



Tárgytematika

Félév:	2012/13/1
Tárgynév:	Kvantumkémia I.
Tárgykód:	VEMKAKM112K
Felelős szervezet neve:	Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKAK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Lendvai György

Oktatás célja:

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

Tantárgy tartalma:

1. A klasszikus mechanikai ismeretek felfrissítése és összefoglalása. Atomok mozgása erőterben. 2. A molekulamechanikai módszerek alapjai. Kvantumjelenségek. 3. A kvantummechanika alapfogalmai (hullámfüggvények és operátorok, velük való műveletek) 4. Kvantummechanikai eljárások: variációs számítás, perturbációs számítás, 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 triplétt állapota. Jó kvantumszámok fogalma. Spin és impulzusmomentum 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 mezomer 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.

Számonkérési és értékelési rendszere:

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.

Kötelező és ajánlott irodalom:

Kapuy Ede-Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975



Tárgytematika

Félév:	2012/13/1
Tárgynév:	Kvantumkémia I.
Tárgykód:	VEMKAKM112K
Felelős szervezet neve:	Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKAK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Lendvay György

Kötelező és ajánlott irodalom:

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