

**Санкт-Петербургский государственный университет**

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Теория матрицы плотности  
Density Matrix Theory

**Язык(и) обучения**

русский

Трудоемкость в зачетных единицах: 3

Регистрационный номер рабочей программы: 032194

## **Раздел 1. Характеристики учебных занятий**

### **1.1. Цели и задачи учебных занятий**

Целью курса является изучение учащимися основных разделов теории матрицы плотности и её применения в ядерном магнитном резонансе; развитие у учащихся навыков самостоятельного применения методов квантовой механики для расчетов одномерных спектров ЯМР; обеспечение базы для усвоения теории и практики двумерной спектроскопии ЯМР.

Основная задача курса — обучение студентов методам вычисления эволюции матрицы плотности в ходе сложных многоимпульсных ЯМР-экспериментов; формирование у студентов понимания происхождения корреляционных характеристик спектров ЯМР и понимания физических основ экспериментов по переносу когерентности в ЯМР.

### **1.2. Требования подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты)**

Для успешного освоения программы дисциплины студенты должны прослушать курс «Теория спектров ядерного магнитного резонанса» в 1-ом семестре, а также знать основы квантовой механики в объёме бакалавриата по направлениям «Физика» или «Прикладные математика и физика».

### **1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)**

В результате освоения дисциплины студенты должны:

- знать основы теории матрицы плотности;
- уметь вычислять эволюцию матрицы плотности в многоимпульсных ЯМР-экспериментах в простых спиновых системах;
- знать операторы, которые определяют эволюцию матрицы плотности.

### **1.4. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий**

предзамена консультации 2 часа, экзамен 2 часа

## Раздел 2. Организация, структура и содержание учебных занятий

### 2.1. Организация учебных занятий

#### 2.1.1 профиль Магнитный резонанс. Физические аспекты и приложения

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся																	
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Контактная работа обучающихся с преподавателем											Самостоятельная работа				Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	Трудоёмкость
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	итоговая аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	сам. раб. с использованием методических материалов	текущий контроль (сам.раб.)	промежуточная аттестация (сам.раб.)		
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>																	
<b>Форма обучения: очная</b>																	
Семестр 2	32		2					2				43		29		4	3
	2-100		2-100					2-100				1-1		1-1			
<b>ИТОГО</b>	<b>32</b>		<b>2</b>					<b>2</b>				<b>43</b>		<b>29</b>			<b>3</b>

Виды, формы и сроки текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации						
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Формы текущего контроля успеваемости		Виды промежуточной аттестации		Виды итоговой аттестации (только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ)	
	Формы	Сроки	Виды	Сроки	Виды	Сроки
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>						
<b>Форма обучения очная</b>						
Семестр 2			экзамен, устно, традиционная форма	по графику промежуточной аттестации		

## 2.1.2 профиль Экспериментальная физика

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся																		
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Контактная работа обучающихся с преподавателем											Самостоятельная работа					Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	Трудоёмкость
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	итоговая аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	сам. раб. с использованием методических материалов	текущий контроль (сам.раб.)	промежуточная аттестация (сам.раб.)	итоговая аттестация (сам.раб.)		
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>																		
<b>Форма обучения: очная</b>																		
Семестр 2	32		2					2				43		29		4	3	
	2-100		2-100					2-100				1-1		1-1				
<b>ИТОГО</b>	<b>32</b>		<b>2</b>					<b>2</b>				<b>43</b>		<b>29</b>		<b>4</b>	<b>3</b>	

Виды, формы и сроки текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации						
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Формы текущего контроля успеваемости		Виды промежуточной аттестации		Виды итоговой аттестации (только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ)	
	Формы	Сроки	Виды	Сроки	Виды	Сроки
<b>ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ</b>						
<b>Форма обучения: очная</b>						
Семестр 2			экзамен, устно, традиционная форма	по графику промежуточной аттестации		

## 2.2. Структура и содержание учебных занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела, части)	Вид учебных занятий	Количество часов
0	ВВЕДЕНИЕ	Лекции	2
1	ОБЩАЯ ТЕОРИЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ	Лекции	8
		по методическим материалам	3
2	СПИНОВЫЙ ГАМИЛЬТониАН И КОГЕРЕНТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ	Лекции	10
		по методическим материалам	3
3	ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РЕЛАКСАЦИИ	Лекции	8
		по методическим материалам	2
4*	ПРИМЕНЕНИЕ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ В ДРУГИХ ОБЛАСТЯХ ФИЗИКИ*	Лекции	2*
		по методическим материалам	1*
5	Экзамен	консультации	2
		Пром. аттестация (аудитор.)	2
		Сам.раб. (пром. аттестация)	23

\* Примечание: раздел 4 читается только студентам профиля «Экспериментальная физика». Вопросы на экзамене по теме 4 включены в билеты только данного профиля.

РАЗДЕЛ 0. ВВЕДЕНИЕ (лекции – 2 часа)

Чистые и смешанные состояния спиновой системы, матрица плотности.

РАЗДЕЛ 1. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ (лекции – 8 часов)

Чистые и смешанные квантовые состояния, основные свойства матрицы плотности, когерентность, когерентная суперпозиция. Операторы, супероператоры

РАЗДЕЛ 2. СПИНОВЫЙ ГАМИЛЬТониАН И КОГЕРЕНТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ (лекции – 10 часов)

Гамильтонианы магнитных взаимодействий. Эволюция матрицы плотности при воздействиях на спиновую систему. Перенос когерентности в ходе ЯМР-экспериментов.

РАЗДЕЛ 3. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РЕЛАКСАЦИИ (лекции – 8 часов)

Оператор магнитной релаксации, уравнения для матрицы плотности диссипативных квантовых систем, основное кинетическое уравнение, продольная и поперечная релаксация, спиновое эхо. Основные свойства оператора релаксации.

### **Раздел 3. Обеспечение учебных занятий**

#### **3.1. Методическое обеспечение**

##### **3.1.1 Методические указания по освоению дисциплины**

Для успешного освоения дисциплины студенты должны посещать лекционные занятия и конспектировать лекции. Перед занятиями студентам рекомендуется прочитать конспект предыдущей лекции и ознакомиться с темой предстоящей лекции (по п. 2.2 данной программы дисциплины). В конце лекции студенты могут задать лектору уточняющие вопросы по изложенной теме.

##### **3.1.2 Методическое обеспечение самостоятельной работы**

Для самостоятельной работы студенты должны использовать рекомендуемую литературу и повторять самостоятельно теоретические выкладки, изучаемые на предыдущих лекциях. Рекомендуется использовать методические материалы и указания, расположенные на сайте преподавателя. Не рекомендуется использовать материалы из Интернет-ресурса wikipedia.org.

##### **3.1.3 Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания**

Промежуточная аттестация проводится в виде устного экзамена в традиционной (устной) форме. В билете содержится 2 вопроса. На подготовку к ответу студенту даётся не менее 40 минут, но не более 60 минут. Студент готовит конспект ответа, содержащий основные формулы, математические выкладки, иллюстрации, графики. Во время ответа студент должен связно изложить и раскрыть тему каждого из вопросов. Во время ответа преподаватель может задать уточняющие вопросы по теме вопроса. После ответа на основные вопросы билета, преподаватель вправе задать дополнительные вопросы по любой теме из списка вопросов, вынесенных на экзамен. В качестве дополнительных, используются вопросы, не требующие длительного вывода и трудоемких вычислений, в том числе определения, основные формулы, основные графики.

Критерии выставления оценок за экзамен.

Оценка «отлично» выставляется, если выполняются оба условия:

1. обучающимся даны полные исчерпывающие ответы по всем вопросам билета, обучающийся свободно ориентируется в материале;
2. обучающийся отвечает на все дополнительные вопросы.

Оценка «хорошо» выставляется, если выполняются оба условия

1. обучающимся дан полный ответ на первый вопрос билета, по второму вопросу написаны основные определения, формулы и графики (в случае наличия);
2. обучающийся отвечает более чем на половину дополнительных вопросов.

Оценка «удовлетворительно» выставляется, если выполняются оба условия

1. обучающимся даны основные определения, формулы и графики (в случае наличия) при ответе на каждый вопрос;
2. обучающийся дает правильный ответ более чем на треть заданных дополнительных вопросов.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если не выполняются условия для получения оценок «отлично», «хорошо» и «удовлетворительно».

### **3.1.4 Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы, оценочные средства)**

Примерный список тем, выносимых на экзамен:

- 1) Чистые и смешанные состояния спиновой системы.
- 2) Основные свойства матрицы плотности
- 3) Когерентность состояний
- 4) Эволюция матрицы плотности
- 5) Операторы спиновых взаимодействий
- 6) Оператор релаксации
- 7) уравнение для матрицы плотности в диссипативной системе
- 8) продольная ядерная магнитная релаксация, описание с помощью матрицы плотности
- 9) поперечная ядерная магнитная релаксация, описание с помощью матрицы плотности
- 10) спиновое эхо
- 11) перенос когерентности в ходе ЯМР-экспериментов

### **3.1.5 Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса**

#### **3.2. Кадровое обеспечение**

##### **3.2.1 Образование и (или) квалификация штатных преподавателей и иных лиц, допущенных к проведению учебных занятий**

К чтению лекций должны привлекаться преподаватели, имеющие ученую степень кандидата или доктора физико-математических наук, проводящие научную работу в области магнитного резонанса и имеющие научные публикации по теме спектроскопии магнитного резонанса.

##### **3.2.2 Обеспечение учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом**

Не требуется.

#### **3.3. Материально-техническое обеспечение**

##### **3.3.1 Характеристики аудиторий (помещений, мест) для проведения занятий**

Стандартная лекционная аудитория.

##### **3.3.2 Характеристики аудиторного оборудования, в том числе неспециализированного компьютерного оборудования и программного обеспечения общего пользования**

В лекционной аудитории: компьютерный видеопроектор, компьютер (стационарный или переносной) с ОС Windows или Linux и программой показа презентаций MS PowerPoint или Adobe Acrobat, подключенный к видеопроектору, экран, доска для письма маркерами или мелом, маркеры или мел цветные (4 цвета).

##### **3.3.3 Характеристики специализированного оборудования**

Специальное оборудование не требуется.

##### **3.3.4 Характеристики специализированного программного обеспечения**

Специализированное ПО не требуется.

##### **3.3.5 Перечень и объёмы требуемых расходных материалов**

- 1) Цветные мелки или цветные маркеры для доски (в соответствии с оборудованием лекционной аудитории), комплект 4 цвета, один комплект в семестр.
- 2) Бумага белая А4 для проведения экзамена – 50 листов в семестр.

#### **3.4. Информационное обеспечение**

##### **3.4.1 Список обязательной литературы**

1. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. – М.: Мир, 1990.
2. Квантовая радиофизика: магнитный резонанс и его приложения. Учеб. пособие, 2-е изд. / под ред. проф. В. И. Чижика – СПб: изд-во СПбГУ, 2009. – 700 с.

#### **3.4.2 Список дополнительной литературы**

1. К. Блум. Теория матрицы плотности и её приложения. – М.: Мир, 1983. – 248 с.

#### **3.4.3 Перечень иных информационных источников**

- 1) <http://nmr.phys.spbu.ru/~komolkin/density-5k/>

#### **Раздел 4. Разработчики программы**

Андрей Владимирович Комолкин, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры ядерно-физических методов исследования СПбГУ.