

A Mathematica alkalmazásai a kémiában

Ferenc Dávid, Jeszenszki Péter, Mátyus Edit

2021. április 9.

A kurzus célja az atomi-molekuláris szemléleten alapuló elemi kémiai példák matematikai nyelvre történő lefordítása és részletes kidolgozása a Mathematica szimbolikus algebra program segítségével. A feladatok természetesen más módon is (gyakran akár papíron-ceruzával is megoldhatóak). Azt gondoljuk azonban, hogy a szimbolikus programkörnyezet (megismerése és begyakorlása) lehetővé teszi a fizikai-kémia jelenségkörben felmerülő ötletek gyors kipróbálását, számolások ellenőrzését, illetve a megfigyelések, trendek gyors vizualizációját. A kurzus elvégzése bevezető szintű egyetemi matematikai, kémiai és kvantummechanikai ismereteket feltételez, és bevezetést kíván nyújtani a kutatási gyakorlatban előforduló problémátípusok megoldásába.

Az 1–7. fejezetek az oktatók által az órán bemutatott feladatokat tartalmazzák. A 8–12. fejezetekben pedig a hallgatók számára otthoni kidolgozásra és órai bemutatásra kiadott ‘projektfeladatok’ találhatóak.

A jegyzet függelékét képezik a kidolgozott Mathematica Notebook’ (*.nb) fájlok, valamint a 12.4.3-es feladathoz tartozó külső szubrutinok.

Tartalomjegyzék

1. Elemi műveletek Mathematica-val	4
1.1. Mátrixok	4
1.2. Differenciálás	4
1.3. Integrálás	4
1.4. Analízis és grafikus megjelenítés	4
1.5. Differenciálegyenlet és grafikus megjelenítés	5
1.6. További beépített függvények	5
2. Spin- és pályaimpulzusmomentum	6
2.1. Pálya-impulzusmomentum kommutációs tulajdonságai	6
2.2. Spinmátrixok kommutációs tulajdonságai	7
2.3. Egy kvantummechanikai mérés lehetséges kimeneteiről	7
2.4. Léptető operátorok	8
2.5. Elemi NMR példa: A_2 és AX spinrendszer	8
3. Kvantum harmonikus oszcillátor	10

3.1.	A harmonikus oszcillátor sajátállapotai	10
3.2.	Léptető operátorok	10
3.3.	Időfüggő Schrödinger-egyenlet	11
3.4.	Harmonikus oszcillátor perturbációja	11
3.5.	Orthogonális polinomok	12
4.	Hidrogénatom Schrödinger-egyenletének megoldása	14
4.1.	Gömbi polárkoordináták	14
4.2.	Változók szeparációja	14
4.3.	A radiális egyenlet megoldása	14
4.4.	Sűrűségfüggvény	14
4.5.	Hidrogénatom külső elektromos térben	15
5.	Bevezetés a relativisztikus kvantummechanikába	16
5.1.	A relativisztikus mechanika	16
5.2.	Relativisztikus hullámegyenletek	17
5.3.	Műveletek Dirac-mátrixokkal	19
6.	A szabad részecske és a hidrogénatom Dirac-egyenlete	20
6.1.	Szabad részecske	20
6.2.	Hidrogénatom	21
7.	Elektronszerkezet-számítás és sokrészecskés rendszerek kvantummechanikája	23
7.1.	H_2^+ és H_2 Gauss bázison	23
7.2.	Bose–Hubbard-modell kezelése átlagtérben	24
8.	Differenciálegyenletek és orthogonális polinomok	26
8.1.	Játék orthogonális polinomokkal	26
8.1.1.	Differenciálegyenletek	26
8.1.2.	Polinomok ortogonalizációja	26
8.1.3.	Egy feladat Chebyshev polinomokkal	28
9.	Variációs és perturbációs módszerek	29
9.1.	Véges-mag effektus vizsgálata	29
9.1.1.	Perturbációs módszer	29
9.1.2.	Variációs módszer	30
9.1.3.	Perturbációs és variációs módszerek összehasonlítása	30
10.	Spin, impulzusmomentum, és NMR	32
10.1.	NMR: ABX spinrendszer	32
10.2.	Bell-egyenlőtlenség	33
10.3.	Térbeli forgatások és impulzusmomentum	36
11.	Forgások, rezgések, és spektroszkópia	39
11.1.	Aszimmetrikus pörgettyű megoldása	39
11.1.1.	A forgási Schrödinger egyenlet	39

11.1.2. Gömbi pörgettyű	39
11.1.3. Szimmetrikus pörgettyű	40
11.1.4. Aszimmetrikus pörgettyű	40
12. Elektronszerkezet-számítás	44
12.1. H_2^+ megoldása	44
12.2. Hartree-Fock módszer hélium atomra	46
12.3. Töltéssűrűség: Dirac-delta előállítás és tulajdonsága	50
12.4. Geometriaoptimalás: gradiens és Newton–Raphson-módszer	54
12.4.1. Gradiens-módszer	54
12.4.2. Implementáció és első tesztek	54
12.4.3. A metán-víz dimer egyensúlyi szerkezetei	55
12.5. Franck–Condon elv a használata gerjesztett állapotok meghatározására	58
12.5.1. Vibronikus átmenetek	58
12.5.2. A CO molekula rezgési állapotainak meghatározása	58