

FDIT143uj Molekulák kvantumelmélete

Tematika:

- A kvantummechanikai leírás elemei: állapot, fizikai mennyiség, mérés, időfejlődés. Molekuláris rendszerek fizikai mennyiségeit ábrázoló operátorok. A szabad (erőmentes térben lévő) atom és molekula Schrödinger-egyenlete. Atomi egységek.
- Azonos részecskékből álló rendszerek állapotfüggvénye. A szimmetrizálási posztulátum.
- Közelítő módszerek I: Variációs módszer (matematikai alapokkal, funcionál, funkcionális derivált, funcionál variációja)
- Közelítő módszerek II: Perturbációszámítás (nem-degenerált, időfüggetlen Rayleigh-Schödinger perurbációszámítás)
- Időfüggő perturbációszámítás, sugárzásos átmenetek kiválasztási szabályai, dipól közelítés
- A második kvantálás formalizmusa. Betöltési szám reprezentáció
- Az elektronok és az atommagok mozgásának szétválasztása. Born-Oppenheimer-közelítés, adiabatikus közelítés.
- Molekulák rezgései, IR spektrum, molekula szimmetria
- A Schrödinger-egyenlet megoldása szeparációval. A függetlenrészecske-modell. Pauli elv. A Hartree-Fock módszer. Egyrészecske-állapotok, pályák. Koopmans tétel.
- Nyílt- és zárthjú rendszerek. RHF és UHF egyenletek
- Hartree-Fock-Roothaan-Hall egyenlet.
- Elektronkorreláció. Többtest perturbációszámításos módszer.
- Konfigurációs kölcsönhatás (CI), csatolt klaszter (CC) módszer
- Multikonfigurációs-SCF (MC-SCF), teljes aktív tér-SCF (CAS-SCF)
- Gerjesztett állapotok számítása az EOM módszerrel
- Redukált sűrűségmátrixok
- Hohenberg-Kohn tételek.
- Kohn-Sham egyenlet. Kicszerélődési-korrelációs potenciálok
- Időfüggő sűrűségfunkcionál elmélet (TDDFT): Runge-Gross tétel, van Leeuwen tétel
- Időfüggő Kohn-Sham egyenlet