



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Elméleti szerves kémia		VEMKAKM112E	
Theoretical Inorganic Chemistry			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
dr. Valicsek Zsolt		Általános és Szerves Kémia Intézeti Tanszék	
Elmélet (óra):		Kredit:	Számonkérés:
2 (/hét)		2	Vizsga

A tárgy oktatója:

név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
dr. Valicsek Zsolt	Elmélet	1	magyar

Tantárgy képzési célja:

Megismertetni a hallgatókat a kvantumkémiai 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 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 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 színeképe, 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 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