

## VIZSGATÉTELEK

Elméleti Kémia, II. éves vegyész, 2005/2006. tanév II. félév

### I. Az atomok és molekulák elektronszerkezete

1. A klasszikus mechanikával nem magyarázható jelenségek. Hullám-részecske kettősség, az elektromágneses tér, illetve az anyag kvantáltsága (példákon keresztül).
2. A kvantummechanika posztulátumai.
3. A kvantummechanika fontos fogalmai: fizikai mennyiségek, ezek mérése, állapotfüggvény, várható érték, stacionárius állapotok; fizikai mennyiségek egyidejű mérése, Heisenberg-féle bizonytalansági elv; a szimmetria és az irreducibilitási posztulátum.
4. Példa a Schrödinger-egyenlet analitikus megoldására: a potenciáldoboz. Sajátfüggvények, sajátértékek, kvantáltság, zéruspont-energia, degeneráció, mint a szimmetria következménye.
5. Az impulzusmomentum operátorok: felcserélési relációk és sajátérték-problémák.
6. A H-atom Schrödinger-egyenlete: a megoldás elve, sajátértékek, sajátfüggvények, kvantumszámok. Degeneráció, hullámfüggvény és ennek ábrázolása.
7. A H-atom diszkussziója: elektronsűrűség, az 'atomsugár' kérdése, fizikai mennyiségek várható értéke, mágneses momentum.
8. A H-atom külső mágneses térben: a spin fenomenologikus beépítése a kvantummechanikába, a Zeeman-effektus.
9. Több-elektronos rendszerek tárgyalásának alapelvei: a Hamilton-operátor és a hullámfüggvény ( $\Psi$ ) általános alakja.  $\Psi$  különböző szintű közelítései; a független-elektron-modell (F.E.M.); a Hartree-módszer intuitív megfogalmazása.
10. A Pauli-elv (a 5+2. posztulátum), a F.E.M. modell általánosabb formája: a Slater-determináns. A Hartree-Fock (HF) módszer. A HF módszer eredményeinek értelmezése: pálya, pályaenergia, Koopmans-elv.
11. Atomok elektronszerkezete a F.E.M. keretében: pálya, pályaenergia, héj, elektronkonfiguráció, Aufbau-elv, a több-elektronos impulzusmomentum-operátor.
12. Az atom állapotainak egzakt jellemzése és jelölése; Hund-szabályok, spin-pálya kölcsönhatás; teljes impulzusmomentum-operátor.
13. Molekulák elektronszerkezete: a Born–Oppenheimer közelítés, a Hamilton-operátor. A ion. Pályák alakja, energia a kötőhossz függvényében. Közelítő megoldások: Az LCAO-MO módszer.
14. Hidrogén molekula elektronszerkezete MO és VB leírásban.
15. Az  $A_2$  típusú molekulák elektronszerkezetének jellemzése az MO elmélet keretében: egyelektron függvények, ezek alakja és szimmetriája. A pályák betöltésének elv, a konfiguráció, kötésrend és állapot meghatározása.
16. A víz molekula elektronszerkezetének kvalitatív tárgyalása az MO elmélet alapján. A szimmetria szerepe. Kanonikus és lokalizált pályák, ezek kapcsolata.
17. A víz molekula elektronszerkezetének leírása a VB elmélet szerint. Hibridpályák.
18. Többatomos molekulák elektronszerkezetének kvalitatív tárgyalása a VB elmélet alapján: metán, etán, acetilén.
19. Többatomos molekulák elektronszerkezetének kvalitatív tárgyalása a VB elmélet alapján: ammónia molekula, allil gyök. A VB elmélet és a Lewis-féle szerkezeti képlet kapcsolata.
20. Konjugált  $\pi$ -rendszerek. A Hückel-közelítés. Alkalmazás etilénre, butadiénre és benzolra.
21. Átmentifém-komplexek elektronszerkezetének kvalitatív leírása: a kristálytér és a ligandumtér elméletek.

## II. A szerkezetkutató módszerek elmélete

1. A szerkezetkutató módszerek általános áttekintése, története. Molekulaspektroszkópia és kvantumkémia: közelítések, energiaszintek, kiválasztási szabályok. Az elektromágneses spektrum.
2. A kísérleti módszerek általános jellemzői. Sugárzás és anyag kölcsönhatása. Lézer hatás és a lézerek.
3. Forgási spektroszkópia I. Többatomos molekulák forgásának klasszikus mechanikája. Forgási pörgettyű típusok.
4. Forgási spektroszkópia II. Többatomos molekulák forgásának kvantummechanikája. Energiaszintek és kiválasztási szabályok.
5. Rezgési spektroszkópia I. Alapelvek. Többatomos molekulák rezgésének klasszikus leírása. Normálkoordináták.
6. Rezgési spektroszkópia II. Molekularezgések kvantummechanikai tárgyalása. A harmonikus lineáris oszcillátor.
7. Rezgési spektroszkópia III. Szimmetria és a rezgési spektrum. Kiválasztási szabályok. Belső koordináták. Molekulamechanika.
8. Rezgési spektroszkópia IV. Rezgési Raman spektroszkópia. Kiválasztási szabályok. Depolarizálhatóság.
9. Elektronspektroszkópia I. A látható-ultraibolya (UV-VIS) spektroszkópia alapelvei. Jablonski diagram. Kiválasztási szabályok.
10. Elektronspektroszkópia II. Elektronszínképek rezgési finomszerkezete (Franck-Condon elv). Radiatív és nem-radiatív folyamatok: belső konverzió, spinváltó átmenet, disszociáció és predisszociáció, fluoreszcencia és foszforeszcencia.
11. Elektronspektroszkópia III. A fotoelektron-spektroszkópia. A Koopmans-elv.
12. A gáz-elektrondiffrakció.
13. NMR I. A mágneses rezonancia-spektroszkópia módszerek általános elvei. Az NMR mérés.
14. NMR II. Kémiai eltolódás és spin-spin csatolás. Példák egyszerű spektrumok értelmezésére.

**A vizsga beugró dolgozattal kezdődik. Itt legalább 50 (azaz ötven) %-ot kell elérni, ez alatt a vizsga elégtelen. Sikeres beugró után a vizsgázó két tételt húz, egyet-egyet az I. illetve II. részből.**

**Budapest, 2006. május 17.**

**Császár Attila, Szalay Péter**