний процес в квантовій механіці та вплив вимірювального пристрою. Оператори фізичних величин. Обчислення середніх значень фізичних величин в квантовій теорії (оператори координати, імпульсу, енергії).

Лекція 9. Гамільтоніан - оператор енергії в квантовій теорії. Хвильове рівняння Шредінгера. Стаціонарне рівняння Шредінгера. Рівняння неперервності.

Лекція 10. Одновимірний прямокутний потенціальний яма. Загальний розв'язок. Використання умов на межах та умови нормування. Багатовимірний потенціальний яма.

Лекція 11. Поняття про потенціальний бар'єр. Прямокутний потенціальний бар'єр. Постановка задачі подолання бар'єру. Рівняння Шредінгера для трьох областей. Тунельний ефект.

Лекція 13. Потенціальний бар'єр довільної форми.

Лекції 14 та 15. Квантовомеханічна теорія гармонічного осцилятора. Порівняння з класичним осцилятором. Розв'язок рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора, аналіз розв'язку. Діаграма розподілу щільності ймовірності координати мікрочастинки.

Лекція 16. Атом водню. Рівняння Шредінгера для воднеподібного атому.

Лекція 17. Квантові числа та хвильові функції електрона в атомі водню. Енергетичний спектр і хвильові функції атома водню.

Лекція 18. Магнітний момент атома водню. Магнетрон Бора. Струми в атомі.

Лекція 19. Спін електрона. Спінні функції. Спінні оператори. Матриці Паулі. Експериментальний доказ існування спіна електрона.

Лекція 20. та 21. Рівняння Шредінгера для системи однакових мікрочастинок. Принцип тождності мікрочастинок. Симетричні та антисиметричні хвильові функції. Оператор перестановок.

Лекція 22. Функції розподілу Фермі-Дірака та Бозе-Ейнштейна

Лекція 23. Хвильові функції для систем бозонів та ферміонів. Принцип Паулі.

Лекція 24. Атом гелію. Парагелій та ортогелій. Обмінна енергія.

Лекція 25. Квантова система в основному та збудженому станах. Принцип суперпозиції станів. Рівняння Шредінгера для твердого тіла.

Лекція 26. Молекула водню. Природа хімічних зв'язків. Сили Ван дер Ваальса.

Лекція 27. Оптичні квантові генератори.

### **Тематика практичних занять**

1. Експериментальні результати кінця XIX – початку XX століття, що передували виникненню і розвитку квантової теорії. «Класичні» наукові результати з дослідження законів випромінювання АЧТ Г. Кірхгофа, Д.В. Релея – Д.Г. Джинса, В. Віна, Й. Стефана – Л. Больцмана.
2. Спектральні характеристики випромінювання абсолютно чорного тіла (АЧТ). Формула М. Планка, її аналіз у короткохвильовій та довгохвильовій областях, отримання «класичних» законів теплового випромінювання із формули М. Планка.
3. Теорія де Бройля. Хвильові властивості мікрочастинок. Хвильовий вектор, хвильова поверхня. Постановка, основні результати та аналіз експериментів на підтвердження хвильових властивостей мікрочастинок. Фазовий простір. Розрахунок та побудова фазової траєкторії частинок. Фазовий об'єм.
2. Розподіл Максвелла - Больцмана.
3. Розрахунок розподілу координати, імпульсів та енергій частинок в прямокутній та сферичній системах координат.
4. Розрахунок теплоємності твердого тіла.
5. Співвідношення невизначеностей.
6. Оператори у квантовій механіці.
7. Хвильова функція.
8. Рівняння Шредінгера.
9. Одновимірний рух . Частинка в нескінченно глибокій потенціальній ямі.
10. Одновимірний рух. Прямокутний потенціальний бар'єр.
11. Потенціальний бар'єр різної форми.
12. Квантовий гармонічний осцилятор.
13. Спін електрона.
14. Наближені методи квантової механіки.
15. Основи квантової оптоелектроніки.

### **Самостійна робота студента.**

#### **Зазначаються види самостійної роботи**

1. Флуктуації термодинамічних величин. Броунівський рух – 2 години.
2. Енергія та поверхні Фермі – 6 годин.
3. Шуми в металах та напівпровідниках – 4 години.
4. Власні функції та власні значення операторів - 2 години.
5. Повний момент кількості руху електрона. Спін-орбітальна взаємодія.- 2 години.
6. Матрична форма квантової механіки – 2 години.
7. Особливості квантових систем ферміонів та бозонів та їх відмінність – 4 години.
8. Рівняння Шредінгера для електрона в електромагнітному полі. – 2 години.
9. Ефект Штарка. Ефект Зеємана. – 2 години.
10. Виконання ДКР – 30 годин.
11. Підготовка до МКР – 7 годин.
12. Підготовка до іспиту – 15 годин.

## 6. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

*Система вимог, які ставляться перед студентом:*

*Академічна доброчесність. Дотримання академічної доброчесності студентами передбачає:*

- *самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання (для осіб з особливими освітніми потребами ця вимога застосовується з урахуванням їхніх індивідуальних потреб і можливостей);*
- *посилання на джерела інформації у разі використання ідей, розробок, тверджень, відомостей;*
- *дотримання норм законодавства про авторське право і суміжні права;*
- *надання достовірної інформації про результати власної навчальної (наукової, творчої) діяльності, використанні методики досліджень і джерела інформації.*

*Порушенням академічної доброчесності вважається:*

- *академічний плагіат - оприлюднення (частково або повністю) наукових (творчих) результатів, отриманих іншими особами, як результатів власного дослідження (творчості) та/або відтворення опублікованих текстів (оприлюднених творів мистецтва) інших авторів без зазначення авторства;*
- *самоплагіат - оприлюднення (частково або повністю) власних раніше опублікованих наукових результатів як нових наукових результатів.*

*За порушення академічної доброчесності здобувачі освіти можуть бути притягнені до такої академічної відповідальності:*

- *- повторне проходження оцінювання (контрольна робота, іспит, залік тощо);*
- *- повторне проходження відповідного освітнього компонента освітньої програми.*

*Політика запізнення. За несвоєчасно виконані завдання буде накладено штраф 10 відсотків від загальної кількості балів за це завдання. Примітка. Виключення можуть бути зроблені до невчасно зданих завдань з поважних причин.*

*Політика щодо відвідування. Відвідування занять є обов'язковим. За об'єктивних причин (наприклад, пандемія, хвороба, міжнародне стажування) навчання може відбуватися в он-лайн-формі за погодженням із керівником курсу.*

*Лекційні та практичні заняття проводяться згідно до діючого положення КПІ ім. Ігоря Сікорського. Відвідування занять є обов'язковим. Для одержання іспиту "автоматом" потрібно набрати більше 60 балів, які можна одержати за виконання обов'язкових завдань (виконання ДКР, практичних робіт та написання модульної контрольної роботи) та систематично відвідавши лекційні заняття (пройшовши експрес-тест за матеріалами лекцій).*

*Бали за роботу під час лекції нараховуються на основі експрес-опитування. Кожний тест містить 2 запитання до матеріалу лекційного заняття, правильна відповідь на які дасть змогу отримати 2 бали.*

*Модульна контрольна робота проводиться письмово. Кожне завдання на контрольній роботі містить 2 теоретичних питання та 1 задачу, правильні відповіді на які дають змогу одержати 5 балів за кожне теоретичне та 4 бали за практичне.*

*Індивідуальне завдання (ДКР) – це розв'язання 5 домашніх контрольних задач протягом семестру (по одній задачі на кожне наступне заняття), правильне розв'язання яких дасть змогу одержати по 2 бали за кожну задачу. Виконується у години самостійної роботи письмово.*

*Іспит є письмовим. Білет на іспиті складається з 3-х завдань (2 теоретичних питання та 1 задача) по тематиці змістовних тем, що виносяться на аудиторні заняття, та окремих питань, які виносяться на самостійне опрацювання.*

## 7. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

**Поточний контроль:** експрес-опитування (тест).

**Календарний контроль:** проводиться один раз на семестр для кожного модуля як моніторинг поточного стану виконання вимог силябусу (модульна контрольна робота).

**Семестровий контроль:** екзамен

**Умови допуску до семестрового контролю:** мінімальний рейтинговий бал 40, написання МКР, виконання ДКР та практичних робіт.

### 1. Система отримання рейтингової оцінки за видами занять за кожний модуль:

№ п/п	Заняття, що підлягають рейтинговій оцінці	Загальна кількість завдань	Максимальний бал за 1 завдання	Кількість балів на "відмінно"
1.	Лекції: експрес-опитування (тест)	5	4	20
2.	Модульна контрольна робота (МКР)	3	14	42
3.	Домашня контрольна робота (ДКР)	2	7	14
4.	Практичні роботи	6	4	24
Семестрові рейтингові бали:				100

Студенти, які набрали протягом семестру кількість балів  $\geq 60$ , мають можливість не складати іспит, а отримати оцінку "автоматом" відповідно до набраного рейтингу з дисципліни. Студенти, які не набрали 60 балів, або набрали  $\geq 60$ , однак одержана оцінка не влаштовує, складають іспит без урахування семестрових рейтингових балів.

### Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

## 8. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік питань, які виносяться на семестровий контроль (екзамен):

1. Основні експерименти початку 20-го століття, які не знаходять пояснення в рамках класичної механіки.

2. Хвилі де Бройля, їх фазова та групова швидкість. Дифракція мікрочастинок.

3. Статистичне тлумачення хвиль де Бройля.

3. Хвильова функція. Імовірність місцезнаходження мікрочастинки.

4. Принцип суперпозиції станів. Квантові статистичні ансамблі.

5. Співвідношення невизначеності Гейзенберга.

6. Оператори (визначення; дії над операторами: сума, добуток, квадрат; властивості: лінійність), оператор - комутатор.

7. Власні значення та власні функції операторів, їх фізичний зміст. Умови імовірності вимірювання одночасно різних механічних величин.

8. Оператори координати і імпульсу. Оператор моменту імпульсу (проекції, квадрат, оператор Лапласа).



9. Оператор енергії (кінетичної, повної, Гамільтоніан). Рівняння Шредінгера.
10. Рівняння неперервності (щільність потоку). Стаціонарне рівняння Шредінгера.
11. Падіння частинки на потенціальний бар'єр.
12. Падіння частинки на потенціальний бар'єр кінцевої ширини. Тунельний ефект.
13. Гамільтоніан квантового гармонічного осцилятора (КГО).
14. Рівняння Шредінгера для КГО. Значення енергії та хвильової функції.
15. Енергетичний спектр КГО (порівняти з класичним осцилятором). Тривимірний КГО.
16. Власні значення і власні функції оператора проєкції моменту імпульсу та оператора квадрата моменту імпульсу.
17. Рівняння Шредінгера для воднеподібного атома.
18. Пошук хвильової функції для воднеподібного атома (основні моменти). Поліном Лагера
19. Енергія електрона для воднеподібного атома. Квантові числа та хвильові функції електрона для воднеподібного атома.
20. Енергетичний спектр для воднеподібного атома (стала Рідберга-Рітца)
21. Спін електрона, експериментальні докази його існування. Оператор спіну електрона.
22. Спінкові функції. Повний момент кількості руху електрона.
23. Рівняння Шредінгера для системи багатьох мікрочастинок. Принцип тотожності мікрочастинок.
24. Симетричні та антисиметричні стани. Принцип Паулі. Хвильові функції для систем бозонів і ферміонів.
25. Атом гелію. Обмінна енергія.
26. Квантова механіка та періодична таблиця Менделєєва
27. Молекула водню. Природа хімічних сил. Міжмолекулярні дисперсійні сили.
28. Рівняння Шредінгера для твердого тіла. Рух електрона в періодичному полі.
29. Ефект Штарка. Ефект Зеємана.
30. Випромінювання електромагнітної енергії. Основний та збуджені стани квантової системи.
31. Квантова електроніка. Спонтанне та вимушене випромінювання.

### **Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):**

**Складено:** старший викладач, к.т.н. ЛУПИНА Борис Іванович

**Ухвалено** кафедрою мікроелектроніки (протокол № \_\_\_ від \_\_\_\_\_)

**Погоджено** Методичною комісією факультету<sup>1</sup> (протокол № \_\_ від \_\_\_\_\_)

---

<sup>1</sup> Методичною радою університету – для загальноуніверситетських дисциплін.