



# TANTÁRGYI ADATLAP

<b>Tárgy neve:</b>		<b>Kódja:</b>	
Elméleti szervetlen kémia		VEMKAKM112E	
Theoretical Inorganic Chemistry			
<b>Tárgyfelel s oktató:</b>		<b>Tárgyfelel s tanszék:</b>	
Kovács Margit		Általános és Szervetlen Kémia	
<b>Elmélet (óra):</b>		<b>Kredit:</b>	<b>Számonkérés:</b>
2 (/hét)		2	Vizsga

<b>A tárgy oktatója:</b>			
név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
Kovács Margit	Elmélet	1	magyar

### Tantárgy képzési célja:

Megismertetni a hallgatókat a kvantumkémiail alapfogalmakkal, az atomok és molekulák elektron és térszerkezetének leírására alkalmas módszerek alapjaival.

### Tantárgy tematikája:

#### 1. Bevezetés

A kvantumelmélet alapjai („részecske-hullám kettős sajátság”, a bizonytalansági relációk) teljesítőképessége és korlátjai, a paradigmaváltás előjelei.

#### 2. A kvantummechanika alapegyenlete; a Schrödinger-féle egyenlet

A hullámfüggvény Born-féle értelmezése

#### 3. A kvantumelmélet alkalmazása egyszerű modellek esetén, a transzlációs mozgás leírása; a „szabad” elektron mozgásának leírása, az „alagút hatás”

#### 4. A „dobozba zárt” elektron probléma megoldása és a megoldás „üzenete”

#### 5. A rezgő mozgás leírása, a harmonikus és az anharmonikus közelítés

#### 6. A forgó mozgás leírása két- és három-dimenzióban, a „tér kvantáltsága”, a vektor modell

#### 7. Elektron- és magspin

#### 8. Az atomok elektronszerkezete és elektrongerjesztési színeke, a hidrogénatom kvantummechanikai leírása

#### 9. A hidrogénnél nagyobb rendszámú atomok elektronszerkezete

#### 10. A többelektronos atomok színeke, spin-pálya csatolás, a term fogalom, Russel-Saunders-féle csatolás, j-j csatolás, Zeeman-hatás

#### 11. A molekulák elektronszerkezete, a Born-Oppenheimer közelítés

#### 12. VB módszer; homonukleáris kétatomos molekulák és többatomos molekulák leírása

#### 13. Az MO módszer; a homonukleáris kétatomos molekulák elektronszerkezete, a heteronukleáris kétatomos molekulák; elektronszerkezete, poláris kötés, a variációs elv, a szekuláris egyenlet

#### 14. Többatomos molekulák elektronszerkezete, a Walsh-féle digrammok, a Hückel-féle közelítés: az etén és a benzol szerkezete

#### 15. A molekulák szimmetria sajátságai



# TANTÁRGYI ADATLAP

**Tantárgy követelménye:**

1. A részecske-hullám kettős sajátság és a bizonytalansági relációk
2. A két rés kísérletek, a kvantummechanikai komplementaritás
3. A Schrödinger-féle egyenlet
4. A szabad elektron mozgásának kvantummechanikai leírása
5. A dobozba zárt elektron probléma megoldása, és az eredmények értelmezése
6. Az alagút effektus
7. A rezgő mozgás kvantummechanikai leírása
8. A két dimenziós forgómozgás kvantummechanikai leírása
9. A háromdimenziós forgómozgás kvantummechanikai leírása
10. A „tér kvantáltsága”
11. A hidrogénatom kvantummechanikai modellje
12. A hidrogénnél nagyobb rendszámú atomok elektronszerkezete
13. A többelektronos atomok színképe, a term fogalom
14. A spin-pálya csatolás és a Zeeman hatás
15. A Russel –Saunders csatolás és a j-j csatolás
16. A vegyértékkötés módszer alkalmazása egyszerű kétatomos molekulák esetén
17. A többatomos molekulák elektronszerkezetének leírása VB módszerrel
18. Néhány  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$ ,  $sp^3d$  és  $sp^3d^2$  hibridizációval leírható molekula jellemzése
19. Az MO módszer alapjai, átfedési integrál fogalma, kötő és lazító molekulapályák
20. Az LCAO-MO módszer alkalmazása homonukleáris kétatomos molekulákra
21. Az LCAO-MO módszer alkalmazása heteronukleáris kétatomos molekulákra
22. A többatomos molekulák elektronszerkezete
23. A Walsh-féle digrammok
24. A Hückel-féle közelítés: az etén és a benzol szerkezete

**Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:**

1. Papp Sándor; Szervetlen Kémia II, Tankönyvkiadó Budapest 1983
2. F. A. Cotton and G. Wilkinson; Advanced Inorganic Chemistry John Wiley and Sons, New York, 1980