



Tárgytematika

Félév:	2009/10/2
Tárgynév:	Elméleti szerves kémia
Tárgykód:	VEMKIK2112K
Felelős szervezet neve:	Általános és Szerves Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKAK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Horváth Attila

Oktatás célja:

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

Tantárgy tartalma:

1. Bevezetés A kvantumelmélet alapjai („részecske-hullám kettős sajátosság”, 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 színe, a hidrogénatom kvantummechanikai leírása 9. A hidrogénnél nagyobb rendszámú atomok elektronszerkezete 10. A többelektronos atomok színe, 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 sajátosságai

Számonkérési és értékelési rendszere:

1. A részecske-hullám kettős sajátosság 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 színe, 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, sp², sp³, sp³d és sp³d² hibridizációval leírható molekula jellemzése 19. Az MO módszer alapjai, átfedési integrál fogalma, kötő és lazító molekulapályák 20. Az LCAO-MO módszer



Tárgytematika

Félév:	2009/10/2
Tárgynév:	Elméleti szervetlen kémia
Tárgykód:	VEMKIK2112K
Felelős szervezet neve:	Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKAK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Horváth Attila

Számonkérési és értékelési rendszere:

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

Kötelező és ajánlott 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