

Kvantumkémia, emelt szint
Vizsga tételek

1. **A hidrogén atom Schrödinger-egyenlete.** A tömegközéppont leválasztása. Az elektronra vonatkozó egyenlet megoldása: szeparálási lépések és az egyváltozós problémák megoldása. A kvantumszámok megjelenése. A kontinuum spektrum.
2. **A hidrogén atom megoldásának diszkussziója.** A degeneráció foka, degeneráció és a szimmetria kapcsolata. Csomófelületek, valós lineáris kombinációk. A megoldásfüggvények ábrázolásának technikái. Radiális sűrűség eloszlás. A hidrogén atom sugara. A hullámfüggvény viselkedése a mag helyén: a cusp-kondíció.
3. **A többelektronos atomok.** Hidrogén atom-szerű viselkedés: a törzselektronok energiájának rendszámfüggése és az elektronsűrűség lecsengése a végtelen nagy r határesetében. A többelektronos atomok leírása determináns hullámfüggvénnyel: az egyrészeske-pályák alakja és energiája. Az Aufbau-elv. Elektronhéj és elektronkonfiguráció.
4. **A hidrogén atom homogén külső mágneses térben.** A zérus tér esete: spin-pálya kölcsönhatás, a teljes impulzusmomentum bevezetése. **A többelektronos atomok elektronkonfigurációjának multipliett szerkezete.** Energianívók és elfajultságuk nemrelativisztikus és relativisztikus esetben a He atom $1s^1 2p^1$ konfigurációjának példáján. Hund-szabályok.
5. **A magok és az elektronok hullámfüggvényének szétválasztása** többelektronos rendszerek kezelésére: a Born-Oppenheimer szeparáció.
6. **A Hartree-Fock módszer levezetése.** Az antiszimmetrizáló operátor. Slakáris szorzat és operátor várható értékek ortonormált pályákkal épített determinánsokkal. Az energiafunkcionál variációja, mellékfeltétellel. A Hartree-Fock egyenletek általános és kanonikus alakja.
7. **A Hartree-Fock módszer diszkussziója.** A Fock-operátor hermitikus volta. Pályaenergiák és teljes energia. A pályaenergiák és az ionizáció/elektronaffinitás kapcsolata: a Koopmans-tétel. A szinglett és tripliett egyszeres gerjesztések energiasorrendje. A determináns unitér invarianciája. Kanonikus és lokalizált pályák.
8. **A spin kezelése a Hartree-Fock módszer gyakorlatában.** A térbeli pálya fogalma. A hullámfüggvény, a Fock-operátor és a teljes energia a spin megszorított (RHF) esetben. A spin-megszorítatlan (UHF) eset. Spinkontamináció a kételektronos determináns példáján.
9. **Bázisfüggvények** bevezetése, az LCAO-MO. A Hartree-Fock-Roothan egyenletek. A kvantumkémia bázisfüggvényei. Slater- és Gauss-függvények, ezek előnyei és hátrulői.
10. **A_2 típusú molekulák** leírása a Hartree-Fock módszer keretei között. A H_2^+ minimális bázisban, a kémiai kötés létrejöttének energetikai háttere. Korrelációs diagram, alapállapotú konfiguráció és kötésrend a második periódus diatomos molekuláira: Li_2 , Be_2 , ..., F_2 .
11. **Redukált sűrűségmátrixok.** Az egy- és kétrészeske mátrix származtatása a hullámfüggvényből. A redukált sűrűségmátrixok szemléletes jelentése. Coulomb- és Fermi korreláció. Operátor várható

értékek sűrűségmátrix-szal kifejezve.

12. **A redukált egyrészecske-mátrix.** Kapcsolat az elektronsűrűséggel. Az elektronsűrűség megjelenése a magokra ható erőkben. Bázis bevezetése a redukált egyrészecske-mátrixban. Populációs analízis.

13. **A disszociációs katasztrófa** a minimális bázisú hidrogén molekula példáján. Ionos és kovalens determinánsok. A Heitler-London és a Weinbaum hullámfüggvény. **A vegyértékkötés módszer** alap gondolata. Az egzakt hullámfüggvény **konfigurációs kölcsönhatás (CI) kifejtésére** vonatkozó megközelítés.

14. **A Hückel-módszer.** Szigma-pi szeparáció. A Hückel-mátrix származtatása a pi-elektronok Fock-operátorából. Példák: etilén, butadién.

15. **A kristálytér-felhasadás.** Példa: hidrogén atom oktaéderes kristálytérben, megoldás-vázlat.