

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)»**



«УТВЕРЖДАЮ

**Проректор по учебной работе
и экономическому развитию**

_____ **Д.А. Зубцов**

Рабочая программа дисциплины (модуля)

по дисциплине: Динамика элементарных химических процессов
по направлению: Прикладные математика и физика (бакалавриат)
профиль подготовки: Химическая физика и свойства наноструктур
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра физики супрамолекулярных систем и нанофотоники
курс: 4
квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8(Весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

практические и семинарские занятия: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 12 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 72, всего зач. ед.: 2

Программу составил: М.А. Кожушнер, доктор наук, профессор

Программа обсуждена на заседании кафедры

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой

М.В. Алфимов

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Целью курса является изучение теоретических основ динамики химических процессов в атомах и молекулах.

Задачи дисциплины

- освоение студентами знаний в области теории динамики матрицы плотности;
- приобретение теоретических знаний в области переноса электронов между молекулами и возбуждения электронных уровней;
- изучение влияния колебаний на электронный перенос.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «Динамика элементарных химических процессов» базируется на дисциплинах:

Общая и неорганическая химия;
Физические методы исследований;
Физические методы исследований: лабораторный практикум;
Введение в математический анализ;
Вычислительная математика;
Дифференциальные уравнения;
Линейная алгебра;
Основы химической физики;
Теория вероятностей;
Теория функций комплексного переменного;
Уравнения математической физики;
Общая физика: лабораторный практикум;
Общая физика: термодинамика и молекулярная физика;
Общая физика: оптика;
Аналитическая геометрия;
Основы химической физики: лабораторный практикум;
Кратные интегралы и теория поля;
Общая физика: механика;
Общая физика: электричество и магнетизм;
Многомерный анализ, интегралы и ряды;
Гармонический анализ;
Общая физика: квантовая физика.

Дисциплина «Динамика элементарных химических процессов» предшествует изучению дисциплин:

Научно-исследовательская работа.

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- основы современных представлений в области динамики и кинетики электронных и колебательных процессов;
- основы теории матрицы плотности;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

уметь:

- пользоваться литературой по теории динамики электронных и колебательных процессов в молекулярных системах для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- понять, какие теоретические методы надо применять в соответствии с поставленной задачей по кинетике систем;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента.

владеть:

- химической терминологией и терминологией супрамолекулярной химии;
- методами моделирования процессов самосборки;
- научной картиной мира.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

| № | Тема (раздел) дисциплины | Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу | | | | |
|-----------------------|--|--|------------------------------------|-----------------|--------------------------|----------------|
| | | Лекции | Практические и семинарские занятия | Лаборат. работы | Задания, курсовые работы | Самост. работа |
| 1 | Понятие о матрице плотности системы | 2 | | | | 1 |
| 2 | Матрица плотности двухуровневой системы | 4 | | | | 1 |
| 3 | Теория неадиабатических переходов | 2 | | | | 1 |
| 4 | Теория многофононных электронных переходов | 6 | | | | 1 |
| 5 | Теория электронного туннельного и резонансного перенос | 8 | | | | 5 |
| 6 | Перенос энергии электронного возбуждения | 4 | | | | 1 |
| 7 | Статистические и динамические теории адиабатических переходов – химических реакций | 2 | | | | 1 |
| 8 | Миграция атомов и молекул по поверхности | 2 | | | | 1 |
| Итого часов | | 30 | | | | 12 |
| Подготовка к экзамену | | 30 час. | | | | |

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 8 (Весенний)

1. Понятие о матрице плотности системы

1. Основные положения квантовой механики.
2. Случайные изменения параметров системы и необходимость введения матрицы плотности.
3. Матрица плотности, запись в различных представлениях. Уравнение для матрицы плотности – кинетика.

2. Матрица плотности двухуровневой системы

1. Выделение из гамильтониана возмущения. Задание случайных функций.
2. Основные характеристики случайных процессов.
3. Методы решения уравнений для матрицы плотности.
4. Переходы Дирака и Бломбергена.

3. Теория неадиабатических переходов

1. Адиабатические термы. Пересечение термов, взаимодействие между ними.
2. Теория возмущений – неадиабатические переходы Ландау.
3. Общая теория Зинера неадиабатических переходов.
4. Стационарность адиабатических термов.

4. Теория многофононных электронных переходов

1. Три причины возможности многофононных переходов.
2. Основные параметры оптических и безизлучательных переходов. Влияние сдвига положений равновесия и частот фононов.
3. Вывод выражения для вероятности много-колебательного перехода методом образующего полинома.
4. Учёт не-кондоновских поправок к волновым функциям.
5. Высокотемпературный предел. Энергия реорганизации
6. Низкотемпературный предел.
7. Перенос электрона в полярной среде.
8. Переход к адиабатическим переходам по коллективной координате.

5. Теория электронного туннельного и резонансного перенос

1. Асимптотика электронной волновой функции.
2. Функция Грина электрона, её выражение при отрицательных энергиях.
3. Влияние кристаллической среды на туннельный перенос.
4. Обобщенная электронно-колебательная асимптотика волновой функции. Нарушения адиабатического приближения в асимптотике.
5. Общее выражение для вероятности перехода. Зависимость энергии реорганизации от донорно-акцепторного расстояния .

6. Переход к высокотемпературному пределу классического движения ядер. Зависимость энергии активации от донорно-акцепторного расстояния.
7. Влияние промежуточных молекул – мостиковый эффект в туннелировании
8. Резонансный перенос электрона через молекулу, электронная и дырочная составляющие.

6. Перенос энергии электронного возбуждения

1. Индуктивно-резонансный механизм. Теория Фёрстера –Декстера.
2. Переходы через виртуальные экситоны. Триплет-триплетный перенос.
3. Тушение возбуждения при различных концентрациях доноров и акцепторов. Кинетические зависимости тушения.

7. Статистические и динамические теории адиабатических переходов – химических реакций

1. Три условия применимости теории переходного состояния (ТПС).
2. Вывод выражения для константы скорости по ТПС в одномерном случае.
3. Общее выражение для константы скорости для многомерной системы.
4. Трансмиссионный коэффициент и учёт квантовых поправок.
5. Условия применимости теории РРКМ.
6. Основное выражение для константы скорости. Предел сильных и слабых столкновений в мономолекулярном распаде.
7. Уравнение Ланжевена. Связь трения и случайных сил.
8. Модель Цванцига для квази-случайных сил в среде.
9. Вывод уравнения Крамерса для функции распределения в фазовом пространстве.
10. Константа скорости для случаев сильного и слабого трения. Области применимости этих предельных случаев.
11. Общая интерполяционная формула для константы скорости. Сравнение со статистическими теориями.

8. Миграция атомов и молекул по поверхности

1. Основные условия миграции. Взаимодействие частицы с фононами – слабое трение.
2. Точное решение одномерной модели. Длинные скачки.
3. Реализация длинных скачков в реалистической двумерной модели. Экспериментальное наблюдение в СТМ.
4. Влияние длинных скачков на диффузионный предел поверхностных реакций.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое оборудование для лекций и практических занятий: компьютер и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная литература

1. Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Квантовая механика, Наука, Москва, 1995
2. М.А. Kozhushner, Chapter 2, Conventional theory of multi-phonons electron transitions, Chapter 3, Contemporary theory of electrons tunneling in condensed matter, в книге серии "Physico-chemical phenomena in thin films and at solid surfaces (Thin films and nanostructures)" v. 34 (2007), Elsevier
3. P.Hånggi, P. Talkner, M. Borkovec, Reakction-rate theory: fifty years after Kramers, Review of Modern Physics 62, 251-340 (1990).

Дополнительная литература

1. А. Абрагам, Ядерный магнетизм, ИЛ Москва, 1963
2. А.И.Бурштейн, Лекции по курсу «Квантовая кинетика» ч. I, Издание Новосибирского ГУ, 1968
3. Ю.Е. Перлин, Современные методы теории многофононных процессов, УФН 80, 553-595 (1963)
4. В.Л.Ермолаев, Е.Н.Бодунов, Е.Б.Свешникова, Т.А.Шахвердов, Безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения, Наука, 1977
5. В.М.Агранович, М.Д.Галанин, Перенос энергии электронного возбуждения в конденсированных средах, Наука, 1978
6. В.Н.Кондратьев, Е.Е.Никитин, А.И.Резников, С.Я.Уманский, Термические бимолекулярные реакции в газах, Наука, 1976
7. Н.М.Кузнецов, Кинетика мономолекулярных реакций, Наука, 1982
8. М.А.Кожушнер, А.С.Простнев, Б.Р.Шуб, Миграция и химические реакции адсорбированных атомов при большой длине прыжка, Химическая физика 5, 85-97 (1986)
9. М.А.Kozhushner, Y.Georgievskii, and E.Pollak, Activated Surface Diffusion: Are Correlated Hops the Low or the Exception?, J.Chem.Phys. 132, 1536-1549 (1995).

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

<http://www.springerlink.com>, <http://www.sensors-research.com>, <http://www.nanojournal.ru>,
<http://pubs.acs.org>.

8. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

9. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения

Приложение

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

по направлению: Прикладные математика и физика (бакалавриат)
профиль подготовки: Химическая физика и свойства наноструктур
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра физики супрамолекулярных систем и нано
курс: 4
квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8(Весенний) - Экзамен

Разработчик: М.А. Кожушнер, доктор наук, профессор

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Динамика элементарных химических процессов» обучающийся должен:

знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- основы современных представлений в области динамики и кинетики электронных и колебательных процессов;
- основы теории матрицы плотности;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

уметь:

- пользоваться литературой по теории динамики электронных и колебательных процессов в молекулярных системах для быстрого поиска необходимых физико-химических данных и понятий;
- понять, какие теоретические методы надо применять в соответствии споставленной задачей по кинетике систем;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента.

владеть:

- химической терминологией и терминологией супрамолекулярной химии;
- методами моделирования процессов самосборки;
- научной картиной мира.

3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

1. Случайные изменения параметров системы и необходимость введения матрицы плотности.
2. Уравнение для матрицы плотности
3. Основные характеристики случайных процессов.
4. Переходы Дирака и Бломбергена
5. Адиабатические термы. Пересечение термов, взаимодействие между ними.
6. Неадиабатические переходы Ландау.
7. Общая теория Зинера неадиабатических переходов.
8. Влияние сдвига положений равновесия и частот фононов на переход.
9. Выражения для вероятности много-колебательного перехода
10. Высокотемпературный предел. Энергия реорганизации.
11. Низкотемпературный предел.
12. Перенос электрона в полярной среде.
13. Функция Грина электрона, её выражение при отрицательных энергиях
14. Влияние кристаллической среды на туннельный перенос.
15. Нарушения адиабатического приближения в асимптотике
16. Влияние промежуточных молекул – мостиковый эффект в туннелировании
17. Резонансный перенос электрона через молекулу, электронная и дырочная составляющие

18. Индуктивно-резонансный механизм. Теория Фёрстера –Декстера
19. Выражение для константы скорости по ТПС в одномерном случае.
20. Уравнение Ланжевена. Связь трения и случайных сил.
21. Уравнение Крамерса для функции распределения в фазовом пространстве.
22. Влияние длинных скачков на диффузионный предел поверхностных реакций.

4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.