

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

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«31» мая 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Теоретическая и квантовая механика

Уровень высшего образования:

Бакалавриат

Направление подготовки (специальность):

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Общая химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №2 от 14.05.2021)

Москва 2021

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом (ФГОС) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.03.01 «Химия» (уровень бакалавриата) в редакции приказа Минобрнауки России от 17 июля 2017 г.

Год (годы) приема на обучение

2021/2022

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: Блок ФДб, модуль "Физика".

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-4.Б Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4.Б.3 Предлагает математические и (или) физические модели химических процессов	Знать: основные методы теоретической механики Знать: стандартные подходы к решению простейших квантово-механических задач Уметь: предложить способы теоретического описания основных свойств молекулярных систем Уметь: строить аналитические модели элементарных механических систем Владеть: навыками решения простейших квантово-механических задач

3. 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 часов, из которых 74 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 34 часа составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

Знать: основы классической механики, теории электромагнетизма, математического анализа и линейной алгебры

Уметь: анализировать современную учебную литературу в области математики, теоретической механики, классической электродинамики и квантовой механики

Владеть: применяемыми в физике математическими методами, базовыми представлениями о механике Ньютона, классической теории электромагнетизма

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма пропе-	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем)	Самостоятельная работа

журочной аттестации по дисциплине (модулю)		давателем), часы из них					та 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
Тема 1.	4	2	2				4			
Тема 2.	6	2	2				4	2		2
Тема 3.	6	2	2				4	2		2
Тема 4.	6	2	2				4	2		2
Тема 5.	6	2	2				4	2		2
Тема 6.	6	2	2				4	2		2
Тема 7.	6	2	2				4	2		2
Тема 8.	6	2	2				4	2		2
Тема 9.	6	2	2				4	2		2
Тема 10.	6	2	2				4	2		2
Тема 11.	6	2	2				4	2		2

Тема 12.	6	2	2				4	2		2
Тема 13.	6	2	2				4	2		2
Тема 14.	6	2	2				4	2		2
Тема 15.	6	2	2				4	2		2
Тема 16.	6	2	2				4	2		2
Тема 17.	6	2	2				4	2		2
Тема 18.	6	2	2				4	2		2
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	108	36	36			2	74	34		34

Содержание тем:

Тема 1. Основные положения ньютоновой механики для систем материальных точек. Законы сохранения.

Тема 2. Системы со связями и их классификация. Принцип Даламбера. Лагранжев формализм классической механики. Обобщенный потенциал.

Тема 3. Формализм Гамильтона. Различные варианты вариационных принципов классической механики. Канонические преобразования, производящие функции.

Тема 4. Скобки Пуассона и их связь с уравнениями движения. Инварианты классической механики. Теорема Лиувилля.

Тема 5. Формализм Гамильтона-Якоби. Переменные "действие-угол".

Тема 6. Задача двух тел. Задача Кеплера. Задача рассеяния, формула Резерфорда.

Тема 7. Предпосылки возникновения квантовой механики. Проблема излучения черного тела. Модель атома водорода. Корпускулярно-волновой дуализм.

Тема 8. Некоторые сведения о математическом формализме квантовой механики. Линейные пространства и линейные операторы. Гильбертово пространство. Матрицы операторов и преобразования базиса. Самосопряженные операторы. Собственные функции/вектора. Коммутирующие операторы и общие системы собственных функций. Дельта-функция.

Тема 9. Основные положения квантовой механики. Волновая функция. Наблюдаемые величины и их значения. Принцип неопределенности. Принцип суперпозиции и редукция состояний. Описание подсистем с помощью матриц плотности. Обозначения Дирака.

Тема 10. Оператор импульса. Нестационарное уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера и решения нестационарного уравнения в стационарном случае. Классический предел квантовой механики. Соотношения неопределенности. Динамика наблюдаемых величин, теорема Эренфеста.

Тема 11. Задача о двухуровневой системе, осцилляции Раби. Динамика в терминах матрицы плотности, уравнение Лиувилля-фон-Неймана. Представление Гейзенберга и представление взаимодействия. Импульсное представление.

Тема 12. Общие подходы к приближенному решению уравнения Шредингера. Вариационный принцип и линейный вариационный метод. Стационарная и нестационарная теория возмущений. Золотое правило Ферми.

Тема 13. Одномерные стационарные задачи. Общие свойства решений. Свободное движение. Потенциальная яма с бесконечными и конечными стенками. Одномерная задача рассеяния, туннелирование через потенциальный барьер. Метастабильные состояния.

Тема 14. Задача об одномерном гармоническом осцилляторе. Техника лестничных операторов. Многомерный гармонический осциллятор, сведение к одномерным задачам. Осциллятор Морзе.

Тема 15. Оператор момента импульса. Лестничные операторы в теории операторов момента. Система собственных состояний оператора момента, орбитальное и магнитное квантовое число. Сферические гармоники.

Тема 16. Сложение моментов. Коэффициенты Клебша-Гордана. Свойства матриц операторов в базисе собственных состояний момента. Теорема Вигнера-Эккарта.

Тема 17. Трехмерные задачи в центральном поле. Свободное движение. Потенциальная яма с бесконечными стенками. Задача о водородоподобном атоме.

Тема 18. Понятие о спине. Матрицы Паули. Принцип неразличимости эквивалентных частиц. Бозоны и фермионы. Многочастичные волновые функции для бозонных и фермионных систем. Принцип Паули. Волновые функции различной мультиплетности для многоэлектронных систем. Простейшая модель основного состояния двухэлектронного атома.

6. Образовательные технологии:

- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

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

Студентам предоставляется программа курса, план занятий, перечень домашних заданий, лекционные материалы и примеры решения задач. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы.

8. Ресурсное обеспечение:

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Г. Голдстейн, Ч.Пул, Д. Сафко. Классическая механика. М.: Ижевск: Инст. комп. иссл., 2012.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Механика. М.: Физматлит, 2017.
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2017.
4. А. Мессиа. Квантовая механика (в 2-х томах). М.: Наука, 1978.
5. П.А. Форш. Задачи по теоретической механике для химиков. М.: МГУ, 2010.
6. Л.А. Головань, Е.А. Константинова, П.А. Форш. Задачи по теоретической механике для химиков. М.: МГУ, 2010.

Дополнительная литература

1. Ф.Р. Гантмахер. Лекции по аналитической механике. М.: Физматлит, 1966
2. Г.Л. Коткин, В.Г. Сербо. Сборник задач по классической механике. М.: Ижевск: Инст. комп. иссл., 2001.
3. К. Коэн-Таннуджи, Б. Диу, Ф. Лалоз. Квантовая механика (в 2-х томах). М.: УРСС: ЛЕНАНД, 2015.
4. П.В. Елютин, В.Д. Кривченков. Квантовая механика с задачами. М.: Физматлит, 2000.

Специальных требований к аудиторным занятиям нет.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

1. д.ф.-м.н., в.н.с. Иоффе Илья Нафтольевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, ioffe@phys.chem.msu.ru, тел. (495) 939-12-40
2. к.ф.-м.н., н.с. Мазалева Ольга Николаевна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, mazaleva.olya@gmail.com, тел. (495) 939-53-96

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. В ходе зачета проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Вопросы для зачета

1. Законы Ньютона. Законы сохранения в ньютоновой механике.
2. Задачи со связями, типы связей. Принцип Даламбера.
3. Формализм Лагранжа для систем с идеальными голономными связями.
4. Уравнения Гамильтона и Рауса. Циклические координаты.
5. Обобщенный потенциал. Функции Лагранжа и Гамильтона в задачах классической электродинамики.
6. Варианты вариационных принципов классической механики.
7. Канонические преобразования: подход на основе производящих функций и симплектический подход.
8. Канонические инварианты. Теорема Лиувилля.
9. Запись уравнений движения и уравнений вращения системных векторов с помощью скобок Пуассона.
10. Подход Гамильтона-Якоби.
11. Переменные "действие-угол" для периодического движения.
12. Задача о гармоническом осцилляторе в формализме Гамильтона и Гамильтона-Якоби.
13. Интегралы движения и общие свойства решений в задаче двух тел. Закон Кеплера. Теорема о вириале.
14. Виды траекторий в задаче Кеплера.
15. Рассеяние на кулоновском потенциале. Формула Резерфорда.
16. Проблемы классического описания излучения абсолютно черного тела и задачи об атоме водорода.
17. Корпускулярно-волновой дуализм. Эффект Комптона. Соотношения де Бройля. Волновые пакеты.
18. Линейные пространства и линейные операторы. Собственные функции/вектора. Гильбертово пространство. Матричное представление операторов.
19. Самосопряженные и унитарные операторы. Коммутирующие операторы и общие системы собственных векторов.
20. Дельта-функция.
21. Постулаты квантовой механики. Волновые функции. Принцип неопределенности. Принцип суперпозиции. Наблюдаемые величины и измерения.
22. Обозначения Дирака.
23. Описание состояний подсистем с помощью матрицы плотности.
24. Оператор импульса. Гамильтониан. Нестационарное уравнение Шредингера.
25. Классический предел для нестационарного уравнения Шредингера.

26. Стационарное уравнение Шредингера и решение нестационарной задачи со стационарным гамильтонианом. Динамика наблюдаемых, уравнение Эренфеста.
27. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Энергетическая ширина состояний.
28. Эволюция двухуровневой системы в переменном электрическом поле.
29. Альтернативные описания нестационарной задачи. Уравнение Лиувилля-фон Неймана. Представление Гейзенберга и представление взаимодействия.
30. Координатное и импульсное представления.
31. Вариационный принцип и оценки сверху энергии собственных состояний.
32. Стационарная теория возмущений в невырожденном и вырожденном случае.
33. Нестационарная теория возмущений, оценки для двухуровневой системы, золотое правило Ферми.
34. Общие свойства одномерного движения в квантовой механике.
35. Собственные состояния свободной частицы и частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечными стенками.
36. Задача о прямоугольной потенциальной яме конечной высоты.
37. Прохождение волны через прямоугольный потенциальный барьер. Туннелирование.
38. Метастабильные состояния. Подход Гамова. Уширение уровней.
39. Задача о гармоническом осцилляторе.
40. Техника лестничных операторов в задаче о гармоническом осцилляторе.
41. Многомерный гармонический осциллятор, сведение к одномерным задачам.
42. Задача об осцилляторе Морзе.
43. Оператор момента импульса. Коммутационные соотношения для проекций момента.
44. Построение собственных функций момента с помощью техники лестничных операторов.
45. Сферические гармоники и гармонические полиномы.
46. Свойства матриц скалярных и векторных операторов в базисе собственных функций момента.
47. Сложение моментов.
48. Задачи в центральном поле. Описание свободного движения и изотропного трехмерного осциллятора с использованием собственных состояний момента.
49. Отделение центра масс в задаче двух тел.
50. Связанные и несвязанные состояния водородоподобного атома.
51. Спин. Матрицы Паули.
52. Особенности описания многочастичных бозонных и фермионных систем. Принцип Паули.
53. Пространственно-спиновые волновые функции многоэлектронных систем для различных мультиплетностей. Обменное взаимодействие. Правило Хунда.
54. Простая модель основного состояния атома гелия с некоррелированным движением электронов.

Примеры практических заданий к зачету

1. Предложить удобные обобщенные координаты и записать уравнения Лагранжа для предложенной модельной системы.
2. Записать функцию Гамильтона и уравнения Гамильтона для предложенной модельной системы.
3. Указать условия ограниченного движения в предложенном потенциале центральной силы.
4. Указать качественный вид волновой функции для предложенного вида стационарного одномерного потенциала и различных значений энергии.
5. Указать вид поправок первого и второго порядка по теории возмущений для задачи о бесконечной потенциальной яме для предложенного характера деформации дна ямы.
6. Найти собственные частоты для предложенной задачи о гармоническом осцилляторе с малым числом измерений.

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 \ Результат	2	3	4	5
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 непринципиального 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
Знать: способы описания классических систем на языке формализмов Лагранжа и Гамильтона Знать: основные понятия и положения квантовой механики	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете

<p>Знать: способы точного и приближенного квантово-механического описания различных систем</p> <p>Знать: описание базовых точно решаемых моделей в квантовой механике</p>	
<p>Уметь: оптимально выбирать системы обобщенных координат для описания различных классических систем в терминах формализмов Лагранжа и Гамильтона</p> <p>Уметь: предсказывать качественные особенности решений базовых задач классической и квантовой механики</p> <p>Уметь: предлагать оптимальный подход к приближенному описанию различных квантово-механических систем исходя из известных точно решаемых моделей</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть: базовыми подходами к решению дифференциальных уравнений, возникающих в задачах классической и квантовой механики</p> <p>Владеть: основами алгебр операторов, используемых в решениях базовых задач квантовой механики</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете, зачетные практические задания</p>