

Tételsor az Elemi kvantumkémia című tárgyhoz

(2021. őszi félév)

1. Newton-egyenlet, Hamilton-formalizmus, korrespondencia-elv, Heisenberg-féle felcserélési reláció, mennyiségek “kvantálása”
2. Szimmetriák és megmaradási törvények, impulzusmomentum, pálya- és spin-impulzusmomentum, példa: feles spinű részecskék
3. Zárt kvantumrendszer, állapotvektorok, megfigyelhető mennyiségek, mérés, várható érték, szórás, kompatibilis és nem-kompatibilis mennyiségek (példa: spin vetületének mérése)
4. Schrödinger-féle ábrázolás, H-atom Schrödinger-egyenlete, töltéssűrűség, Born-féle valószínűségi értelmezés
5. Időfüggetlen Schrödinger-egyenlet, stacionárius állapotok, energia-idő határozatlansági reláció
6. Kvantumrendszerek kompozíciója, általánosított Pauli-elv
7. Impulzusmomentum és mágneses momentum, energia homogén mágneses térben, mágneses dipól-dipól kölcsönhatás, mágneses magrezonancia-kísérlet két 1/2-es spinű atommaggal
8. Elektronok pálya-impulzusmomentuma, \hat{l}^2 és \hat{l}_z kommutáció, közös sajátfüggvényrendszer, sajátértékek és sajátfüggvények, harmonikus gömbfüggvények, degeneráció, jelölések
9. Pálya-impulzusmomentum sajátfüggvényei és sajátértékei, merev rotátor modell és hidrogén-szerű atomok megoldása
10. Sokrészecske-rendszerek, Born-féle valószínűségi értelmezés, töltéssűrűség, azonos részecskék, szimmetria és antiszimmetria, általánosított Pauli-elv
11. Időfüggetlen Schrödinger-egyenlet, általános matematikai tulajdonságok, variációs-elv, Ritz-módszer

12. Born–Oppenheimer-közelítés, mozgástípusok szeparációja, jellemző spektrális tartományok, elektronok és magok Schrödinger-egyenlete, PES, egyensúlyi szerkezet
13. H_2^+ molekula elektronszerkezete, példa: variációs-módszer alkalmazása, PES, egyensúlyi szerkezet, kötési energia
14. Magmozgás kétatomos molekulákban I: transláció és belső mozgás szeparációja, szabad tömegpont mozgása, részecske a dobozban
15. Magmozgás kétatomos molekulákban II: kétatomos molekula forgása, rezgése, rezgési-forgási-elektronikus spektruma
16. Effektív kölcsönhatás-modellek, SCF módszer
17. Pályák, geminálók, Slater-determináns, többelektronos mennyiségek szerkezete, Hartree–Fock módszerhez bevezető gondolatok