методическая система обучения состоит из целевого, содержательного, процессуального, организационно-управленческого и результативно-оценочного функциональных компонентов.

Ключевые слова: *компетентностный подход, информатические компетенции, методическая система, кредитно-трансферная система организации обучения.*

Golovan M., Yatsenko V. Methodical system of credit and competency training to computer science in an economic university.

The article describes a model of methodical system of training to computer science in higher economic university on the basis of competence approach in terms of credit-transfer system training organization. Built methodical system of training consists of targeted, meaningful, procedural, organizational, managerial and results-evaluation of the functional components.

Key words: *competence approach, informatics competence, methodical system, credit-transfer system of training organization.*

УДК 372.8:378:53

А. М. Турінов,
О. М. Галдіна
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

ЗАСТОСУВАННЯ МАТЕМАТИЧНИХ ПАКЕТІВ ПРОГРАМ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ КВАНТОВОМЕХАНІЧНИХ ЗАДАЧ

При викладанні курсу «Квантова механіка» необхідно пам'ятати, що кількісна теорія мікросвіту потребує специфічного понятійного і математичного апарату. Майже кожне поняття подається за допомогою деякої математичної конструкції з розділів математичного й функціонального аналізу, для якісного розуміння якої необхідно самостійне розв'язання студентом на практиці конкретної фізичної задачі. В ході вивчення цього курсу студентами істотне значення має набуття навичок, а отже, засвоєння теоретичного матеріалу повинне супроводжуватись виконанням великої кількості різноманітних завдань. У тому числі розрахункових, із застосуванням таких математичних пакетів як Wolfram Mathematica, Maple, Mathcad. Виконання таких завдань спрямоване на краще засвоєння студентами матеріалу, поглиблює розуміння основних принципів та методів розв'язання задач квантової механіки і вирізняється максимальною наочністю, оскільки для будь-якого отриманого розв'язку можна побудувати графіки відповідних залежностей фізичних величин і, змінюючи вхідні параметри під умови кожної окремо розглядуваної задачі, самим змоделювати та простежити динаміку реальних фізичних процесів, що сприяє більшому розумінню самої їх сутності.

Ключові слова: *квантова механіка, рівняння Шредінгера, квантовий гармонічний осцилятор, стаціонарні стани, Wolfram Mathematica.*

Постановка проблеми. Розуміння фізики для пересічного студента зазвичай спирається на моделі класичної механіки, суттєвою складовою яких є просторові уявлення. Проте сучасна фізична картина світу є квантово-польовою. Класична механіка передбачає кількісний опис механічного руху або переміщення тіла в просторі. Але ця теорія застосовна не завжди. Якщо механічна дія фізичної системи за порядком величини збігається зі сталою Планка, то рух набуває інших якісних форм: зникає саме поняття траєкторії, з'являються принципові обмеження в точності вимірювання фізичних величин, у ряді випадків виникає дискретність значень деяких

фізичних величин, хвильовий характер руху частинок і т.д. [1]. Розміри цих систем надто малі. Такі системи утворюють мікросвіт. У свою чергу, системи, підпорядковані законам класичної механіки, утворюють макросвіт. Механіку мікросвіту традиційно називають квантовою. До об'єктів мікросвіту належать елементарні частинки (електрон, протон, нейтрон тощо), ядра, атоми, молекули і кристали. Кількісна теорія мікросвіту потребує специфічного понятійного й математичного апарату. Майже кожне поняття подається за допомогою деякої математичної конструкції з розділів математичного й функціонального аналізу, для якісного розуміння якої необхідно самостійне розв'язання студентом на практиці конкретної фізичної задачі, у тому числі з застосуванням ПЕОМ. Проектування інформаційних моделей фізичних процесів дозволяє студентам осмислити задачу як об'єкт або явище фізичної реальності, проаналізувати її з використанням різних математичних методів, розробити алгоритм і програму розв'язку на комп'ютері [2, с. 209].

Аналіз актуальних досліджень. Незважаючи на велику кількість повноцінних підручників із квантової механіки [1; 3-5], у студентів практично завжди виникають труднощі, пов'язані з опрацюванням матеріалу, який потрібно засвоїти. Тому під потреби кожного тематичного блоку даної дисципліни виникає необхідність у створенні навчально-методичних матеріалів, в яких компактно відображено найбільш важливі аспекти курсу, що допоможе студентам систематично ознайомитись з ним. Кожен такий блок повинен містити чималу добірку найбільш характерних задач з теми, що розглядається [6]: як таких, що можуть бути розв'язані безпосередньо, так і тих, що потребують математичних пакетів, застосування певних навичок програмування (написання окремих модулів і процедур під розв'язання задачі). Використання комп'ютерних технологій підвищує ефективність викладання фундаментальних дисциплін взагалі й фізики зокрема. Комп'ютерна графіка робить фізичні процеси більш наочними, а чисельні методи дозволяють змінювати фізичні параметри і тим самим досліджувати явище всебічно. Складні математичні моделі можуть бути побудовані як на основі систем звичайних диференційних рівнянь разом з початковими умовами (наприклад, задачі з підручників [7-8]), так і не мати достатньо простого аналітичного розв'язку, який студент може отримати на протязі однієї-двох пар (реальні практичні задачі [9]).

Мета статті. У ході вивчення курсу квантової механіки істотне значення має набуття навичок, а отже, засвоєння теоретичного матеріалу повинне супроводжуватись виконанням великої кількості різноманітних завдань. Окрім індивідуальних завдань, що складаються з добірки найбільш типових задач, це можуть – і мають – бути розрахункові завдання типу лабораторних робіт, що виконуються кожним студентом окремо із застосуванням математичних пакетів програм Mathematica, Maple, Mathcad тощо. Виконання таких завдань спрямоване на краще засвоєння студентами матеріалу, розуміння основних принципів та методів розв'язання задач квантової механіки і вирізняється максимальною наочністю, оскільки для будь-якого отриманого розв'язку можна побудувати графіки відповідних залежностей фізичних величин і, змінюючи вхідні параметри під потреби кожної окремо розглядуваної задачі, змоделювати та простежити динаміку реальних фізичних процесів, що сприяє більшому розумінню самої їх сутності. В даній роботі це демонструється на прикладі розгляду розв'язання рівняння Шредінгера для заданого виду потенціальної енергії. Перед студентами ставиться завдання проаналізувати фізичні властивості об'єктів задачі та провести її декомпозицію. Після отримання диференційних рівнянь аналізується їх розв'язок. Причому при детерміністичному завданні умов задачі розв'язок аналізується безпосередньо. У випадку неможливості або складності виведення диференційного

рівняння застосовується імітаційна модель фізичного явища, більш наочна та сприятлива для розуміння студентів [2].

Виклад основного матеріалу. Одним з фундаментальних понять квантової теорії є квантовий стан системи (мікрочастинки) [3]. Математично квантовий стан зображують за допомогою хвильової функції – деякої комплексної функції координат і часу $\psi(\zeta,t)$, квадрат модуля якої пропорційний густині ймовірності виявлення частинки в точці з координатою ζ. Хвильову функцію реальної фізичної системи в загальному випадку знаходять з розв'язку часового рівняння Шредінгера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\zeta,t)}{\partial t}=\hat{H}\psi(\zeta,t),$$

де $\hat{H}$ – гамільтоніан системи [3].

У квантовій механіці особлива роль відведена системам, гамільтоніан яких не залежить від часу явно: $\hat{H}(\zeta,t)=\hat{H}(\zeta)$. У цьому випадку в квантовій системі можуть бути реалізовані стаціонарні стани з хвильовими функціями вигляду

$$\psi_E(\zeta,t)=\psi_E(\zeta)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right].$$

Тут E і $\psi_E(\zeta)$ – відповідно власне значення і власна функція гамільтоніана $\hat{H}(\zeta)$, який у цьому випадку можна назвати оператором енергії:

$$\hat{H}(\zeta)\psi_E(\zeta)=E\psi_E(\zeta). \qquad (1)$$

Рівняння (1) має назву стаціонарного рівняння Шредінгера. На підставі цього рівняння стаціонарні стани визначають як стани з певними значеннями енергії. Енергетичний спектр стаціонарної системи залежить від характеру руху: за фінітного руху він дискретний, у випадку інфінітного – неперервний.

У тривимірному випадку рівняння (1) набуває такого вигляду:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_E(\mathbf{r})+U(\mathbf{r})\psi_E(\mathbf{r})=E\psi_E(\mathbf{r}), \qquad (2)$$

аналогічного для стійних хвиль у середовищі зі змінним показником заломлення [1]. Таким чином, стаціонарні стани можна порівнювати зі стійними хвилями в пружному середовищі.

Як приклад, розглянемо таку задачу: знайти хвильові функції та рівні енергії частинки масою m у полі виду

$$U(x)=V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2, \qquad a>0,\ x>0,$$

та показати, що енергетичний спектр співпадає із спектром осцилятора. Побудувати графіки хвильових функцій для перших трьох станів [7-9].

Стаціонарне рівняння Шредінгера в межах цієї одновимірної задачі набуває вигляду:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''+V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2\psi=E\psi. \qquad (3)$$

Дослідимо поведінку рівняння (3) у граничному випадку:

$$x\to\infty \quad\Rightarrow\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''+V_0\frac{x^2}{a^2}\psi=E\psi.$$

Тобто ми отримали рівняння квантового гармонічного осцилятора [4], а це означає, що хвильова функція у нескінченності буде поводитись як $\psi\sim \mathrm{e}^{-rx^2}$ $(r>0)$. Такий самий результат можна отримати, виходячи з того, що у нескінченності $E\to 0$.

З іншого боку, маємо:

$$x \to 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} x^2 \psi'' + V_0 a^2 \psi = E\psi \Rightarrow \psi \sim x^s .$$

Тут припускається, що $x^2\psi'' \sim x^s$ з огляду на обмеженість хвильової функції. Таким чином, розв'язок слід шукати у вигляді:

$$\psi(x) = x^s e^{-rx^2} \varphi(x).$$

Підставляючи цей вираз в рівняння Шредінгера (3), отримаємо:

$$(a\hbar x)^2 \varphi'' + 2a^2\hbar^2 x\left(s - 2rx^2\right)\varphi' +$$
$$+ \left\{2\left[2(a\hbar r)^2 - mV_0\right]x^4 + 2a^2\left[m(E + 2V_0) - \hbar^2 r(1+2s)\right]x^2 + a^2\left[\hbar^2 s(s-1) - 2mV_0\right]\right\}\varphi = 0.$$

Далі, якщо обрати r і s таким чином, щоб зникали внески від x^4 та x^0 в останньому доданку, ми отримаємо:

$$\begin{cases} r = \sqrt{v}/2a \\ s = \left(\sqrt{1 + 4a^2 v} + 1\right)/2 \end{cases}, \quad \text{де } v = 2\frac{m}{\hbar^2} V_0 .$$

Тоді рівняння Шредінгера зводиться до наступного вигляду:

$$x\varphi'' + 2\left(s - 2rx^2\right)\varphi' + 2\left[\varepsilon + v - r(1+2s)\right]x\varphi = 0, \text{ де } \varepsilon = \frac{m}{\hbar^2} E .$$

Щоб позбавитись від x^2, покладемо $x^2 = t/2r$, і, переходячи до нової змінної, отримаємо вираз:

$$t\varphi'' + (q - t)\varphi' - p\varphi = 0,$$

де введено такі позначення: $q = s + \frac{1}{2}$, $p = \frac{1}{2}\left[q - \frac{\varepsilon + v}{2r}\right]$.

Це – відоме рівняння Куммера [5], яке містить два лінійно незалежні розв'язки: вироджені гіпергеометричні функції Куммера M і Трикомі U (або вироджені гіпергеометричні функції першого та другого роду відповідно [5]). Отже, загальний розв'язок подається у вигляді:

$$\varphi(t) = c_1 M(p,q,t) + c_2 U(p,q,t);$$
$$\begin{cases} M(p,q,t) = 1 + \frac{p}{q} t + \frac{p(p+1)}{q(q+1)} \frac{t^2}{2!} + \ldots, \\ U(p,q,t) = \frac{\Gamma(1-q)}{\Gamma(p-q+1)} M(p,q,t) + \frac{\Gamma(q-1)}{\Gamma(p)} t^{1-q} M(p-q+1,\ 2-q,\ t). \end{cases}$$

Дослідимо тепер поведінку нашого розв'язку. Легко побачити, що при $q \le 0$ функції Куммера будуть невизначеними, але у нашому випадку це неможливо, оскільки $s > 0$ завжди. Асимптотичне розвинення цих функцій на дійсній вісі дає:

$$M(p,q,t) \sim \frac{\Gamma(q)}{\Gamma(p)} t^{p-q} e^t \left[1 + (q-p)(1-p)\frac{1}{t} + \ldots\right],$$
$$U(p,q,t) \sim \frac{1}{t^p}\left[1 + p(q-p-1)\frac{1}{t} + \ldots\right].$$

Таким чином, хвильова функція у нескінченності поводиться (ми виділяємо дві частини відповідно до функцій M і U) як:

$$\psi_M \sim \left(2rx^2\right)^{p-q} e^{2rx^2} x^s e^{-rx^2} \sim x^{2(p-q)+s} e^{rx^2} \sim e^{rx^2},$$
$$\psi_U \sim \left(2rx^2\right)^p x^s e^{-rx^2} \sim x^{2p+s} e^{-rx^2} \sim e^{-rx^2}.$$

Ми бачимо, що куммерівська частина хвильової функції розбіжна на нескінченності, тому покладемо $c_1 = 0$, і тоді хвильова функція дорівнює ψ_U. З іншого боку, коли $x \to 0$, ми повинні враховувати, що $s > 1$ завжди:

$$M(p,q,t) \approx 1 \;\Rightarrow\; \psi = x^s e^{-rx^2} U\left(p, q, 2rx^2\right) \to \frac{\Gamma(q-1)}{\Gamma(p)}\left(2rx^2\right)^{1-q} x^s \to \frac{\Gamma(q-1)}{\Gamma(p)} x^{s-2q+2},$$

$$\frac{\Gamma(q-1)}{\Gamma(p)} x^{s-2q+2} = \frac{\Gamma(q-1)}{\Gamma(p)} x^{1-s}.$$

Тому хвильова функція буде завжди розбіжною поблизу нуля, за винятком випадків $\Gamma(q-1) = 0$ або $\Gamma(p) \to \infty$. Але оскільки $s > 1$, то $q > 3/2$ – і залишається тільки другий випадок. Отже, щоб хвильова функція була коректно визначена, необхідно виконання умови $p = -n$, $n \in \mathrm{N}$, де N – множина натуральних чисел. А це означає, що енергія квантується і дорівнює:

$$\varepsilon = \frac{m}{\hbar^2} E_n = 2r(q+2n) - v \quad \Rightarrow \quad E_n = 2\left[2(1+2n)\gamma - V_0 + \sqrt{V_0^2 + \gamma^2}\right],$$

$$\gamma = \frac{\hbar}{2a}\sqrt{\frac{V_0}{2m}}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Звідси ми бачимо, що $\Delta E = 8\gamma$; також очевидно, що енергія основного стану E_0 не є нульовою. Це робить ситуацію доволі схожою на квантовий гармонічний осцилятор [4], до того ж значення енергії завжди додатне.

Також слід відмітити, що розвинення в ряд для функції Куммера стає скінченним, якщо $p = -n$. У цьому випадку воно стає поліноміальним, а саме може бути виражене за допомогою узагальнених приєднаних поліномів Лагерра [5]:

$$M(-n,q,t) = n!\frac{\Gamma(q)}{\Gamma(q+n)} L_n^{q-1}(t) \quad \Rightarrow \quad U(-n,q,t) = (-1)^n n! L_n^{q-1}(t),$$

де $L_n^q(t) = \dfrac{e^t}{n! t^q}\dfrac{d^n}{dt^n}\left(\dfrac{t^{n+q}}{e^t}\right)$.

Тоді ненормовані власні стани набувають вигляду :

$$\psi_n(x) = c_2(-1)^n n! x^s e^{-rx^2} L_n^{s-1/2}\left(2rx^2\right).$$

Щоб пронормувати цю хвильову функцію, використаємо відомий [5] результат нормування поліномів Лагерра, що мають вагову функцію t^q / e^t:

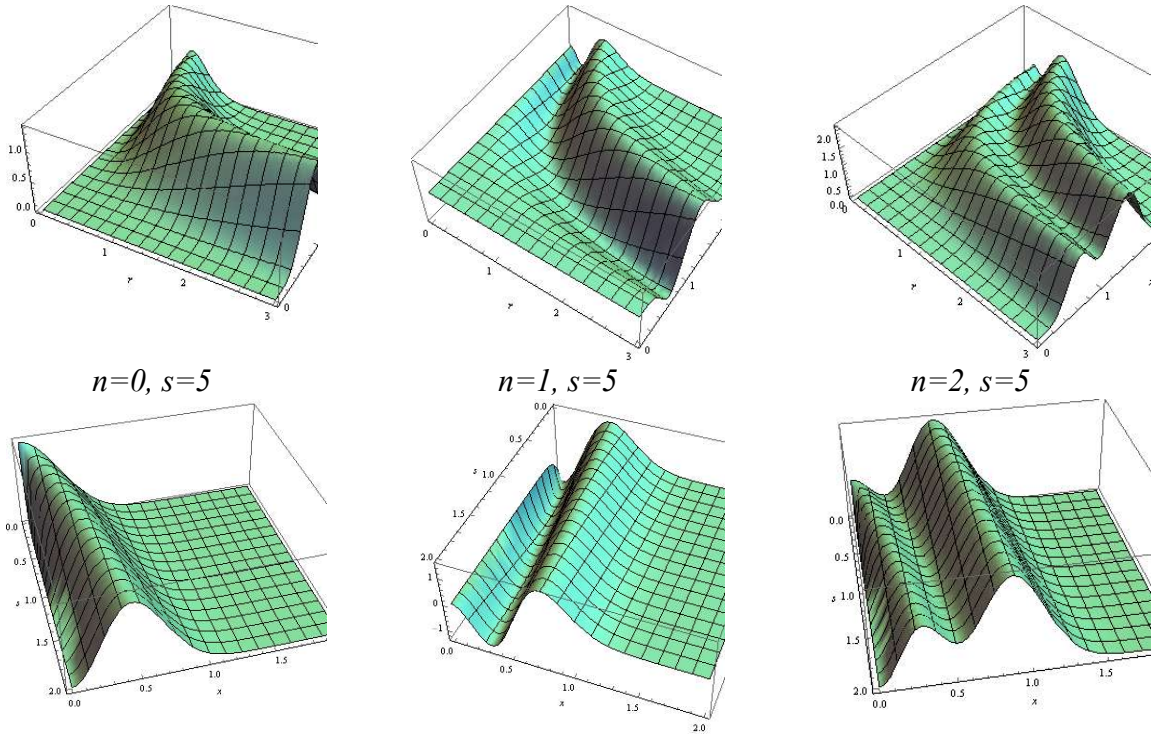
$$\|\psi_n\|^2 = 1 = c_2^2 (n!)^2 \int_0^\infty x^{2s} e^{-2rx^2}\left(L_n^{s-\frac{1}{2}}\left(2rx^2\right)\right)^2 dx = \left\{\begin{matrix} t = 2rx^2 \\ dx = \dfrac{dt}{\sqrt{8rt}} \\ s - 1/2 = k \end{matrix}\right\} = \frac{c_2^2 (n!)^2}{2(2r)^{s+1/2}}\left\|L_n^k(t)\right\|^2,$$

де $\left\|L_n^k(t)\right\|^2 = \int_0^\infty \dfrac{t^k}{e^t}\left[L_n^k(t)\right]^2 dt = \dfrac{\Gamma(k+n+1)}{n!}$. Звідси $c_2 = \sqrt{\dfrac{2(2r)^q}{n!\Gamma(n+q)}}$.

Отже, нормована хвильова функція остаточно набуває вигляду:

$$\psi_n(x) = (-1)^n \sqrt{\frac{2n!(2r)^q}{\Gamma(n+q)}} \frac{x^s}{e^{rx^2}} L_n^{q-1}\left(2rx^2\right).$$

Нижче, на рис. 1, подано графіки хвильових функцій для цієї системи, побудовані з використанням Wolfram Mathematica, для основного (*n=0*) та перших двох збуджених (*n=1* та *n=2*) станів, з яких стає очевидним фізичний сенс хвильової функції як «хвилі ймовірності.



n=0, s=5 *n=1, s=5* *n=2, s=5*

n=0, r=5 *n=1, r=5* *n=2, r=5*

Рис. 1. Хвильова функція основного та перших двох збуджених станів

Застосування матпакету для розв'язання задачі має велике значення. З одного боку, це допомога у знаходженні розв'язків будь-яких диференційних рівнянь, розв'язання яких у квадратурах пов'язано з певними труднощами або взагалі неможливе. З іншого боку – це графічна побудова отриманих розв'язків. Саме графіки дозволяють провести якісний аналіз отриманих результатів. В розглянутій задачі вони дозволяють виділити області найбільш ймовірного знаходження частинки, яка може перебувати в різних енергетичних станах. Також матпакет дозволяє провести якісний аналіз залежності знайдених областей від початкових умов.

Необхідно підкреслити, що завдання такого типу, як щойно розглянуте, є визначальними для розуміння квантової механіки в цілому і для розуміння задач на власні функції та власні значення операторів фізичних величин зокрема. Виконання цих завдань надає студентам практичного досвіду у відшуканні хвильових функцій та енергетичного спектру та усвідомленні їх фізичного сенсу. Моделювання асимптотичної поведінки розв'язку із застосуванням математичних пакетів програм та дослідження його в граничних випадках додатково надає студентам необхідні навички з фізичного програмування.

Комплекс подібних до розглянутої в цій роботі задач, з кожної базової теми курсу «Квантова механіка», формує цикл розрахунково-лабораторних робіт з цієї дисципліни, які не тільки розвивають навички математичного моделювання у студентів, а й також призводять до необхідності вміти проводити якісний аналіз отриманих розв'язків, наочно демонструючи, як проявляють себе фундаментальні закони квантового миру.

Висновки та перспективи подальших наукових досліджень. Виконання розрахункових завдань на комп'ютері та побудова моделей фізичних явищ – сучасний засіб формування наукового світогляду студентів. Комп'ютерне моделювання сприяє розвитку формально-логічної й операційної форми мислення і дозволяє творчо переосмислити сучасні методи наукового пізнання, що безперечно сприяє залученню студентів до наукових досліджень. Можливості методу математичного та

комп'ютерного моделювання слід розкривати студентам у тісному зв'язку з вивченням фактичного матеріалу, роблячи його, таким чином, наочним, показувати його використання там, де з різних причин не можна застосовувати інші методи. Вміння створювати фізичні моделі в рамках поставленої задачі необхідне кожному спеціалісту, навіть якщо він не буде згодом займатися фізичними й інженерними задачами. Тому зацікавленість студентів у навчанні фізики в цілому та окремих її розділів за допомогою комп'ютерних програм є високою. Тим більше, коли йдеться про квантову механіку – розділ теоретичної фізики, який розкриває саму глибинну сутність сучасної фізичної картини світу. Розроблення комплексу лабораторних та розрахункових робіт з квантової механіки допоможе студентам, окрім кращого оволодіння практичними навичками програмування та розв'язання задач, зокрема за допомогою математичних пакетів, глибше зрозуміти підтекст того чи іншого із спостережуваних явищ, що лягли в основу принципів квантової механіки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки / Ігор Юхновський. – К.: Либідь, 2002. – 390 с.

2. Лотюк Ю.Г. Два підходи до вивчення моделей механічних систем / Юрій Лотюк, Олексій Щодро // Теорія та методика навчання математики, фізики, інформатики: Зб. наук. праць. – Кривий Ріг, 2005. – Вип. V, т. 2. – С. 209-214.

3. Давыдов А.С. Квантовая механика / Александр Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 704 с.

4. Вакарчук І.О. Квантова механіка / Іван Вакарчук. – Л.: Львів. нац. ун-т ім. І. Франка, 2004. – 784 с.

5. Мессиа А. Квантовая механика: в 2 т. / Альберт Мессиа. – М.: Наука, 1978. – Т. 1. – 480 с.; Т. 2. – 584 с.

6. Турінов А.М. Посібник до вивчення курсу «Квантова механіка»: підручник для педагогів / Андрій Турінов. – Дніпропетровськ: РВВ ДНУ, 2013. – 88 с.

7. Гольдман И.И. Сборник задач по квантовой механике / Иосиф Гольдман, Владимир Кривченков. – М.: Гостехиздат, 1957. – 275 с.

8. Галицкий В.М. Задачи по квантовой механике / Виктор Галицкий, Борис Карнаков, Владимир Коган. – М.: Наука, 1992. – 880 с.

9. Флюгге З. Задачи по квантовой механике: в 2 т. / Зигфрид Флюгге. – М.: Мир. – 1974. – Т. 1. – 341 с.

Надійшла до редакції 06.05.2015

Туринов А.Н., Галдина А.Н. Применение математических пакетов программ для решения квантовомеханических задач.

При чтении курса «Квантовая механика» нельзя забывать о том, что, количественная теория микромира требует специфического понятийного и математического аппарата. Практически каждое понятие представляется с помощью некоторой математической конструкции из разделов математического и функционального анализа, для качественного понимания которой необходимо самостоятельное решение студентом на практике конкретной физической задачи. В ходе изучения этого курса студентами существенное значение имеет приобретение навыков, а, следовательно, усвоение теоретического материала должно сопровождаться выполнением большого количества разнообразных заданий. В том числе расчетных с применением таких математических пакетов как Wolfram Mathematica, Maple, Mathcad. Выполнение таких заданий направлено на лучшее усвоение студентами материала, более глубокое понимание основных

принципов и методов решения задач квантовой механики и отличается максимальной наглядностью, поскольку для любого полученного решения можно построить графики соответствующих зависимостей физических величин и, изменяя входящие параметры под условия каждой отдельно рассматриваемой задачи, самим смоделировать и проследить динамику реальных физических процессов, что благоприятствует большему пониманию самой их сути.

Ключевые слова: *квантовая механика, уравнение Шредингера, квантовый гармонический осциллятор, стационарные состояния, Wolfram Mathematica.*

Turinov A., Galdina A. Application of math packages to solving quantum-mechanical problems.

In the process of lecturing in Quantum Mechanics, one ought to bear in mind that quantitative theory of the microworld needs specific conceptual and mathematical tools. Almost all definitions are presented by means of some mathematical constructions from the field of mathematical and functional analysis. For qualitative understanding of these constructions it is necessary to solve certain physical problem in practice within student self-directed learning. In the course of Quantum Mechanics the skill acquisition is essential for students. Thus, digestion of theoretical material must be accompanied by accomplishment of large number of various tasks, including computing ones with applying such math packages as Wolfram Mathematica, Maple, Mathcad. Accomplishment of such tasks is oriented to better learn of material, further understanding of main principles and problem-solving techniques of Quantum Mechanics and is notable by maximum visualization, because for any obtained solution one can plot corresponding dependences for physical quantities. Also, varying input parameters according to each considered problem situation, one can simulate and trace a dynamics of real physical processes, and this contributes to a better understanding of physics, its fundamental nature.

Key words: *quantum mechanics, Schrödinger equation, quantum harmonic oscillator, stationary states, Wolfram Mathematica.*

УДК 372.853

Н. Ю. Філоненко
ДЗ «Дніпропетровська медична академія»

ОСОБЛИВОСТІ ВИКЛАДАННЯ КУРСУ «КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ФАРМАЦІЇ»

Статтю присвячено одній із фундаментальних дисциплін – курсу «Комп'ютерне моделювання в фармації», що з поточного навчального року є обов'язковою в Дніпропетровській медичній академії для фармацевтичних спеціальностей. В статті наводяться ключові моменти викладання матеріалу, починаючи з розділу «Математичне моделювання кінетики хімічних реакцій», присвяченому розгляду перебігу хімічних реакцій і можливості управління хімічним перетворенням. Наступний розділ, «Фармакокінетика медичних препаратів», дозволяє проводити моделювання процесів, пов'язаних з вмістом препарату в крові, подальшим його всмоктуванням в лімфу та виведенням з організму. Достатньо часу приділяється питанню про ріст клітин та популяцій. Отримані результати дають змогу визначити дозування препарату та використовувати його за медичними показниками в терапії. Слід звернути особливу увагу на запропоновані методи, бо вони є сучасними та використовуються в фармації.