

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В.ЛОМОНОСОВА»

ВЫСШАЯ ШКОЛА УПРАВЛЕНИЯ И ИННОВАЦИЙ

Утверждено
на заседании Совета факультета
«Высшая школа управления и инноваций»
Протокол № от «05» 04. 2016 г.
Председатель Совета



В.В. Печковская

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Основы квантовой физики и квантовых вычислений

Направление подготовки 27.03.05. «Инноватика»
Квалификация выпускника Бакалавр

Составители: д.ф.-м.н. Тютерев В.Г.

Рецензенты:

1. Харченко Сергей Николаевич, д.ф.-м.н., профессор АНХ при правительстве РФ.
2. Морозова Мария Андреевна, Директор по оценке и развитию персонала АФК «Система».

«Основы квантовой физики и квантовых вычислений», учебная дисциплина относится к естественно-научному блоку Вариативной части учебного плана.

Аннотация рабочей программы дисциплины

Данный курс должен сформировать у студента основы владения математическим аппаратом и основными методами решения задач нерелятивистской квантовой механики.

В курс включены разделы, составляющие основу содержания квантовой механики. К ним относятся математический аппарат и физические основы современной квантовой теории, точные решения и приближенные методы решения квантовомеханических задач. Общие теоретические положения проиллюстрированы на конкретных физических примерах. Курс направлен на приобретение студентом теоретических знаний и практических навыков в области нерелятивистской квантовой механики.

Рабочая программа составлена на основании Образовательного стандарта, самостоятельно устанавливаемый МГУ имени М.В. Ломоносова для реализуемых основных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 27.03.05. – «Инноватика» уровень высшего образования бакалавр и 27.04.05.- «Инноватика» уровень высшего образования магистр, утвержденного Приказом по МГУ имени М.В. Ломоносова №95 от «09» февраля 2016 г.

Рабочая программа утверждена на заседании Совета факультета «Высшей школы управления и инноваций» протокол № 4 от «05» февраля 2016 г.

Председатель Совета факультета «Высшая школа управления и инноваций»



В.В. Печковская



Рабочая программа с дополнениями и изменениями утверждена на заседании кафедры _____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 201 _ г.

Заведующий кафедрой _____
(подпись) _____ (Ф.И.О.)

Одобрено советом факультета _____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 201 _ г.

Председатель _____
(подпись) _____ (Ф.И.О.)

Рабочая программа с дополнениями и изменениями утверждена на заседании кафедры _____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 201 _ г.

Заведующий кафедрой _____
(подпись) _____ (Ф.И.О.)

Одобрено Советом факультета _____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 201 _ г.

Председатель _____
(подпись) _____ (Ф.И.О.)

Рабочая программа с дополнениями и изменениями утверждена на заседании кафедры _____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 201 _ г.

Заведующий кафедрой _____
(подпись) _____ (Ф.И.О.)

Одобрено Советом факультета _____,
протокол № ____ от « ____ » _____ 201 _ г.

Председатель _____
(подпись) _____ (Ф.И.О.)

СОДЕРЖАНИЕ

СОДЕРЖАНИЕ	4
I. ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ	5
Цель дисциплины	5
Учебные задачи дисциплины.....	5
Место дисциплины в структуре ООП ВО	5
Требования к результатам освоения дисциплины.....	5
Формы контроля.....	7
II СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ.....	7
III. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ	12
IV.УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ	13
Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.....	13
Перечень информационных технологий.....	14
Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	14
Материально-техническое обеспечение дисциплины.....	14
V. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ	15
Темы курсовых работ	15
Темы рефератов	15
Пример контрольных заданий	15
Примеры самостоятельных работ	15
Пример теста	18
Вопросы к зачету	20
VI. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ.....	23
Объем дисциплины и виды учебной работы	23
Распределение часов курса по темам и видам работ.....	23
Приложение 1. ФОРМА БИЛЕТА К ЗАЧЕТУ	25
Приложение 2. СИСТЕМА РЕЙТИНГОВОЙ ОЦЕНКИ И КОНТРОЛЯ ЗНАНИЙ СТУДЕНТОВ	26

I. ОРГАНИЗАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКИЙ РАЗДЕЛ

Цель дисциплины

Цель изучения дисциплины заключается в формировании у студента основы владения математическим аппаратом и основными методами решения задач нерелятивистской квантовой механики.

После изучения курса студент должен:

- иметь целостное представление о процессах и явлениях, происходящих в микромире;
- понимать возможности современных научных методов познания микроскопических систем;
- владеть знаниями фундаментальных явлений и эффектов в области физики микромира, теоретическими методами исследований в этой области.

Учебные задачи дисциплины

Исходя из сформулированной выше цели, **задачами** изучения дисциплины являются:

- формирование у студентов естественнонаучного мировоззрения на основе системных представлений о современной картине мира;
- усвоение фундаментальных составляющих квантовой теории и их экспериментальных подтверждений в качестве базового элемента структуры знаний студентов;
- утверждение в их сознании понимания ведущей роли квантовой физики в системе современных знаний о природе;
- развитие способности и интереса к самостоятельному мышлению и творческой деятельности.

Место дисциплины в структуре ООП ВО

Дисциплина «Основы квантовой физики и квантовых вычислений» относится к естественно-научному блоку Вариативной части учебного плана. Изучение данной дисциплины основывается на знаниях, полученных студентами в ходе прохождения следующих курсов: «Математика», «Физика», «Теоретическая механика», «Основы теории управления», «Математические модели в естествознании, механике и технике».

Освоение дисциплины «Основы квантовой физики и квантовых вычислений» необходимо для последующего изучения дисциплин: «Автоматика и телемеханика», «Основы технического регулирования», «Анализ и аудит технологий». Читается на 2 курсе (4 семестр).

Требования к результатам освоения дисциплины

В результате освоения дисциплины формируются следующие общекультурные и профессиональные компетенции:

Универсальные компетенции:

а) общенаучные:

- обладание знаниями о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук обладание знаниями о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук: физики, химии, биологии, наук о земле и человеке, экологии; владение основами методологии научного познания различных уровней организации материи, пространства и времени; умение, используя междисциплинарные системные связи наук, самостоятельно выделять и решать основные мировоззренческие и методологические естественнонаучные и социальные проблемы с целью планирования устойчивого развития (ОНК-1);
- владение методологией научных исследований в профессиональной области (ОНК-4);
- способность создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные математические результаты, владение знаниями об ограничениях и границах применимости моделей (ОНК-5);

- владение фундаментальными разделами математики, необходимыми для решения научно-исследовательских и практических задач в профессиональной области (ОНК-6).

б) инструментальные:

- владение навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов Интернет, владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации (ИК-3);

в) системные:

- способствовать к творчеству, порождению инновационных идей, выдвижению самостоятельных гипотез (СК-1);
- способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации, к постановке целей исследования и выбору оптимальных путей и методов их достижения (СК-2);
- способность к самостоятельному обучению и разработке новых методов исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля деятельности; к инновационной научно-образовательной деятельности (СК-3).

Профессиональные компетенции:

- способность выбрать технологию осуществления научного исследования, оценить затраты и организовать его осуществление; способность выполнить анализ результатов научного эксперимента с использованием соответствующих методов и инструментов обработки (ПК-1);
- способность выбрать метод научного исследования, модифицировать существующие и разработать новые методы, исходя из задач конкретного научного исследования (ПК-2);
- способность представить результат научно-исследовательской работы в виде отчета, реферата, научной статьи, оформленной в соответствии с имеющимися требованиями, с использованием соответствующих инструментальных средств обработки и представления информации (ПК-4)
- способность критически анализировать современные проблемы инноватики, ставить задачи и разрабатывать программы исследований, интерпретировать, представлять и применять полученные результаты (ПК-5);
- способность выбрать технологию внедрения результатов научно-исследовательской деятельности (ПК-10);
- способность обосновывать принятие технических решений при разработке проектов, выбирать технические средства и технологии, в том числе с учётом экологических последствий их применения (ПК-14);
- способность использовать нормативные документы по метрологии, качеству, стандартизации в практической деятельности; способность использовать правила техники безопасности, производственной санитарии, пожарной безопасности и нормы охраны труда (ПК-15).

Уровень освоения дисциплины должен обеспечивать достижение сформулированных цели и задач. После прохождения курса слушатель обязан:

Знать:

- общую структуру научного знания, роль и место квантовой механики в системе естественнонаучного знания;
- цели и задачи, базовые методы получения знания, взаимоотношения теории, эксперимента и практических приложений.

Уметь:

- формулировать основные определения дисциплины;
- правильно применять основные законы квантовой механики при решении физических задач;
- использовать вычислительные методы решения задач по квантовой физике в профессиональной области;

- проводить необходимые математические преобразования и объяснять содержание фундаментальных принципов и законов квантовой физики.

Владеть:

- навыками проведения исследований, обработки и представления экспериментальных данных;
- навыками применения основных методов физико-математического анализа для решения естественнонаучных задач;

Успешное освоение программы предполагает уровень понимания закономерностей квантовой механики, обеспечивающий последовательный переход к изучению специальных физических дисциплин на старших курсах.

В процессе выполнения практических работ студенты должны обучиться не только решению типовых задач, но должны доказать способность применить свои теоретические знания также и для решения широкого круга нестандартных задач.

Успешное освоение дисциплины предполагает выработку у студентов уверенных навыков самостоятельной работы. Студенты должны продемонстрировать умение работать с рекомендованной учебной литературой, научиться выделять, обобщать и самостоятельно устно и в конспективной форме письменно фиксировать узловые моменты в теоретических разделах и материалах, выделенных для самостоятельной проработки.

Формы контроля

Контроль за освоением дисциплины осуществляется в каждом дисциплинарном разделе отдельно.

Рубежный контроль: тестирования по отдельным разделам дисциплины.

Итоговая аттестация в 4 семестре – зачет в письменной форме.

Результаты текущего контроля и итоговой аттестации формируют рейтинговую оценку работы студента. Распределение баллов по отдельным видам работ в процессе освоения дисциплины «Основы квантовой физики и квантовых вычислений» осуществляется в соответствии с Приложением 1.

II СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Тема 1. Математический аппарат квантовой механики

Линейное векторное пространство и его свойства. Скалярное произведение. Норма вектора. Линейные операторы в гильбертовом пространстве. Коммутирующие и некоммутирующие операторы. Функции от операторов. Производная от операторной функции. Ортонормированный базис и его свойства. Матричное представление операторов. Матрица оператора в заданном базисе. Дираковские бра- и кет- векторы. Шпур матрицы и его свойства. Дискретный и непрерывный базис. Дельта-функция Дирака и ее свойства.

Тема 2 Задача на собственные значения

Свойства собственных векторов и собственных значений оператора. Спектр оператора. Вырожденные и невырожденные собственные значения. Свойства собственных векторов при наличии вырождения. Теория представлений.

Тема 3. Измерение в квантовой механике

Чистое состояние. Средние значения физических величин. Вероятность перехода. Вероятностное истолкование волновой функции.

Тема 4. Операторы физических величин

Оператор координаты. Собственные функции оператора координаты. Оператор импульса. Коммутационные соотношения для операторов координаты и импульса. Вывод соотношения неопределенностей на основе коммутационных соотношений операторов координаты и импульса.

Оператор полной энергии (гамильтониан). Стационарное уравнение Шредингера. Теорема о собственных векторах коммутирующих операторов и физические следствия из нее. Полный набор физических величин. Коммутационные соотношения операторов координат и импульсов в системах многих частиц. Волновая функция и энергия системы, состоящей из независимых подсистем. Временное уравнение Шредингера. Стационарные состояния в картине эволюции Шредингера. Зависимость средних значений физических величин от времени. Интегралы движения. Гейзенберговская картина эволюции. Уравнение Гейзенберга. Эквивалентность двух способов описания временной эволюции. Соотношения Эренфеста. Связь операторов физических величин со свойствами симметрии пространства и времени. Оператор импульса, как оператор пространственного сдвига. Оператор энергии, как оператор сдвига по времени. Инвариантность уравнений квантовой механики по отношению к обращению времени. Квантовомеханический ток. Уравнение непрерывности. Связь уравнения непрерывности с законами сохранения числа частиц и электрического заряда. Плотность тока в стационарном состоянии.

Тема 5. Система основных постулатов квантовой механики

Сводка основных постулатов квантовой механики. Основные следствия из постулатов, сформулированные в x -представлении

Тема 6. Квантовая механика одной частицы

Одномерное уравнение Шредингера для свободного движения. Свободное движение в трех измерениях. Плотность тока для свободно движущейся частицы. Одномерное движение в поле потенциальной стенки. Частица в поле прямоугольного потенциального барьера. Туннелирование. Коэффициенты отражения и прохождения. Оператор четности и его свойства. Движение частицы в потенциальной яме.

Тема 7. Квантовый гармонический осциллятор

Гамильтониан гармонического осциллятора. Операторы рождения и уничтожения. Коммутационные соотношения. Действие операторов рождения и уничтожения на вектор состояния. Оператор числа квантов. Спектр энергий. Волновые функции. Матричные элементы операторов рождения и уничтожения. Среднее значение квадратов координаты и импульса.

Тема 8. Движение заряженной частицы в электромагнитном поле

Оператор Гамильтона для частицы в электромагнитном поле. Плотность тока при наличии поля. Градиентная инвариантность. Движение заряженной частицы в однородном магнитном поле. Квантование Ландау. Магнетон Бора.

Тема 9. Теория углового момента

Абстрактный оператор углового момента. Коммутационные соотношения. Теорема о собственных значениях. Диапазон изменения квантовых чисел. Сложение двух коммутирующих операторов углового момента. Коэффициенты Клебша-Гордана. Оператор момента импульса. Коммутационные соотношения для компонент оператора момента импульса. Оператор момента импульса в сферической системе координат. Сферические гармоники.

Тема 10. Движение в поле центральных сил

Оператор Лапласа в сферической системе координат. Разделение переменных, радиальная и угловая части волновой функции. Радиальное уравнение. Центробежный потенциал.

Асимптотический анализ радиального уравнения Шредингера. Общее решение для положительных энергий. Сходящиеся и расходящиеся сферические волны. Общие свойства решения уравнения Шредингера для отрицательных энергий.

Тема 11. Атом водорода

Гамильтониан атома водорода. Анализ и решение радиального уравнения. Рекуррентные соотношения. Энергии уровней атома водорода. Квантовые числа и диапазоны их изменения. Частоты переходов. Постоянная Ридберга. Свойства радиальной части волновой функции. Общий анализ волновых функций атома водорода. Пространственное распределение электронной плотности. Боровский радиус. Исторический обзор представлений об атоме. Боровская теория атома, ее роль в истории физики и ее недостатки. Электроны в одновалентных атомах. Спектроскопические обозначения атомных термов. Эффективный заряд. Снятие вырождения по орбитальному числу. Электрические токи в атоме. Орбитальный магнитный момент электрона в атоме. Учет движения ядра в задаче об атоме водорода. Приведенная масса.

Тема 12. Квантовые уровни двухатомной молекулы

Общий вид потенциальной энергии взаимодействия ядер. Гармоническое приближение. Разделение переменных. Колебательные и вращательные уровни молекулы. Область применимости принятой модели. Полосатые спектры молекул в инфракрасном диапазоне.

Тема 13. Электрон в периодическом поле

Одномерное движение в периодическом потенциальном поле. Граничные условия. Вычисление кристаллических сумм. Теорема Блоха и вид волновой функции. Секулярное уравнение. Зона Бриллюэна. Зависимость энергии от волнового вектора, разрешенные и запрещенные энергетические зоны.

Тема 14.. Квазиклассическое приближение

Разложение квантовомеханических уравнений по степеням постоянной Планка. Волновые функции в квазиклассическом приближении. Точки останова и проблема сшивания решений. Метод ВКБ. Уравнение Эйри. Волновые функции в методе ВКБ. Условие квантования Бора-Зоммерфельда и границы его применимости.

Тема 15. Стационарная теория возмущений

Теория возмущений Релея-Шредингера. Первый порядок теории возмущений, поправка к энергии и волновой функции. Второй порядок теории возмущений, поправка к энергии. Пределы применимости теории возмущений Релея-Шредингера. Теории возмущений для вырожденных уровней. Секулярное уравнение. Расщепление вырожденных уровней возмущением. Устойчивые комбинации векторов невозмущенной задачи по отношению к возмущению. Иллюстрация на примере двухуровневой системы. Расщепление уровней атома водорода в постоянном магнитном поле без учета спина (нормальный эффект Зеемана). Метод слабой связи для расчета спектра энергий электронов в кристалле. Зонный характер спектра. Эффективная масса. Электроны и дырки.

Тема 16. Вариационный метод приближенного решения уравнения Шредингера

Среднее значение энергии, как функционал. Понятие вариация функционала. Уравнение Шредингера, как условие минимума энергии. Прямой вариационный метод Ритца. Вычисление энергии и волновой функции основного состояния атома водорода вариационным методом. Метод линейных комбинаций орбиталей. Интегралы перекрывания. Применение метода для расчета спектра энергий электронов в кристалле (метод сильной связи). Закон дисперсии.

Тема 17. Возмущения, зависящие от времени

Общий подход к решению нестационарной задачи в квантовой механике. Уравнения для коэффициентов разложения волновой функции. Определение вероятности квантового перехода. Двухуровневая система в поле возмущения, гармонически зависящего от времени. Постановка задачи. Точное решение уравнения для коэффициентов разложения волновых функций. Частота

Раби. Анализ зависимости вероятности перехода в двухуровневой системе от времени. Принцип работы мазера. Квантовый эталон времени.

Тема 18. Нестационарная теория возмущений

Уравнения для коэффициентов разложения волновой функции в нестационарной теории возмущений. Вероятность перехода. Переходы под действием адиабатического возмущения. и внезапного возмущения. Возмущения изменяющиеся по гармоническому закону. Частота перехода. Вероятность перехода в единицу времени для гармонического возмущения. Подсчет числа состояний в непрерывном спектре. Плотность состояний. Золотое правило Ферми. Условия применимости теории возмущений. Вычисление вероятности перехода под действием возмущения, не зависящего от времени. Переходы для длительно действующего возмущения. Вероятность распада квазистационарного состояния, время жизни. Вероятность перехода с дискретного уровня в непрерывный спектр при длительно действующем возмущении, форма линии. Связь с соотношением неопределенности энергия-время. Атом в постоянном электрическом поле. Квазистационарный характер этого состояния. Временная зависимость волновой функции квазистационарного состояния. Комплексная энергия, связь с временем жизни состояния.

Тема 19. Переходы в квантовых системах в поле классической световой волны

Оператор взаимодействия света с классическим электромагнитным полем. Дипольное приближение. Вероятность перехода. Поглощение и испускание энергии электроном в поле классической световой волны. Связь вероятности перехода с интенсивностью световой волны. Правила отбора для дипольных переходов в атоме водорода. Переходы более высокого порядка. Поляризационная зависимость вероятности перехода.

Тема 20. Квантование электромагнитного поля

Плотность энергии поля. Приведение к гамильтоновой форме. Преобразование векторного потенциала. Обобщенные импульс и координата. Вывод гамильтониана электромагнитного поля. Выражения для энергии и волновых функций квантованного электромагнитного поля. Фотоны. Операторы рождения и уничтожения фотонов и их свойства. Оператор числа фотонов. Электромагнитный вакуум. Матричные элементы операторов рождения и уничтожения. Гамильтониан системы атом в электромагнитном поле. Оператор взаимодействия квантованной электромагнитной волны с атомной системой. Энергии и волновые функции. Матричные элементы оператора взаимодействия квантованной электромагнитной волны с атомной системой.

Тема 21. Элементы квантовой теории излучения

Вероятность поглощения и испускания фотонов атомом. Спонтанные и вынужденные переходы. Естественная ширина атомных уровней. Плотность состояний для фотонов. Спектральная плотность энергии электромагнитного поля. Коэффициенты Эйнштейна. Соотношение Эйнштейна для вероятностей спонтанных и вынужденных переходов. Заселенность атомных уровней и его связь с вероятностью спонтанного перехода. Закон сохранения импульса при поглощении и испускании фотона движущимся атомом. Доплеровское уширение уровней. Эффект Мессбауэра.

Тема 22. Квантовые ансамбли

Понятие о квантовом ансамбле. Чистый и смешанный ансамбль. Матрица плотности.

Описание смешанного ансамбля в формализме матрицы плотности. Свойства оператора плотности. Физический смысл матричных элементов оператора плотности. Матрица плотности для чистого ансамбля. Уравнение движения для матрицы плотности. Теория возмущений для матрицы плотности. Релаксационный член в уравнении движения, его вид и физический смысл. Продольное и поперечное времена релаксации.

Тема 23. Квантовая теория дисперсии и поглощения света

Комплексная диэлектрическая проницаемость вещества. Связь комплексной диэлектрической проницаемости с коэффициентами поглощения и отражения света. Вычисление поляризации, вызванной световой волной в модельной системе из двухуровневых атомов. Расчет матрицы плотности для двухуровневой системы. Среднее значение индуцированного дипольного момента. Диэлектрическая дисперсия в газе двухуровневых атомов. Частотная зависимость коэффициентов поглощения и преломления. Обобщение формулы диэлектрической частотной дисперсии для реальных многоуровневых систем. Силы осцилляторов. Правило сумм для сил осцилляторов. Заселенность атомных уровней Условия, необходимые для усиления света в многоатомной системе. Квантовые генераторы. Трехуровневая система. Рубиновый лазер.

Тема 24. Спин

Экспериментальные факты, лежащие в основе представления о спиновой степени свободы квантовых систем. Оператор спина, его свойства. Фермионы и бозоны. Квантовые состояния частицы со спином $\frac{1}{2}$. Представление спиновой волновой функции в виде вектора-столбца. Матричное представление оператора спина для электрона. Матрицы Паули. Проекция спина электрона на выделенную ось. Действие операторов $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$, на собственные функции оператора \hat{S}^2 для электрона. Спиновый магнитный момент. Аномальное гиромагнитное соотношение для электрона.

Тема 25. Спин-орбитальное взаимодействие

Релятивистские поправки к уравнению Шредингера для электрона при учете наличия спина. Оператор спин-орбитального взаимодействия. Спиновое вырождение уровней атома в нерелятивистском приближении. Сложение орбитального и спинового моментов электрона. Диапазоны изменения квантовых чисел. Влияние релятивистских поправок на спектр электрона. Тонкая структура атома водорода.

Тема 26. Системы, состоящие из одинаковых частиц

Принцип тождественности частиц. Формулировка принципа тождественности на языке волновой функции. Оператор перестановки и его собственные значения. Фермионы и бозоны. Принцип Паули. Свойства волновой функции системы из тождественных частиц. Одночастичный и многочастичный гамильтониан, одночастичные и многочастичные волновые функции. Детерминант Слэтера. Заполнение одночастичных состояний в системе невзаимодействующих фермионов. Пара- и орто- состояния двухэлектронной системы: свойства координатной и спиновой частей волновой функции. Энергетические уровни двухэлектронной системы при учете межэлектронного взаимодействия. Кулоновский и обменный вклад в энергию. Синглетный и триплетный термы двухэлектронной системы. Интерпретация обменного интеграла. Атом гелия. Орто- и пара- состояния атома гелия.

Тема 27. Метод самосогласованного поля в теории многоэлектронных систем

Физическое обоснование приближения среднего поля. Кулоновский вклад в потенциальную энергию. Уравнения Хартри. Метод самосогласования. Вывод уравнений Хартри вариационным методом. Связь хартриевских одночастичных энергий и полной энергии системы. Метод Хартри-Фока. Детерминант Фока. Уравнения Хартри-Фока. Самосогласованный обменный потенциал в приближении Хартри-Фока. Физическое толкование обменного вклада в энергию.

Тема 28. Состояния электронов в многоэлектронных атомах

Сложение орбитального и спинового моментов в многоэлектронных атомах. Схемы $L-S$ связи и $j-j$ связи. Базисные волновые функции электронов в случае $L-S$ и $j-j$ связи. Спектральные термы атомов. Классификация одноэлектронных состояний в многоэлектронных атомах. Электронные конфигурации. Заполнение электронных оболочек в Периодической

Системе. Релятивистские поправки к энергетическим уровням электрона. Тонкая структура спектральных термов.

Тема 29. Атом в постоянном однородном магнитном поле

Базисные функции электронов. Матричные элементы оператора возмущения. Вычисление поправок к энергетическим уровням электрона. Множитель Ландэ. Нормальный и аномальный эффекты Зеемана.

Тема 30. Элементы квантовой теории химической связи

Адиабатическое приближение в теории многоатомных систем. Разделение электронного и ядерного движения. Уравнение для волновых функций электронов в поле «замороженных» ядер. Адиабатический потенциал. Электронно-колебательные состояния. Гомополярная (ковалентная) связь. Гамильтониан молекулы водорода. Связывающее и антисвязывающее состояния. Интегралы перекрывания. Вычисление энергии для связывающего и антисвязывающего состояний. Кулоновский и обменный интегралы. Анализ потенциальной кривой для взаимодействия атомов в молекуле водорода. Гибридизация, sp_3 – орбитали. Особенности химической связи в молекулах и твердых телах, содержащих элементы IV группы Периодической Системы. Взаимодействие Ван-дер-Ваальса. Резонансное взаимодействие нейтральных атомов и молекул. Механизмы миграции энергии в цепочках атомов.

Темы практических занятий

1. Примеры гильбертовых пространств. Операторы и их свойства.
2. Самосопряженные операторы в гильбертовом пространстве.
3. Основные положения квантовой механики. Соответствие квантовой и классической механики. Уравнение Эренфеста.
4. Одномерные задачи квантовой механики.
5. Движение квантовой частицы в центрально-симметричном поле.
6. Теория возмущений. Невырожденный случай.
7. Теория возмущений. Вырожденный случай.
8. Квантовые переходы под действием возмущений.
9. Вариационные методы.
10. Теория углового момента. Спин.
11. Системы тождественных частиц.
12. Элементы теории химической связи.
13. Квазиклассическое приближение.

III. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В соответствии с требованиями стандарта по направлению подготовки реализация компетентностного подхода предусматривает широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий:

- лекции;
- семинары;
- письменные и устные домашние задания;
- консультации преподавателей;
- самостоятельная работа студентов;
- интерактивные лекции;
- круглые столы;
- обсуждение подготовленных студентами эссе;
- групповые дискуссии;
- обсуждение результатов работы студенческих исследовательских групп.

На лекциях по данной дисциплине рекомендуется применение основных таблиц, схем и рисунков, предусмотренных содержанием рабочей программы, компьютерных презентаций и т. д.

Практические занятия посвящены закреплению знаний, полученных на лекциях по изучаемой дисциплине, будут способствовать формированию творческих способностей и знакомству с правовой охраной объектов интеллектуальной собственности.

Семинарскими занятиями предусматривается сочетание индивидуальных и групповых форм работы, выполнение практических заданий с использованием кейс-метода, методов развития технического творческого мышления личности и др.

При подготовке и проведении контрольных работ по дисциплине предполагается сочетание теоретических и практических методов исследования обучающихся на основе принципов преемственности, интеграции и практического применения.

IV.УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Бондарев, Б. В. Курс общей физики в 3 кн. Книга 2: электромагнетизм, оптика, квантовая физика: учебник для бакалавров [Текст] / Б. В. Бондарев, Н. П. Калашников, Г. Г. Спиринов. – 2-е изд. – М.: Юрайт, 2017. – 441.
2. Бондарев, Б. В. Курс общей физики в 3 кн. Книга 3: термодинамика, статистическая физика, строение вещества : учебник для бакалавров [Текст] / Б. В. Бондарев, Н. П. Калашников, Г. Г. Спиринов. – 2-е изд. — М. : Юрайт, 2017. — 369 с.
3. Дирак, П.М. Принципы квантовой механики [Текст] / П. М. Дирак. – М.: Книга по Требованию, 2012. – 482 с.
4. Степанов, Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 1: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов (МГУ им. М.В. Ломоносова). — 2-е изд., испр. и доп. – М.: Юрайт, 2017. – 233 с.
5. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия в 2 ч. Часть 2: учебник и практикум для академического бакалавриата / Н. Ф. Степанов. — 2-е изд., испр. и доп. — М. : Юрайт, 2016. – 283 с.
6. Крайнов, В.П. Квантовая теория излучения атомных частиц. Учеб. пособие [Текст] / В.П.Крайнов, Б. М. Смирнов. - Долгопрудный : Интеллект, 2015. – 296 с.

Дополнительная литература

1. Галицкий, В.М. Задачи по квантовой механике. Часть 2. [Текст] / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И Коган. – М.: Едиториал, 2001. – 304 с.
2. Ландау, Л.Д. Квантовая механика [Текст] / Л.Д. Ландау, Е.Н. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2002. – 808 с.
3. Мессиа, А. Квантовая механика, Т.1,2. [Текст] / А. Мессиа; пер. П. Кулиш, ред. Л. Фадеев. – М., Наука, 1978. – 1064 с.
4. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике, Т 1,2. [Текст] / З. Флюгге. – М.: Мир,1974. – 320с.
5. Фок В.А. Начала квантовой механики [Текст] / В.А. Фок. - М.: ЛКИ, 2016. – 376 с.
6. Фриш, С.Э. Курс общей физики: учебник в 3 т. Т.3. : Оптика. Атомная физика. – Изд.10-е, стер. [Текст] / С.Э.Фриш, А.В.Тиморева. – СПб. : Лань, 2007. – 656 с.

Периодические издания

1. Квантовая электроника: ежемес. журн. / Рос. акад. наук, Ин-т физики им. П.Н. Лебедева М. URL: <http://www.quantum-electron.ru>

- Institute of Electrical and Electronics Engineers. IEEE Journal of Quantum Electronics Piscataway. URL: <https://www.ieee.org/index.html>

Перечень информационных технологий

Интернет-ресурсы

- URL: <http://eqworld.ipmnet.ru/ru/library/physics/quantum.htm> – Мир математических уравнений
- URL: <http://wwwlib.phys.msu.ru/index.php?p=33> – Библиотека физического факультета МГУ
- URL: <https://mipt.ru/students/organization/mezhpr/biblio/q-ivanov/quant-1-0.pdf> – Иванов М.Г. Как понимать квантовую механику. – М. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2012
- URL: <http://nbmgu.ru> – Научная библиотека МГУ
- URL: www.ph4s.ru/book_ph_kv_mex_teor.html – Балашов В.В., Долинов В.К. Курс квантовой механики – М.: МГУ, 2001.

Программное обеспечение:

Обязательное программное обеспечение – MS Office.

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студенты должны соблюдать дисциплину, вовремя приходить на занятия, осуществлять подготовку домашних заданиям, сдавать контрольные работы, проявлять активность на занятиях.

Важную роль в изучении дисциплины играет самостоятельная работа студентов, направленная на формирование знаний по квантовой физике и навыков решения соответствующих задач, сбора и анализа информации и формулировки выводов. В рамках самостоятельной работы осуществляется подготовка рефератов, домашних заданий к семинарским занятиям.

Самостоятельная внеаудиторная работа включает в себя изучение теоретического материала и освоение практических методов квантовомеханических вычислений.

Текущий и итоговый контроль

Текущий контроль изучения курса студентами осуществляется по результатам аудиторной работы студента в соответствии с графиком текущего контроля.

Тема	Отчетность	Срок (неделя)
Математический аппарат квантовой механики. Теория возмущений	Контрольная работа 1	8
Вариационные методы. Элементы теории химической связи.	Контрольная работа 2	14
	Зачет	18

Итоговым контролем являются теоретический зачет (семестр 4). Зачет принимается с учетом аудиторного текущего контроля при условии успешной сдачи контрольных работ, оценки проставляются по результатам ответов по билетам.

Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения занятий по дисциплине «Основы квантовой физики и квантовых вычислений» необходимы: аудитория, оборудованная персональным компьютером, мультимедийными средствами для демонстрации презентаций, программным обеспечением MS Office и доступом к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

V. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Темы курсовых работ

Курсовая работа по дисциплине «Основы квантовой физики и квантовых вычислений» не предусмотрена.

Темы рефератов

- 1 Квантово-полевая картина мира
- 2 Возникновение и развитие квантовой физики.
- 3 Единая квантовая теория.
- 4 Основные квантово-механические принципы.
- 5 Принцип неопределенности Гейзенберга.
- 6 Квантовая физика как новый этап изучения природы
- 7 Хаос, необратимость времени и брюссельская интерпретация квантовой механики
- 8 Квантовые свойства макроскопических объектов.
- 9 Принцип неопределенности Гейзенберга.
- 10 Парадокс Эйнштейна-Подольского-Розена.

Пример контрольных заданий

Контрольная работа 1

1. Найти условия, которым должны удовлетворять операторы \hat{A} , \hat{B} для того, чтобы выполнялось соотношение $(\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} - \hat{B}) = \hat{A}^2 - \hat{B}^2$
2. Является ли эрмитовым оператор $\hat{x}\hat{p}$?
3. Вычислить коммутатор операторов $[\hat{x}\hat{G}(\hat{p})]$. Произвольная функция $G(\xi)$ предполагается аналитической.
4. Исходя из вида волновых функций $\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n \varphi_0$ доказать для гармонического осциллятора теорему вириала $\langle \varphi_n | \hat{T} | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | \hat{U} | \varphi_n \rangle$
5. Вычислить поправку первого порядка к уровням энергии гармонического осциллятора при наличии возмущения $\hat{V} = \lambda \hat{x}^2$, где λ - малый параметр.

Примеры самостоятельных работ

Самостоятельная работа 1

Цель работы: выработать необходимый математический «язык», на базе которого предстоит дальнейшее изучение курса квантовой механики.

1. Ответьте на следующие вопросы.
 - 1.1. Что называется оператором физической величины?
 - 1.2. Что такое собственные функции и собственные значения оператора?
 - 1.3. Какой оператор называется линейным?
 - 1.4. Дайте определение эрмитового оператора.
 - 1.5. Докажите, что собственные значения самосопряжённых операторов являются вещественными числами.
 - 1.6. Докажите, что собственные функции эрмитового оператора, принадлежащие различным собственным значениям, взаимно ортогональны.
 - 1.7. Как определяется среднее значение динамической переменной в квантовой механике?

- 1.8. При каком условии две физические величины могут быть одновременно точно определены в одном и том же квантовом состоянии?
- 1.9. Как вычисляется полная производная от оператора по времени?
- 1.10. Запишите основное уравнение нерелятивистской квантовой механики (все известные формы, с комментариями).

2. Составить таблицу основных операторов:

№	Оператор	обозначение	выражение
1	Координата	$\vec{r}(x, y, z)$	
2.	Импульс и его проекции		
3.	Момент импульса и его проекции в декартовой системе координат		
4.	Проекция момента импульса в сферической системе координат		
5.	Квадрат момента импульса в сферической системе координат		
6.	Энергия	\hat{H}	
7.	Оператор повышения проекции момента импульса (определение)	\hat{K}^+	
8.	Оператор повышения проекции момента импульса в сферической системе координат		
9.	Оператор понижения проекции момента импульса (определение)	\hat{K}^-	
10.	Оператор понижения проекции момента импульса в сферической системе координат		

3. Найти собственные значения оператора $\hat{L} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ в состоянии $\psi = e^{im\varphi}$.

4. Доказать эрмитовость операторов \hat{p}_z и гамильтониана.

5. Найти коммутатор оператора координаты y и оператора Лапласа ∇^2 .

6. Доказать теоремы Эренфеста:

а) $m \frac{d\bar{y}}{dt} = \bar{p}_y$; б) $\frac{d\bar{p}_z}{dt} = \bar{F}_z$.

7. Доказать, что если одна из проекций момента импульса (например, K_z) имеет определённое значение в одном из квантовых состояний ψ_m , то средние значения двух других проекций равны нулю.

Подсказки:

- 1) $\hat{K}_z \psi_m = m\hbar \psi_m$; 2) $\hat{K}_y \hat{K}_z - \hat{K}_z \hat{K}_y = i\hbar \hat{K}_x$; 3) Усреднить указанный коммутатор по состоянию ψ_m .

8. Учитывая соотношение коммутации для операторов \hat{K}_x и \hat{K}_y , установить неравенство Гейзенберга для данных проекций момента импульса.

9. Определить плотность тока вероятности в следующих состояниях:

а) $\psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}$ - свободная частица;

б) $\psi_n = A \sin \frac{n\pi}{\ell} x$ - частица в прямоугольном потенциальном ящике;

в) $\psi_n = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$ - линейный гармонический осциллятор.

Объясните полученные результаты.

10. Заполните таблицу по образцу первой строки:

№	коммутатор	подробное выражение	результат	выводы
1.	$[x, \hat{p}_x]$	$x\hat{p}_x - \hat{p}_x x$	$i\hbar$	Канонически сопряжённые координата и проекция импульса не могут быть одновременно точно определены в одном и том же квантовом состоянии.
2.	$[q_\alpha, \hat{p}_\alpha]$			
3.	$[x, \hat{p}_y]$			
4.	$[q_\alpha, \hat{p}_\beta]$			
5.	$[\hat{K}_x, \hat{K}_y]$			
6.	$[\hat{K}_y, \hat{K}_z]$			
7.	$[\hat{K}_z, \hat{K}_x]$			
8.	$[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta]$			
9.	$[\hat{K}_x, \hat{K}^2]$			
10.	$[\hat{K}_\alpha, \hat{K}^2]$			

Самостоятельная работа 2

Цель работы: научиться решать простейшие задачи, связанные с одномерным движением (частица в потенциальной яме, потенциальный барьер, линейный гармонический осциллятор).

1. Используя условие нормировки, найти амплитуду вероятности для частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной L .

2. Вычислить вероятность того, что в состоянии ψ_2 частица будет обнаружена в области $\frac{1}{3}\ell < x < \frac{2}{3}\ell$ прямоугольного потенциального ящика шириной ℓ .

3. Микрочастица находится в потенциальной яме конечной глубины:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq a \\ U_0, & x > a. \end{cases}$$

Получить уравнение $k_1 \operatorname{ctg}(k_1 a) = -k_2$, определяющее спектр собственных значений энергии частицы в области $E < U_0$. На основе графического решения этого уравнения показать, что в

потенциальной яме конечной глубины имеется конечное число собственных значений энергии. Установить минимальное значение энергии частицы в такой яме. (См., напр., Матвеев А.Н. Атомная физика, М., 1989, § 26, с. 166-167).

4. Найти волновые функции и уровни энергии частицы в сферически симметричной потенциальной яме радиусом r_0 с идеально отражающими стенками ($U=0$ при $r \leq r_0$, $U \rightarrow \infty$ при $r > r_0$). Рассмотреть случай s -состояния, учесть: $\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi)$.

5. Определить коэффициент прозрачности потенциального барьера вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_1, & 0 \leq x \leq a \\ U_2, & x > a. \end{cases} \quad \text{Рассмотреть случай } U_1 > U_2, U_2 < E < U_1.$$

6. Используя рекуррентное соотношение для полиномов Эрмита - Чебышева

$$\xi H_n = \frac{1}{2} H_{n+1} + n H_{n-1},$$

а) показать для линейного гармонического осциллятора, что

$$x\psi_n = a \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} \right).$$

б) используя условие ортонормировки, найдите отличные от нуля матричные элементы

$$\langle m|x|n \rangle \neq 0 \text{ и объясните полученные результаты.}$$

7. Найти наиболее вероятные положения ЛГО в основном состоянии, в первом возбужденном состоянии и во втором возбужденном состоянии.

8. Из условия нормировки определить амплитуду вероятности в основном и в первом возбужденном состояниях ЛГО.

9. Покажите, что для барьера произвольной формы выполняется соотношение $R(E) + D(E) = 1$. (решение можно посмотреть, например, в задачнике В.М. Галицкого и др. "Задачи по квантовой механике", № 2. 54).

10. Покажите, что для потенциального барьера произвольной формы коэффициенты прохождения и отражения частиц с данной энергией не зависят от того, с какой стороны частицы падают на барьер (решение можно посмотреть в том же задачнике, № 2. 55).

Пример теста

1. Какой заряд окажется на двух цинковых пластинах, одна из которых заряжена положительно, а другая отрицательно, если их облучить ультрафиолетовым светом?

- А. Обе пластины будут иметь отрицательный заряд.
- Б. Обе пластины будут иметь положительный заряд.
- В. Одна пластина будет иметь положительный заряд, а другая отрицательный.
- Г. Обе пластины окажутся незаряженными.

2. Какие факторы определяют красную границу фотоэффекта?

- А. вещество анода.
- Б. Вещество катода.
- В. От частоты света, падающего на поверхность анода.
- Г. От частоты света, падающего на поверхность катода.

3. Как изменится скорость вылетающих из вещества электронов, если частота облучающего света увеличится?

- А. Уменьшится.
- Б. Увеличится.
- В. Не изменится.
- Г. Нет верных вариантов ответа.

4. Длина волны облучающего света уменьшилась в 2 раза. Как изменилась работа выхода электронов?
- Уменьшится.
 - Увеличится.
 - Не изменится.
 - Нет верных вариантов ответа.
5. Как можно объяснить явление фотоэффекта?
- Только волновой теорией света.
 - Только квантовой теорией света.
 - Волновой и квантовой теориями света.
 - Только с помощью теории электромагнитного поля Максвелла.
6. При освещении пластины зеленым светом фотоэффекта нет. Будет ли он наблюдаться при облучении той же пластины красным светом?
- Нет.
 - Да.
 - Нельзя точно ответить.
 - Нет верных вариантов ответа.
7. Как зависит запирающее напряжение фототока от длины волны облучающего света?
- Прямо пропорционально длине волны.
 - Обратно пропорционально длине волны.
 - Равно длине волны.
 - Нет верных вариантов ответа.
8. Как изменится со временем разряд отрицательно заряженной цинковой пластины, если ее облучить ультрафиолетовыми лучами?
- Уменьшится.
 - Увеличится.
 - Не изменится.
 - Нет верных вариантов ответа.
9. Работа выхода электронов с поверхности цезия равна 1,9 эВ. Возникнет ли фотоэффект под действием излучения, имеющего длину волны 0,45 мкм?
- Не возникнет.
 - Возникнет.
 - Недостаточно исходных данных для ответа.
 - Нельзя точно ответить.
10. Чему равна энергия, масса и импульс фотона для рентгеновских лучей ($\nu = 10^{18}$ Гц)?
ответить
- $6,62 \cdot 10^{-16}$ Дж; $7,3 \cdot 10^{-33}$ кг; $2,2 \cdot 10^{-24}$ кг * м/с
 - $6,62 \cdot 10^{-17}$ Дж; $7,3 \cdot 10^{-30}$ кг; $2,2 \cdot 10^{-20}$ кг * м/с
 - $6,62 \cdot 10^{-15}$ Дж; $7,3 \cdot 10^{-34}$ кг; $2,2 \cdot 10^{-25}$ кг * м/с
 - $6,62 \cdot 10^{-19}$ Дж; $7,3 \cdot 10^{-36}$ кг; $2,2 \cdot 10^{-27}$ кг * м/с
11. Рубиновый лазер за время $t = 2 \cdot 10^{-3}$ с излучает $N = 2 \cdot 10^{19}$ квантов на длине волны 690 нм. Найдите мощность лазера.
12. Какой длины волны следует направить лучи на поверхность цинка, чтобы максимальная скорость фотоэлектронов была равна 2000 км/с? Красная граница фотоэффекта для цинка равна 0,35 мкм.

Ответы:

- Б
- Б
- Б
- В
- Б

6 А
7 Б
8 А
9 Б
10 А
11 2,9 кВт
12 83 нм

Вопросы к зачету

- 1 Свойства полной ортонормированной системы векторов в линейном пространстве.
- 2 Определение и свойства дельта-функции Дирака.
- 3 Определение и свойства самосопряженного оператора.
- 4 Что такое задача на собственные значения? Свойства собственных векторов и собственных значений самосопряженного оператора.
- 5 Что следует понимать под вырождением собственных значений.
- 6 В чем заключается смысл соотношения неопределенностей Гейзенберга?
- 7 Сформулируйте теорему о собственных функциях и собственных значениях коммутирующих операторов.
- 8 Записать коммутационные соотношения для операторов импульса и координаты.
- 9 Как описывается зависимость от времени операторов в картине Гейзенберга?
- 10 Как описывается зависимость от времени волновых функций в картине Шредингера?
- 11 Свойства волновых функций и энергий системы, состоящей из невзаимодействующих частей.
- 12 Какими свойствами обладает волновая функция стационарного состояния?
- 13 Свойства волновой функции свободно движущейся частицы.
- 14 Энергия свободно движущейся частицы.
- 15 Длина волны де Бройля.
- 16 Свойства ортогональности и нормировки для волновой функции свободного движения.
- 17 Определение и свойства оператора четности.
- 18 Уровни энергии гармонического осциллятора.
- 19 Гамильтониан гармонического осциллятора в представлении операторов рождения и уничтожения.
- 20 Свойства оператора углового момента. Собственные векторы и собственные значения. Диапазон изменений квантовых чисел.
- 21 Свойства собственных функций орбитального углового момента (сферических гармоник).
- 22 Записать уравнение Шредингера для атома водорода.
- 23 Общие свойства решения уравнения Шредингера для атома водорода. Волновые функции, энергии.
- 24 Оператор магнитного момента, создаваемого орбитальным движением электрона.
- 25 Общая постановка задачи для стационарной теории возмущений.
- 26 Поправки первого и второго порядка к энергии в невырожденной теории возмущений.
- 27 Поправка первого порядка к волновой функции в невырожденной теории возмущений.
- 28 Постановка задачи в теории возмущений для вырожденных уровней.
- 29 Энергия движения свободной частицы в постоянном магнитном поле.
- 30 Записать математическую формулировку вариационного принципа в квантовой механике. Как связаны стационарное уравнение Шредингера и принцип минимума энергии.
- 31 В чем суть метода линейных комбинаций орбиталей? Что понимают под орбиталью?
- 32 Как связано происхождение разрешенных энергетических зон в кристалле с уровнями энергии атома?
- 33 Записать выражение для вероятности перехода в двухуровневой системе под действием монохроматического возмущения. Что такое расстройка частоты, частота Раби? Как влияют эти величины на вероятность перехода?

- 34 Что такое адиабатическое возмущение? Критерий адиабатичности. Вероятность перехода под действием адиабатического возмущения?
- 35 Критерий внезапности возмущения. Записать вероятность перехода под действием внезапного возмущения.
- 36 Записать выражение для вероятности перехода в единицу времени под действием гармонического монохроматического возмущения между дискретными уровнями. В чем физический смысл дельта-функции в этом выражении?
- 37 Записать общее определение плотности состояний в непрерывном спектре. Физический смысл функции плотности состояний для непрерывного спектра.
- 38 Записать вероятность перехода в единицу времени в непрерывный спектр под действием гармонического монохроматического возмущения.
- 39 Записать волновую функцию квазистационарного состояния. В чем смысл комплексной энергии? Какова связь с соотношением неопределенностей энергия-время?
- 40 Записать выражение для вероятности перехода в единицу времени между атомными уровнями в поле классической световой волны.
- 41 В чем состоят правила отбора для дипольных переходов в атоме?
- 42 Записать гамильтониан электромагнитного поля.
- 43 Что представляет из себя фотон с точки зрения квантовомеханического описания?
- 44 Записать действие операторов рождения и уничтожения на собственные векторы электромагнитного поля.
- 45 Записать энергию квантованного электромагнитного поля. Что такое электромагнитный вакуум? Почему это понятие отсутствует в классической физике?
- 46 Записать гамильтониан системы атом+квантованное поле.
- 47 Записать энергию атома и поля в приближении, когда их взаимодействие отсутствует
- 48 Записать матричные элементы операторов рождения и уничтожения
- 49 Записать выражение для вероятности поглощения и испускания света атомом. Что означает наличие дельта-функции в этом выражении?
- 50 Чем отличаются спонтанные и вынужденные переходы?
- 51 С чем связана естественная ширина атомных уровней?
- 52 Написать выражение для плотности состояний фотонов.
- 53 Записать распределение Планка.
- 54 Что такое коэффициенты Эйнштейна? Выписать соотношение между ними.
- 55 Что понимается под заселенностью атомных уровней?
- 56 С чем связано доплеровское уширение атомных уровней?
- 57 Записать совместно законы сохранения энергии и импульса при поглощении и испускании квантов движущимся атомом.
- 58 Записать выражение для доплеровского сдвига частоты при взаимодействии света с атомом. Что такое эффект отдачи?
- 59 Как связаны комплексная диэлектрическая проницаемость и коэффициент поглощения света?
- 60 Что следует понимать под системой с инверсной заселенностью? Каковы особенности взаимодействия света с такими системами?
- 61 Записать среднее значение произвольной физической величины в смешанном ансамбле.
- 62 Записать уравнение движения для оператора плотности.
- 63 Определить физический смысл матричных элементов матрицы плотности.
- 64 В чем состоит физическая природа релаксационного члена в уравнении для матрицы плотности? Что такое время релаксации и его физический смысл?
- 65 Записать квантовомеханическое выражение для мнимой части диэлектрической проницаемости. В чем проявляется роль заселенностей квантовых уровней?
- 66 Сформулировать правило сумм для сил осцилляторов.

- 67 Нарисовать качественную картину частотной дисперсии коэффициентов поглощения и преломления света. С какими характеристиками квантовой системы связаны особенности на этих кривых?
- 68 Принцип и схема работы квантового генератора.
- 69 Нарисовать схему уровней и описать свойства системы, необходимые для осуществления генерации света.
- 70 Дать определение спина. Спиновые характеристики бозе и ферми частиц.
- 71 Спиновая координата и ее свойства.
- 72 Оператор спина и его свойства.
- 73 Вид волновой функции в нерелятивистском приближении.
- 74 Спиновый магнитный момент. Аномальное гиромагнитное отношение для электрона.
- 75 Записать оператор спин-орбитального взаимодействия. Порядок величины релятивистских поправок к оператору энергии электрона.
- 76 Почему понятие спина отсутствует в классической физике?
- 77 Записать вид одночастичной волновой функции электрона в атоме.
- 78 Сложение орбитального и спинового моментов. Связь между собственными функциями.
- 79 Записать спиновые части одночастичной волновой функции для проекции спина $\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$.
- 80 Сформулировать принцип тождественности частиц, в том числе на языке волновых функций.
- 81 Чем отличаются волновые функции систем из бозе и ферми частиц?
- 82 Сформулировать принцип Паули в общей и частной формулировках.
- 83 Записать волновую функцию парасостояния.
- 84 Записать волновую функцию ортосостояния.
- 85 Записать кулоновский и обменный вклады в энергию двухэлектронной системы.
- 86 Нарисовать схему уровней атома гелия. Что такое орто и парагелий?
- 87 Объяснить, что называется синглетом и триплетом. Какова основная особенность триплетного уровня?
- 88 Записать уравнение Хартри.
- 89 Записать уравнение Хартри-Фока. Каково происхождение обменного члена?
- 90 Чем отличаются $L-S$ и $J-J$ связь?
- 91 Что понимают под электронной оболочкой в атоме?
- 92 С чем связано понятие эффективного заряда в атоме? Как проявляется электрон-электронное взаимодействие в поведении уровней энергии атомов?
- 93 Запишите формулу для релятивистских поправок к уровням энергии атома. Почему за ними закрепилось название тонкой структуры?
- 94 Запишите выражение для уровней энергии атома в постоянном магнитном поле. В чем состоит нормальный и аномальный эффект Зеемана? В чем источник аномального эффекта?
- 95 В чем сущность адиабатического приближения в теории многоатомных систем?
- 96 Запишите гамильтониан молекулы водорода.
- 97 Запишите выражение для связывающей и антисвязывающей орбиталей молекулы водорода. Нарисуйте вид распределения электронной плотности.
- 98 Запишите выражение для энергии связывающего и антисвязывающего состояний молекулы водорода.
- 99 Свойства ковалентной связи.
- 100 Что такое sp^3 гибридизация? В каких физических системах возникает это понятие?
- 101 Как квантовая механика объясняет взаимодействие Ван-дер-Ваальса? В чем основное отличие сил Ван-дер-Ваальса от ковалентных сил?
- 102 В чем состоит проявление резонансного взаимодействия между нейтральными молекулами? Какова квантовомеханическая природа этого взаимодействия?
- 103 В чем состоит сущность квазиклассического приближения в квантовой механике?

104 Что такое точка поворота (остановки) в квазиклассическом приближении и какие проблемы в расчете волновой функции с ними связаны? В чем состоит идея метода ВКБ?

VI. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины и виды учебной работы

Объем курса – 72 часа, 2 зачетные единицы, в том числе 32 часа – аудиторная нагрузка, из которых 16 – лекционных часов, 16 часов – семинары, 40 часов – самостоятельная работа студентов. Читается на 2 курсе (4 семестр), итоговая форма отчетности – **зачет**.

Вид учебной работы	Всего часов
Контактные занятия (всего)	32
В том числе:	-
Лекции	16
Практические занятия (ПЗ)	-
Семинары (С)	16
Лабораторные работы (ЛР)	-
Самостоятельная работа (всего)	40
В том числе:	
Реферат	10
Тестирование	10
Контрольная работа	15
Самостоятельная работа	5
Вид промежуточной аттестации Экзамен	4
Общая трудоемкость (часы)	72
Зачетные единицы	2

Распределение часов курса по темам и видам работ

№ п/п	Наименование тем	Всего часов	Контактные занятия (час)			Самостоятельная работа
			В том числе			
			Лекции	Семинары	Лабораторные занятия	
1	Тема 1	1,8	0,4	0,4		1
2	Тема 2	2,2	0,6	0,6		1
3	Тема 3	3,2	0,6	0,6		2
4	Тема 4	2,2	0,6	0,6		1
5	Тема 5	1,8	0,4	0,4		1
6	Тема 6	2,2	0,6	0,6		1
7	Тема 7	3,2	0,6	0,6		2
8	Тема 8	1,8	0,4	0,4		1
9	Тема 9	2,2	0,6	0,6		1
10	Тема 10	1,8	0,4	0,4		1
11	Тема 11	3,2	0,6	0,6		2
12	Тема 12	1,8	0,4	0,4		1
13	Тема 13	1,8	0,4	0,4		1
14	Тема 14	2,8	0,4	0,4		2

15	Тема 15	2,2	0,6	0,6		1
16	Тема 16	2,2	0,6	0,6		1
17	Тема 17	2,2	0,6	0,6		1
18	Тема 18	3,2	0,6	0,6		2
19	Тема 19	1,8	0,4	0,4		1
20	Тема 20	2,2	0,6	0,6		2
21	Тема 21	2,2	0,6	0,6		1
22	Тема 22	2,8	0,4	0,4		2
23	Тема 23	2,2	0,6	0,6		1
24	Тема 24	3,2	0,6	0,6		2
25	Тема 25	1,8	0,4	0,4		1
26	Тема 26	2,2	0,6	0,6		1
27	Тема 27	1,8	0,4	0,4		1
28	Тема 28	3,2	0,6	0,6		2
29	Тема 29	2,2	0,6	0,6		1
30	Тема 30	3,2	0,6	0,6		2
Итого		72	16	16		40

ФОРМА БИЛЕТА К ЗАЧЕТУ

Российская Федерация
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова”
Факультет «Высшая школа управления и инноваций»

БИЛЕТ № ____
по дисциплине «Основы квантовой физики и квантовых вычислений»
Направление/Специальность 27.03.05. «Инноватика»

Задача 1.

Задача 2.

Утверждено на заседании Совета факультета «__» _____ 201__ года, протокол № ____

Председатель Совета _____ Ф.И.О.
(подпись)

СИСТЕМА РЕЙТИНГОВОЙ ОЦЕНКИ И КОНТРОЛЯ ЗНАНИЙ СТУДЕНТОВ

№ п/п	СТРУКТУРА	Баллы по каждому модулю
1.	Оценка за активное участие в учебном процессе и посещение занятий: <div style="text-align: right;"> Всех занятий Не менее 75% Не менее 50% Не менее 25% </div> Итого:	 5 4 3 2 до 5
2.	устный опрос в форме собеседования (УО-1) письменный опрос в виде теста (ПР-1) контрольная работа (ПР-2) письменная работа в форме реферата (ПР-4) Итого:	5 10 10 15 40
3.	Итоговое тестирование	55
	ВСЕГО:	100

Пересчет на 5 балльную систему

2 (неудовлетворительно)	3 (удовлетворительно)	4 (хорошо)	5 (отлично)
< 50	50-64	65-84	85-100