

Vizsgatételek

Érdekességek az elméleti kémia tárgyköréből

II. éves vegyész, 2005-2006. tanév II. félév

1. A kvantummechanika és a klasszikus mechanika kapcsolata: bizonytalansági relációk makroszkopikus mozgásokra; hullámfüggvények szuperpozíciójaként előálló hullámcsomagok.
2. Operátorok időfüggése: az Ehrenfest-tétel; a viriáltétel.
3. A Schrödinger-egyenlet megoldási módszerei: perturbációszámítás, variációszámítás. Példák, pl. a részecske perturbált dobozban.
4. Részecskék külső elektromágneses térben: a Lorentz-erőtér klasszikus és kvantumos leírása. A Dirac-egyenlet és klasszikus határesetek. Relativisztikus és nem-relativisztikus effektusok.
5. Az atomok elektronszerkezete: konfiguráció és állapot kapcsolata; állapotok egzakt jellemzése; spin-pálya kölcsönhatás.
6. A Born-Oppenheimer közelítés és teljesítőképessége. Adiabtikus és „nem-adiabtikus” mennyiségek.
7. A Hartree-Fock módszer: a H_2 molekula energiája determináns hullámfüggvénnyel; a HF módszer levezetésének fontosabb lépései. A HF módszer típusai.
8. A kvantumkémiai számításokban használt bázisok: Slater- és Gauss-függvények; kontrahálás fogalma; a bázisok jelölése.
9. A Hartree-Fock módszerrel innen és túl: félempirikus módszerek elve, az elektronkorreláció fogalma, az ezt leíró módszerek lényege. A DFT módszerek elvi alapjai.
10. Periodikus rendszerek kvantummechanikai tárgyalása.
11. A viriáltétel és spektroszkópiái következményei, asztrokémia és spektroszkópia.
12. Szerkezeti paraméterek meghatározása forgási színeképekből.
13. A GF és az SQM módszerek rezgési színeképek számítására.
14. Kiválasztási szabályok meghatározása egyszerű modell rendszerekre (potenciálgödör, harmonikus lineáris oszcillátor).
15. Anharmonikus oszcillátorok.
16. A Hückel-modell végtelen láncokra, elektronszíneképek meghatározása a modell keretén belül.
17. A spin-spin csatolás kvantummechanikai tárgyalása.

Budapest, 2006. május 18.

Császár Attila, Szalay Péter