



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Kvantumkémia I.		VEMKAKM112K	
Quantum Chemistry I.			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
Lendvay György Dr.		Általános és Szervetlen Kémia	
Elmélet (óra):		Kredit:	Számonkérés:
2 (/hét)		2	Vizsga

A tárgy oktatója:			
név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
Lendvay György Dr.	Elmélet	1	magyar

Tantárgy képzési célja:

A kvantumkémia matematikai apparátusának, fizikai alapjainak és kvantumkémiai programok alkalmazásának megismerése. Bemutatjuk, milyen probléma megoldásához milyen kvantumkémiai módszer használható, milyen pontosság várható, milyen számításgéni szükségesség a feladat megoldásához. A kurzus alapokat nyújt egyrészt a hallgató kémiai gyakorlatában előforduló problémák megoldásához, másrészt mélyebb kvantumkémiai tanulmányok elvégzéséhez.

Tantárgy tematikája:

1. A klasszikus mechanikai ismeretek felrészítése és összefoglalása. Atomok mozgása erőterben.
2. A molekulamechanikai módszerek alapjai. Kvantumjelenségek.
3. A kvantummechanika alapfogalmai (hullámfüggvények és operátorok, velük való műveletek)
4. Kvantummechanikai eljárások: variációszámítás, perturbációszámítás, a változók szétválasztása
5. Könnyen megoldható kvantummechanikai problémák I. Részecske dobozban
6. Könnyen megoldható kvantummechanikai problémák II. Merev pörgettyű. A forgási spektroszkópia alapjai
7. Könnyen megoldható kvantummechanikai problémák III. A rezgő mozgás kvantummechanikai leírása. A rezgési spektroszkópia alapjai
8. Az atomok hullámfüggvényeinek számítása. I. A hidrogén-atom. Félévközi dolgozat.
9. Az atomok hullámfüggvényeinek számítása. II. A He atom. A Hartree-módszer levezetése heurisztikus és variációs módszerrel.
10. Az elektronspin. Mágneses jelenségek. A Pauli-elv. A He atom tripllett állapota. Jó kvantumszámok fogalma. Spin és impulzuszómentum csatolása. A relativisztikus effektusok alapfogalmai.
11. Az antiszimmetrizáló operátor és alkalmazása; Slater-determinánsok mint atomi hullámfüggvények. A Hartree-Fock módszer elve és levezetése.
12. Molekulák hullámfüggvényeinek számítása. A Born-Oppenheimer közelítés.
13. A H₂⁺ molekulaion. σ és π pályák. Kötő és lazító molekulapályák. Az egyszerű MO elmélet kétatomos molekulákra. A H₂ molekula Hartree-Fock és VB leírása. A mezómer effektus fogalma
14. A Hartree-Fock-Roothaan egyenletek. Konvergenciagyorsító módszerek (szint-eltolás, kvadratikusan konvergens módszer, DIIS). Félévközi dolgozat.
15. Félempirikus módszerek. Kvalitatív képek. Elektronpályák kölcsönhatása.

Tantárgy követelménye:

Kis, 3-4-kérdéses dolgozat minden második órán. Két félévközi zárthelyi 10-12 kérdéssel. A kisdolgozatok átlagában minimum 60%-os, a két félévközi dolgozat átlagában minimum 50%-os teljesítmény szükséges a vizsgára bocsátáshoz.



TANTÁRGYI ADATLAP

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

Kapuy Ede-Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975
Mayer István: Kvantumkémia, Budapest, 1980
M. A. Ratner, G.C. Schatz, Introduction to quantum mechanics in chemistry, Upper Saddle River, NJ, 2001
J. Simons, J. Nichols: Quantum mechanics in chemistry, Oxford University Press, 1997
Ladik János: Kvantumkémia, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1960
Póta György: Elméleti Kémia, jegyzet, Debreceni Egyetem, 2000