

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (kodas)	Fakultetas	Centras/Institutas/Skyrius
Rinktiniai teorinės fizikos skyriai (10 ECTS kreditų)	Fizika N 002	Fizikos	Cheminės fizikos institutas
Studijų būdas	Valandų skaičius	Studijų būdas	Valandų skaičius
Paskaitos		Konsultacijos	50
Individualus	200	Seminarai	

Dalyko anotacija			
<p>Klasikiniai stochastiniai vyksmai ir jų modeliavimas Markovo grandinės. Čapmano–Kolmogorovo lygtis. Šakojimosi vyksmai. Fokero–Planko lygtis. Tolydžiojo laiko atsitiktinis klaidžiojimas. Difuziniai vyksmai. Anomalioji difuzija.</p> <p>Negrižtamumas klasikinėje fizikoje. Sistemos sąveika su termostatu. Liuvilio lygtis. Pagrindinė kinetinė lygtis. Hidrodinaminės lygtys. Fliuktuacinė–disipacinė teorema. BBGKY lygčių grandinė.</p> <p>Reliatyvistinė kvantinė mechanika ir įvadas į kvantinę lauko teoriją Kleino–Gordono lygtis. Dirako lygtis. Kvantinės mechanikos lygčių formulavimas naudojant Lagranžo formalizmą. Evoliucijos operatorius. Integravimo pagal trajektorijas metodas. Tapatingųjų dalelių antrinis kvantavimas. Lauko operatoriai. Elektromagnetinio lauko kvantavimas. Kazimiro efektas.</p> <p>Atvirųjų kvantinių sistemų teorija Tankio operatorius. Redukuotasis tankio operatorius. Sąveikos atvaizdavimas. Negrižtamumas kvantinėje mechanikoje. Disipacija ir dekoherencija. Projektijos superoperatoriai. Fiorsterio ir Redfildo pernašos spartos.</p>			
Pagrindinė literatūra			
<ol style="list-style-type: none"> 1. J. Chmeliov, V. Butkus, L. Valkūnas. Kvantinė fizika, Vilniaus universiteto leidykla, 2020. 2. S. Weinberg. The Quantum Theory of Fields. Cambridge University Press, 1995. 3. M. O. Caceres. Non-equilibrium Statistical Physics with Application to Disordered Systems, Springer, 2017. 4. V. May, O. Kühn, Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems, Wiley, 2011. <p>M. Yang and G. R. Fleming, Chem. Phys. 275, 355 (2002).</p>			
Konsultuojantys dėstytojai	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Jevgenij Chmeliov	dr.	doc.	<ol style="list-style-type: none"> 1. V. Mascoli, A. Gelzinis, J. Chmeliov, L. Valkūnas, R. Croce, “Light-Harvesting Complexes Access Analogue Emissive States in Different Environments”, Chemical Science, 2020, 11, 5697. 2. H. van Amerongen, J. Chmeliov, “Instantaneous Switching between Different Modes of Non-Photochemical Quenching in Plants. Consequences for Increasing Biomass Production”, Biochimica et

			<p>Biophysica Acta – Bioenergetics, 2020, 1861, 148119.</p> <p>3. M. Tutkus, F. Saccon, J. Chmeliov, O. Venckus, I. Ciplys, A. V. Ruban, L. Valkunas, “Single-molecule microscopy studies of LHCII enriched in Vio or Zea”, Biochimica et Biophysica Acta – Bioenergetics, 2019, 1860, 499–507.</p> <p>4. S. Farooq, J. Chmeliov, E. Wientjes, R. Koehorst, A. Bader, L. Valkunas, G. Trinkunas, H. van Amerongen, “Dynamic feedback of the photosystem II reaction center on photoprotection in plants”, Nature Plants, 2018, 4, 225–231.</p> <p>5. M. Tutkus, J. Chmeliov, D. Rutkauskas, A. V. Ruban, L. Valkunas, “Influence of the Carotenoid Composition on the Conformational Dynamics of Photosynthetic Light-Harvesting Complexes”, The Journal of Physical Chemistry Letters, 2017, 8, 5898–5906.</p>
Andrius Gelžinis	dr.	doc.	<p>1. A. Gelžinis, D. Abramavicius, J. P. Ogilvie, L. Valkunas, Spectroscopic properties of photosystem II reaction center revisited, J. Chem. Phys. 147, 115102, 2017.</p> <p>2. A. Gelžinis, E. Rybakovas, L. Valkunas, Applicability of transfer tensor method for open quantum system dynamics, J. Chem. Phys. 147, 234108, 2017.</p> <p>3. E. Rybakovas, A. Gelžinis, L. Valkunas, Simulations of absorption and fluorescence lineshapes using the reaction coordinate method, Chem. Phys. 515, 242–251, 2018.</p> <p>4. A. Gelžinis, L. Valkunas, Analytical derivation of equilibrium state for open quantum system, J. Chem. Phys. 152, 051103, 2020. A. Gelžinis, E. Rybakovas, L. Valkunas, Applicability of transfer tensor method for open quantum system dynamics, J. Chem. Phys. 147, 234108, 2017.</p> <p>5. Y. Braver, L. Valkunas, A. Gelžinis, Benchmarking the forward–backward trajectory solution of the quantum-classical Liouville equation, J. Chem. Phys. 152, 214116, 2020.</p>
Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2022 m. vasario 02 d., protokolo Nr. (7.17 E) 15600-KT-32			
Komiteto pirmininkas S. A. Juršėnas			