

Fizikai kémia (4): Elméleti kémia (kv1c11m1)
Fizikai Kémia (3) (fizkem3k17va) kvantumkémia rész

Vizsgatételek 2018/2019 II. félév

1. Az anyag kettős természete: kísérleti megfigyelések és elméleti magyarázatok. A Bohr-féle atommodell. A kvantummechanika alapelvei: Schrödinger-egyenlet, Hamilton-operátor, állapotfüggvények, mérés, Heisenberg-féle bizonytalansági reláció, potenciáldoboz.
2. Szimmetriák elmélete: szimmetriaműveletek, pontcsoportok, reprezentációk, karaktertábla, a direktszorzat-reprezentáció fogalma.
3. A hidrogénatom kvantummechanikai leírása: H-atom Schrödinger-egyenlete, ennek megoldásai, energia, sajátfüggvények, kvantumszámok, a pályák ábrázolása, elektronsűrűség, atomsugár kérdése, Zeeman-effektus, az elektronspin, spin-pálya kölcsönhatás.
4. Atomok elektronszerkezete: Hamilton-operátor, hullámfüggvény, Schrödinger-egyenlet, Független Elektron Modell, szorzat- és determináns hullámfüggvény, Pauli-elv. Leírás a FEM keretében: energia, pálya, atomi szimmetria, állapotok megszerkesztése, spin-pálya kölcsönhatás, atom mágneses térben.
5. Molekulák elektronszerkezete: Hamilton-operátor, Born-Oppenheimer közelítés, a H_2^+ molekulaion leírása, a kémiai kötés kvantummechanikai magyarázata. LCAO-MO közelítés. A hidrogénmolekula leírása MO, illetve VB elmélet keretében.
6. A kétatomos molekulák elektronszerkezete: molekulapályák, ezek szimmetriája, energiasorrendje, állapotok meghatározása, különösen He_2 , B_2 , O_2 molekulák esetében, heteronukleáris kétatomos molekulák.
7. A vízmolekula elektronszerkezete: MO tárgyalás, molekulapályák, ezek jellemzése (szimmetria), konfiguráció, állapot, lokalizált pályák, hibridpályák. VB leírás hibridpályákkal.
8. Többatomos molekulák elektronszerkezete VB elmélet alapján: metán, etilén, acetilén, ammónia, allil-gyök. Lewis-féle képletírás és a VB elmélet kapcsolata, hibridizáció.
9. A Hückel-féle módszer: közelítések, alkalmazás etilénre, butadiénre, benzolra.
10. Átmenetifém-komplexek elektronszerkezete: kristálytér-elmélet, ligandumtér-elmélet.
11. Szerkezetvizsgáló módszerek elméletének alapjai: spektroszkópiai mérés elve, a spektrumot meghatározó tényezők, a spektroszkópiai módszerek megkülönböztetése energia, illetve a jellemző mozgás alapján.
12. Forgási spektroszkópia: kétatomos molekulák forgásának leírása merev rotátor közelítésben, energiaszintek, kiválasztási szabályok, általánosítás többatomos molekulák esetére, (tehetetlenségi tenzor), pörgettyűtípusok, a forgási spektroszkópia alkalmazásai.

13. Rezgési spektroszkópia: IR és Raman spektroszkópia alapjai, kétatomos molekulák rezgése, harmonikus közelítés, klasszikus és kvantumos leírás, energiaszintek, kiválasztási szabályok, általánosítás többatomos molekulák esetére, belső koordináták, normálkoordináták, szimmetria szerepe, alkalmazások.
14. Elektronspektroszkópia: UV és látható spektroszkópia elvei, kiválasztási szabályok, rezgési finomszerkezet, gyakorlati alkalmazások, gerjesztett állapotok megszűnése (fluoreszcencia, foszforeszcencia). Fotoionizációs spektroszkópia elvi alapjai, kiválasztási szabályok, ESCA.
15. NMR és ESR spektroszkópia: spinrendszer energiájának felhasadása mágneses térben. Az ESR spektroszkópia alapelve, kvantummechanikai alapja, alkalmazása. Az NMR mérés elve, nem nulla spinnel rendelkező atommagok, a spektrum kvalitatív leírása, kémiai eltolódás, spin-spin csatolás.