

## VIZSGATÉTELEK

Elméleti Kémia, II. éves vegyész, 2009/2010. tanév II. félév

### I. Az atomok és molekulák elektronszerkezete

1. A klasszikus mechanikával nem magyarázható jelenségek. Hullám-részecske kettősség, az elektromágneses tér, illetve az anyag kvantáltsága (példákon keresztül). A kvantummechanika posztulátumai.
2. A kvantummechanika fontos fogalmai: fizikai mennyiségek, ezek mérése, állapotfüggvény, várhatóérték, stacionárius állapotok; fizikai mennyiségek egyidejű mérése, Heisenberg-féle bizonytalansági elv; a szimmetria és az irreducibilitási posztulátum.
3. Példa a Schrödinger-egyenlet analitikus megoldására: a potenciáldoboz. Sajátfüggvények, sajátértékek, kvantáltság, zéruspont-energia, degeneráció, mint a szimmetria következménye. Az impulzusmomentum operátorok: felcserélési relációk és sajátérték-problémák.
4. A H-atom: a Schrödinger-egyenlete megoldásának elve, sajátértékek, sajátfüggvények, kvantumszámok. Degeneráció, hullámfüggvény és ennek ábrázolása. Elektronsűrűség, az 'atomsugár' kérdése, fizikai mennyiségek várható értéke.
5. A H-atom: mágneses momentum, külső mágneses tér hatása. A spin fenomenologikus beépítése a kvantummechanikába, a Zeeman-effektus.
6. Több-elektronos rendszerek tárgyalásának alapelvei: a Hamilton-operátor és a hullámfüggvény általános alakja, különböző szintű közelítései; a független-elektron-modell (F.E.M.); a Hartree-módszer intuitív megfogalmazása. A Pauli-elv (a 5+2. posztulátum), a F.E.M. modell általánosabb formája: a Slater-determináns, a Hartree–Fock (HF) módszer. A HF módszer eredményeinek értelmezése: pálya, pályaenergia, Koopmans-elv.
7. Atomok elektronszerkezete a F.E.M. keretében: pálya, pályaenergia, héj, elektronkonfiguráció, Aufbau-elv, a több-elektronos impulzusmomentum-operátor. Az atom állapotainak egzakt jellemzése és jelölése; Hund-szabályok, spin-pálya kölcsönhatás; teljes impulzusmomentum-operátor.
8. Molekulák elektronszerkezete: a Born–Oppenheimer közelítés, a Hamilton-operátor. A  $H_2^+$  ion. Pályák alakja, energia a kötőhossz függvényében. Közelítő megoldások: Az LCAO-MO módszer. Hidrogén molekula elektronszerkezete MO és VB leírásban.
9. A kétatomos molekulák elektronszerkezetének jellemzése az MO elmélet keretében: egyelektron függvények, ezek alakja és szimmetriája. A pályák betöltésének elv, a konfiguráció, kötésrend és állapot meghatározása. Heteronukleáris kétatomos molekulák.
10. A vízmolekula elektronszerkezetének kvalitatív tárgyalása az MO elmélet alapján. A szimmetria szerepe. Kanonikus és lokalizált pályák, ezek kapcsolata.
11. A vízmolekula elektronszerkezetének leírása a VB elmélet szerint. Hibridpályák. A VB elmélet és a Lewis-féle szerkezeti képlet kapcsolata.
12. Többatomos molekulák elektronszerkezetének kvalitatív tárgyalása a VB elmélet alapján: metán, etilén, acetilén, ammónia, allil-gyök.
13. Konjugált  $\pi$  -rendszerek. A Hückel-közelítés. Alkalmazás etilénre, butadiénre és benzolra.
14. Átmenetifém-komplexek elektronszerkezete a Kristálytér- és a Ligandumtér-elméletek keretében.

## II. A szerkezetkutató módszerek elmélete

1. A szerkezetkutató módszerek általános áttekintése, története. Molekulaspektroszkópia és kvantumkémia: közelítések, energiaszintek, kiválasztási szabályok. Az elektromágneses spektrum.
2. A kísérleti módszerek általános jellemzői. Sugárzás és anyag kölcsönhatása. Lézerhatás és a lézerek.
3. Forgási spektroszkópia I. Többatomos molekulák forgásának klasszikus mechanikája. Forgási pörgettyű típusok.
4. Forgási spektroszkópia II. Többatomos molekulák forgásának kvantummechanikája. Energiaszintek és kiválasztási szabályok.
5. Rezgési spektroszkópia I. Alapelvek. Többatomos molekulák rezgésének klasszikus leírása. Normálkoordináták.
6. Rezgési spektroszkópia II. Molekularezgések kvantummechanikai tárgyalása. A harmonikus lineáris oszcillátor.
7. Rezgési spektroszkópia III. Szimmetria és a rezgési spektrum. Kiválasztási szabályok. Belső koordináták. Molekulamechanika.
8. Rezgési spektroszkópia IV. Rezgési Raman spektroszkópia. Kiválasztási szabályok. Depolarizálhatóság.
9. Elektronspektroszkópia I. A látható-ultraibolya (UV-VIS) spektroszkópia alapelvei. Jablonski diagram. Kiválasztási szabályok.
10. Elektronspektroszkópia II. Elektronszínképek rezgési finomszerkezete (Franck–Condon elv). Radiatív és nem-radiatív folyamatok: belső konverzió, spinváltó átmenet, disszociáció és predisszociáció, fluoreszcencia és foszforeszcencia.
11. Elektronspektroszkópia III. A fotoelektron-spektroszkópia (UPS és XPS).
12. A gáz-elektron-diffrakció.
13. NMR I. A magmágneses rezonancia-spektroszkópia módszerek általános elvei. Az NMR mérés.
14. NMR II. Kémiai eltolódás és spin-spin csatolás. Példák egyszerű spektrumok értelmezésére.

**A vizsga beugró dolgozattal kezdődik. Itt legalább 50 (azaz ötven) %-ot kell elérni, ez alatt a vizsga elégtelen. Sikeres beugró után a vizsgázó két tételt húz, egyet-egyét az I. illetve II. részből.**

**Budapest, 2010. május 10.**

**Császár Attila, Szalay Péter**