

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,  
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Квантовая динамика открытых систем**

**Уровень высшего образования:**

Специалитет

---

**Направление подготовки (специальность):**

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**

Физическая химия

**Форма обучения:**

очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

---

1. Наименование дисциплины (модуля) **Квантовая динамика открытых систем**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<b>ОПК-1.С.</b> Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	<b>Уметь</b> анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, <b>Уметь:</b> самостоятельно составлять план исследования <b>Владеть</b> навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
<b>СПК-1.С.</b> Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	<b>Знать:</b> теоретические основы квантовой динамики открытых систем <b>Уметь:</b> применить полученные в рамках курса знания при анализе научной информации <b>Владеть:</b> навыками применения математического аппарата методов классической и квантовой динамики открытых молекулярных систем.
<b>СПК-4.С.</b> Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	<b>Знать:</b> возможности и ограничения расчетных методов квантовой динамики при решении практических задач <b>Уметь:</b> определять допустимость тех или иных приближений для решения задач квантовой динамики открытых систем. <b>Владеть:</b> навыками построения моделей квантовой и классической динамики в больших системах с учетом релаксационных эффектов в соответствии с физико-химической природой рассматриваемых систем и описываемых процессов в них.

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

*Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 68 часа составляет самостоятельная работа студента.*

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия

Обучающийся должен

**Знать:** основы классической и квантовой механики; основы математического анализа; теорию функций комплексной переменной, теорию матриц, теорию линейных операторов в гильбертовых пространствах

**Уметь:** дифференцировать, интегрировать, решать дифференциальные уравнения квантовой механики, диагонализировать матрицы

**Владеть:** методами математического анализа, методами решения дифференциальных уравнений, матричной алгеброй

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.:	Всего
1. Время в классической механике. Уравнения Лагранжа и Гамильтона.	9	2	2				4	5		5
2. Время в квантовой механике. Соотношение неопределенностей	7		2				2	5		5

«энергия-время». Интеграл по траекториям Фейнмана.										
3. Уравнения квантовой динамики для волновой функции и матрицы плотности. Представления Шредингера, Гейзенберга и взаимодействия.	9	2	2				4	5		5
4. Квантовая динамика гармонического осциллятора. Когерентные состояния. Колебательные волновые пакеты в молекулах.	7		2				2	5		5
5. Квазиклассические методы в квантовой динамике.	7	2					2	5		5
6. Природа необратимости в классической механике. Теорема о возвращении. Природа необратимости в квантовой механике. Квантовый аналог теоремы о возвращении.	7	2					2	5		5
7. Стохастическая сила. Уравнение Ланжевена. Связь флуктуаций и диссипации. Вероятностное представление стохастических процессов. Уравнение Фоккера-Планка.	9	2	2				4	5		5
8. Наблюдаемая система и термостат: разделение	9	2	2				4	5		5

переменных в гамильтониане и матрице плотности. Спектральная функция.										
9. Иерархия приближений в уравнениях диссипативной квантовой динамики.	8	2					2	6		6
10. Теория Редфилда. Master equation.	9	2	2				4	5		5
11. Точно решаемые модели в теории Редфилда - гармонический осциллятор.	8		2				2	6		6
12. Точно решаемые модели в теории Редфилда - релаксация спина	8		2				2	6		6
13. Немарковская квантовая динамика.	9	2		2			4	5		5
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	2					2	2			
<b>Итого</b>	<b>108</b>	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>2</b>		<b>2</b>	<b>40</b>	<b>68</b>		<b>68</b>

### 9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

### 10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляется программа курса, план занятий, справочные материалы, содержащие длинные выкладки и выводы наиболее сложных формул, домашние задания по материалам лекций.

#### 11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

#### Основная литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. – 3-е изд., испр. – М. : Наука, 1973.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – 4-е изд., испр. – М. : Наука, 1989.
3. Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения. – М.: Мир, 1983.

#### Дополнительная литература

1. Дирак П. Принципы квантовой механики. – М.: Наука, 1979.
2. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. – М.: Мир, 1968.
3. Клаудер Дж., Сударшан Э. Основы квантовой оптики. – М.: Мир, 1970.
4. The Physics and Chemistry of Wave Packets (ed. J.Yeazell and T. Uzer). – Wiley, New York, 2000.
5. May V., Kuhn O. Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems. – Wiley, 2012.

#### 12. Язык преподавания – русский

#### 13. Преподаватели:

1. профессор., д.ф.-м.н. Еремин Вадим Владимирович, кафедра физической химии химического факультета МГУ, [vadim@edum.chem.msu.ru](mailto:vadim@edum.chem.msu.ru)
2. доцент, к.ф.-м.н. Глебов Илья Олегович, кафедра физической химии химического факультета МГУ, [glebov\\_io@phys.chem.msu.ru](mailto:glebov_io@phys.chem.msu.ru)
3. ст. преподаватель, к.ф.-м.н. Белов Александр Сергеевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, [asbelov@phys.chem.msu.ru](mailto:asbelov@phys.chem.msu.ru)
4. с.н.с., к.ф.-м.н. Поддубный Владимир Владимирович, кафедра физической химии химического факультета МГУ, [vvpoddubnyu@gmail.com](mailto:vvpoddubnyu@gmail.com)

#### Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

**Вопросы для зачета:**

1. Классические уравнения движения в форме Лагранжа и Гамильтона. Действие как функция координат и времени.
2. Соотношение неопределенностей «энергия-время».
3. Интеграл по траекториям Фейнмана – временной подход к квантовой механике.
4. Квантовомеханическая амплитуда перехода для одномерного свободного движения. Вывод соотношения де Бройля и формулы Планка.
5. Временное уравнение Шредингера. Стационарные состояния и волновые пакеты.
6. Матрица плотности и ее связь с волновой функцией. Уравнение эволюции матрицы плотности.
7. Временные уравнения в представлениях Гейзенберга и взаимодействия.
8. Амплитуда перехода как ядро оператора эволюции (функция Грина). Выражение функции Грина через собственные функции гамильтониана.
9. Теорема Эренфеста о динамике средних значений и ее применение к гармоническому осциллятору.
10. Динамика гауссова волнового пакета в квадратичном потенциале.
11. Когерентные состояния и их свойства. Оператор сдвига.
12. Формирование и динамика колебательных волновых пакетов в двухатомных молекулах. Связь формы и спектра пакета со свойствами импульса накачки.
13. Теоремы о возвратах в квантовой и классической механике.
14. Модель Биксона-Джортнера.
15. Понятие стохастической силы. Уравнение Ланжевена. Решение уравнения Ланжевена для частицы в вязкой среде.
16. Автокорреляционные функции скорости, координаты и силы во временном и частотном представлениях. Теорема Винера-Хинчина.
17. Плотность вероятности в пространстве координат и скоростей. Непрерывность плотности вероятности. Уравнение Фоккера-Планка.
18. Разбиение система-термостат для Гамильтониана и матрицы плотности. Уравнение динамики в приближении равновесности термостата.
19. Марковское приближение, автокорреляционная функция, время релаксации.
20. Основное уравнение теории Редфилда, секулярное приближение.
21. Релаксация спина в магнитном поле. Уравнения Блоха. Времена продольной и поперечной релаксации.

**Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения**

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по				дисциплине (модулю)
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p><b>Знать:</b> теоретические основы квантовой динамики открытых систем</p> <p><b>Знать:</b> возможности и ограничения расчетных методов квантовой динамики при решении практических задач</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<p><b>Уметь</b> анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,</p> <p><b>Уметь:</b> самостоятельно составлять план исследования</p> <p><b>Уметь:</b> применить полученные в рамках курса знания при анализе научной информации</p> <p><b>Уметь:</b> определять допустимость тех или иных приближений для решения задач квантовой динамики открытых систем</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<p><b>Владеть</b> навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p><b>Владеть:</b> навыками применения математического аппарата методов классической и квантовой динамики открытых молекулярных систем.</p> <p><b>Владеть:</b> навыками построения моделей квантовой и классической динамики в больших системах с учетом релаксационных эффектов в соответствии с физико-химической природой рассматриваемых систем и описываемых процессов в них.</p>	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете