



## Tárgytematika

<b>Félév:</b>	2015/16/2
<b>Tárgynév:</b>	Elméleti szervetlen kémia
<b>Tárgykód:</b>	VEMKAKM112E
<b>Felelős szervezet neve:</b>	Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék
<b>Felelős szervezet kódja:</b>	MKAK
<b>Tárgyfelelős neve:</b>	Dr. Valicsek Zsolt

---

### Oktatás célja:

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

### Tantárgy tartalma:

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 translációs 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 elektroszerkezete, a Walsh-féle digrammok, a Hückel-féle közelítés: az etén és a benzol szerkezete 15. A molekulák szimmetria sajátságai

### Számonkérési és értékelési rendszere:

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 színeke, 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<sup>2</sup>, sp<sup>3</sup>, sp<sup>3</sup>d és sp<sup>3</sup>d<sup>2</sup> hibridizációval leírható molekula jellemzése 19. Az MO módszer alapjai, átfedési integrál fogalma, kötő és lazító molekulapályák 20. Az LCAO-MO módszer



## Tárgytematika

<b>Félév:</b>	2015/16/2
<b>Tárgynév:</b>	Elméleti szervetlen kémia
<b>Tárgykód:</b>	VEMKAKM112E
<b>Felelős szervezet neve:</b>	Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék
<b>Felelős szervezet kódja:</b>	MKAK
<b>Tárgyfelelős neve:</b>	Dr. Valicsek Zsolt

---

### 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