

Atom- és molekulafizika

doktori szigorlati tematika

1. A szabad (erőmentes térben lévő) atom és molekula Schrödinger-egyenlete. Atomi egységek.
2. Az elektronok és az atommagok mozgásának szétválasztása. Born-Oppenheimer-közelítés, Born-módszer. Adiabatus közelítés.
3. Lineáris variációs probléma. A hullámfüggvény "skálázása".
4. A Hartree-Fock-egyenletek és a Hartree-Fock-Roothaan-egyenletek származtatása. Egyrészecske állapotok, pályák.
5. Atomok elektronszerkezete. Az atom állapotát jellemző fizikai mennyiségek.
6. Az atomok elektronszerkezetének tárgyalása a függetlenrészecske-moddal. Atompályák. Koopmans-tétel.
7. A függetlenrészecske-modell alkalmazása molekulákra. Molekulapályák.
8. Azonos magú (homonukleáris) kétatomos molekulák elektronszerkezetének jellegzetességei (szimmetriák). Kötő- és lazítópályák. Felépítési elv.
9. A H_2^+ -molekulaion és a H_2 -molekula tárgyalása a függetlenrészecske-modell segítségével.
10. Különböző magú (heteronukleáris) kétatomos molekulák elektronszerkezetének jellegzetességei. Izoelektronos elv. Dipólusmomentum.
11. A kémiai kötés értelmezése. Viriál-tétel.
12. Többatomos molekulák elektronszerkezete (H_2O , NH_3 , CH_4). Magányospárpályák.
13. A molekula elektronszerkezetének jellegzetességei, ha a magok egy síkban fekszenek.

Ajánlott irodalom:

- L.D. Landau, E. M. Lifsch: Elméleti fizika III, Kvantummechanika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1978.
- Kapuy E., Török F.: Az atomok és molekulák kvantumelmélete. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975.
- Antal J. (szerk): Fizikai kézikönyv műszakiaknak II. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1980.
- H. A. Bethe, E. E. Salpeter: Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms, Plenum Publ. Corp., New York, 1957.