

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
**Государственное образовательное учреждение высшего профессионального
образования**
«Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Физический факультет
Кафедра теоретической физики

УТВЕРЖДАЮ
Декан физического факультета

_____ Марков К.А.

" ____ " _____ 2011 г.

Рабочая программа дисциплины
«ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ГЛАВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ»

**С подразделом: "Методы решения задачи рассеяния с использованием
высокопроизводительных вычислений"**

Направление подготовки:

011200 «Физика»

Квалификация (степень) выпускника:

Бакалавр

Форма обучения:

Очная

Нижегород
2011

1. Цели освоения дисциплины

Данная дисциплина относится к дисциплинам по выбору, преподается в седьмом семестре. **Цель спецкурса** состоит в изучении современных численных методов решения уравнения Шредингера и проведении конкретных расчетов простейших квантово-механических систем.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Учебные задачи курса включают освоение следующих фундаментальных положений:

- Квазиклассическое квантование;
- Спектральная задача и ее численное решение;
- Задача рассеяния в квантовой механике; алгоритм решения;
- Квантовая динамика;
- Алгоритмы решения уравнения Шредингера и их компьютерная реализация.

Курс опирается на материалы курсов теоретической механики и квантовой механики.

3. Требования к уровню освоения содержания дисциплины

В результате изучения студенты должны:

изучить современные численные методы решения уравнения Шредингера и научиться выполнять конкретные расчеты простейших квантово-механических систем.

4. Структура и содержание дисциплины «Дополнительные главы квантовой механики» 180 акад. ч. (5 зачетных единиц), из них 32ч лекции, 32 ч практика, 80ч – самост. работа студентов, 36ч - экзамен

Общая трудоемкость дисциплины составляет:

	Всего часов:			32	32	80	ч) (1-й семестр) Итого: 180- часов.
--	---------------------	--	--	----	----	----	--

5.1. Содержание разделов дисциплины

5.1.1. Квазиклассическое приближение. Спектр. Численная реализация метода квантования Бора-Зоммерфельда. (2 час)

5.1.2. Вариационный принцип. Уравнение Шредингера на решетке (дискретное уравнение Шредингера).

5.1.3. Аналитические методы решения дискретного уравнения Шредингера. Связанные состояния на решетке. Последовательная версия. (4 час). Метод фазовых функций. Осцилляционная теорема.

5.1.4. Численные методы решения уравнения Шредингера. Алгоритм численного решения уравнения Шредингера методом фазовых функций. (4 час). Метод Уилкинсона. (2 час).

5.1.5. Задача рассеяния в квантовой механике. S-матрица. Параллельная версия. Идея распараллеливания задачи рассеяния. Блочное разбиение. Алгоритм распараллеливания (6 час)

5.1.6. Квантовая динамика. Динамика волновых пакетов на решетке. Алгоритм численного решения динамической задачи. (4 час). Метод быстрого преобразования Фурье. (2 час)

5.1.7. Спектр двумерного уравнения Шредингера. Задача рассеяния в двумерной системе. (4 час). Метод численного решения трехмерного уравнения Шредингера. (2 час)

5.1.8. Электрон в периодическом поле. Вычисление функций Блоха и закона дисперсии электрона. (2 час)

6. Лабораторный практикум.

Практикум на компьютере. Решение базовых задач:

- Квазиклассическое приближение: Метод Бора-Зоммерфельда;
- Спектральная задача и ее численное решение;
- Задача рассеяния в квантовой механике. Алгоритм решения;
- Квантовая динамика.

7. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

7.1. Рекомендуемая литература.

1. *Х. Гулд, Я. Тобочник*, Компьютерное моделирование в физике, т. 1-2, М. Мир, 1990.
2. *С. Кунин*, Вычислительная физика, М.Мир, 1991.
3. *Р. Фейнман, Р. Лайтон, М. Сендс*, Фейнмановские лекции по физике, Вып. 9, гл. 11,14. М. Мир, 1977.
4. *S.E.Koonin, D.C. Meredith*, Computational Physics (Fortran version), Plenum, 1993.
5. *Н.Н.Калиткин*, Численные методы, М. Наука, 1978.
6. *С.К. Годунов, В.С. Рябенкий*, Введение в теорию разностных схем, Физматгиз, 1977.
7. В.П. Гергель. Курс лекций «Параллельное программирование», Н. Новгород, ННГУ, 2005.
8. В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. Параллельные вычисления, СПб: БХВ-Петербург, 2004 г.
9. М.П. Левин. Параллельное программирование с использованием OpenMP, М: Бином, 2008 г.

7. Вопросы для контроля

1. Квазиклассическое приближение. Спектр. Численная реализация метода квантования Бора-Зоммерфельда.
2. Вариационный принцип. Уравнение Шредингера на решетке (дискретное уравнение Шредингера).
3. Аналитические методы решения дискретного уравнения Шредингера. Связанные состояния на решетке.
4. Метод фазовых функций. Осцилляционная теорема.
5. Алгоритм численного решения уравнения Шредингера методом фазовых функций.
6. Метод Уилкинсона.
7. Задача рассеяния в квантовой механике. S-матрица. Задача рассеяния на решетке. Метод численного решения задачи рассеяния.
8. Квантовая динамика. Динамика волновых пакетов на решетке. Алгоритм численного решения динамической задачи.
9. Электрон в периодическом поле. Вычисление функций Блоха и закона дисперсии электрона.

Автор:

д.ф.-м.н. профессор кафедры теоретической физики _____

Сатанин А.М.

Рецензент:

к.ф.-м.н. доцент кафедры теоретической физики _____ Перов

А.А.

Заведующий кафедрой

теоретической физики д.ф.-м.н. профессор _____

Демиховский В.Я.

Программа одобрена на заседании Учебно-методической комиссии физического факультета ННГУ от _____ года, протокол № _____