

Atom- és molekulafizikai témák a komplex vizsgára

1. A vonzó Coulomb-potenciál sajátérték-problémája: a hidrogénatom elsődleges spektruma, finomszerkezet és egyéb korrekciók
2. Stark-effektus és a H atom polarizálhatósága
3. Spin- és pályaimpulzusmomentum, impulzusmomentumok összeadása
4. A héliumatom spektruma: alapállapot és gerjesztett állapotok perturbációs számítással, szingulett és triplett állapotok, kicserélődési kölcsönhatás
5. A variációs módszer és alkalmazása a héliumatom alapállapotára
6. Egyelektron-közelítés atomokra: Hartree- és Hartree–Fock-módszerek
7. Atomok elektronkonfigurációi, spin-pálya csatolás, Hund-szabályok
8. Kiválasztási szabályok és atomspektrumok
9. Atomok mágneses térben, Zeeman-effektus
10. Molekulák sajátérték-problémája: az elektron és a magmozgás szétválasztása, adiabatikus és Born–Oppenheimer közelítés
11. Molekulapályák H_2^+ molekulaion és H_2 molekula esetén, VB módszer
12. Hartree–Fock módszer molekulákra, Roothan-egyenletek
13. A kémiai kötés eredete, viriáltétel
14. Kéttomos molekulák rotációs spektruma, centrifugális torzulás
15. Kéttomos molekulák rezgési spektruma, harmonikus és anharmonikus rezgések, rezgési átmenetek
16. Többelektronos atomok elektronállapotai, hibridizáció; egyszerű molekulák: H_2O , CO_2 , NH_3
17. Többatomos molekulák spektrumai: elektronátmenetek, rezgési és rotációs szerkezet, fluoreszcencia és Raman-spektrumok

Ajánlott irodalom:

- W. Demtröder: *Atoms, Molecules and Photons*, Springer, 2006
- B. Bransden, C. Joachain: *Physics of Atoms and Molecules*, 2nd ed., Prentice Hall, 2003
- P. Atkins, R. Friedman: *Molecular Quantum Mechanics*, 4th ed., Oxford, 2005