

A tantárgy neve:	magyarul:	Fizikai kémia IV. (előadás)						Kódja:	TTKBE0404	
	angolul:	Physical Chemistry IV (lecture)								
A képzés 5. féléve										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Fizikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:		Fizikai kémia II.						Kódja:	TTKBE0402	
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	x	Heti	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	5	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Lente Gábor				beosztása:	egyetemi tanár	
A kurzus célja, hogy a hallgatók megismerjék kvantummechanika alapjait, az atomok és molekulák elektronszerkezetének modern értelmezését és az egyes molekuláris mozgásokhoz rendelhető energiaszintek számításának elméleti alapjait.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: <i>Tudás:</i> A hallgató olyan kvantummechanikai ismereteket szerez, amely révén a modern anyagszerkezeti vizsgálmódszerek használatára az egyszerű leírás túlmenő, megértő szinten is képessé válik. Megismeri a kvantummechanikai szokásos jelölésrendszerét és a hozzá feltétlenül szükséges matematikai hátteret.										
<i>Képesség:</i> Leyen tisztában az előadásokon előforduló/használt fogalmak jelentésével. Tudja kapcsolatot teremteni a korábban tanult matematikai és fizikai ismeretek és a kurzus anyaga között. Leyen tisztában a kurzus részeként elsajátított elméleti fogalmak jelentőségével a kísérleti információszerezés folyamatában.										
<i>Attitűd:</i> A tantárgy elősegíti, hogy a hallgató elsajátítsa a kvantummechanika világméretű szemléletmódját. A hallgató szilárd elméleti alapjai a fizikai kémia területén hozzásegítik ahhoz, hogy a szakmai feladatait pontosan, hatékonyan végezze.										
<i>Autonómia és felelősség:</i> A kurzus hozzásegíti a hallgatót ahhoz, hogy az ott tanult ismereteket egységes szemléletmódként alkalmazza a megismerés folyamatában és új, korábban még nem tárgyalt problémák esetében a megoldás keresését jó irányba kezdje el.										
A kurzus tartalma, témakörei Szimmetriasajátságok és leírásuk a csoportelmélet segítségével A hullámmechanikai fizikai alapjai: hullámfüggvény és operátorok A Schrödinger-egyenlet különböző alakjai és megoldásának módszerei Részecskék forgási, rezgési és elektronenergia-szintjeinek kémiai jelentősége Részecskék mágneses és elektromos sajátságai A diffrakció mint részecskeszintű információforrás										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek A hallgatók heti 2 óra előadás keretében ismerik meg a modern anyagszerkezeti elméletek, s hangsúlyosan a kvantummechanika alapjait. Az ismereteket az előadó(k) előadások formájában adják át. Az előadások során magyar és angol nyelvű szemléltető videókat mutatunk be.										
Értékelés A vizsgajegy elsősorban írásbeli vizsgán szerezhető meg, ritka kivételleként szóbeli vizsga is előfordulhat.										

Kötelező olvasmány:

1. P. W. Atkins: Fizikai kémia II. (Tankönyvkiadó, Budapest, 2002)
2. A kvantumkémia alapjai és alkalmazása, Digitális tankönyv, http://www.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop425/2011_0001_531_kvantumkemia/adatok.html

Ajánlott szakirodalom:

1. Póta György: Fizikai Kémia-III/1., Az atomok és molekulák elektronszerkezete (Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2000)
2. Nagy Károly: Kvantummechanika, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest 1978
3. Alan Vincent: Molekuláris szimmetria és csoportelmélet (Tankönyvkiadó, Budapest, 1990)

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>Szimmetriasajátságok és csoportelmélet</p> <hr/> <p>TE: A hallgató interaktív módon megismeri a különböző szimmetriaelemeket és a hozzájuk kapcsolódó operátorokat, képes az operátorokkal műveleteket végezni és egy tetszőleges testet szimmetriacsoportba tud sorolni. A hallgató megismerkedik a karaktertáblázatokkal és alapvető használati módjukkal.</p>
2. hét	<p>Fizikai mennyiségek a kvantummechanikában: operátorok és sajátértékek</p> <hr/> <p>TE: A hallgató elsajátítja a kvantummechanika szemléletmódjához tartozó alapfogalmakat, az egyes fizikai mennyiségekhez a korábban megismert egyszerű fizikai definíciók mellett operátorokat is rendel. Képes az energia, impulzus és impulzusmomentum operátorinak felismerésére és használatára, illetve megismerkedik a sajátérték-egyenlet és sajátérték fogalmával.</p>
3. hét	<p>A fizikai állapot kvantummechanikai leírása</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a hullámfüggvény fizikai tartalmát és segítségével egyes fizikai mennyiségek átlagértékét ki tudja számolni. Le tudja vezetni a kvantummechanikai mozgásegyenletből a stacionárius állapotokra vonatkozó összefüggéseket. Felismeri az egymással Heisenberg-féle határozatlansági relációban lévő fizikai mennyiségeket.</p>
4. hét	<p>A Schrödinger-egyenlet és megoldási módszerei</p> <hr/> <p>TE: A hallgató általános esetekre is fel tudja írni a Schrödinger-egyenletet. Megismerkedik a peremfeltételeket is tartalmazó másodrendű parciális differenciálegyenletek megoldásának néhány általános törvényszerűségével, a bennük előforduló kvantumszámok megjelenésének szükségszerűségével.</p>
5. hét	<p>A hidrogénatom elektronszerkezete</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismerkedik a polárkoordináta-rendszer fogalmával, s ennek segítségével új alakra tudja írni az egy elektront és egy atommagot tartalmazó rendszerekre vonatkozó Schrödinger-egyenletet. Megismerkedik az egyenlet megoldásának radiális és szögfüggő részével is, s a bennük előforduló kvantumszámok lehetséges értékeit készpénzintézen ismeri fel konkrét feladatokban.</p>
6. hét	<p>Kvantumkémiai közelítések hierarchiája</p> <hr/> <p>TE: A hallgató felismeri azt tény, hogy a kvantumkémiaiában szokásosan használt számolások többsége a következő közelítéseket tartalmazza: a relativisztikus hatások elhanyagolása, Pauli-elv, Born–Oppenheimer tétel, illetve egyelektronmódszer. Fel tudja idézni a közelítések hierarchiáját, s tisztában van azzal, hogy ezek a közelítések milyen esetekben lehetnek jelentős hatással a kísérleti eredményekkel való összehasonlításra.</p>
7. hét	<p>Többeelektronos atomok és ionok szerkezete, termszimbólumok</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a Hartree–Fock-modell szerepét a kvantummechanikai számolásokban. Képes egyszerűsítő elvekkel többeelektronos, egy atommagot tartalmazó rendszerek elektronszerkezetét jellemezni, illetve felismeri a széles körben elterjedten használt termszimbólumok jelöléseinek eredetét és információtartalmát.</p>
8. hét	<p>Molekulák elektronszerkezete: vegyértékkötés-elmélet</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a vegyértékkötés-elmélet alapjait, s ennek a döntően kovalens kötésű molekulák szerkezetének értelmezésében betöltött szerepét. Képes a hibridizáció fogalmának használatára, a hibrid atompályák jellemzésére illetve molekulageometriai információk ismeretében a hibridizációs sémák hozzárendelésére.</p>
9. hét	<p>Molekulák elektronszerkezete: molekulapálya-elmélet</p>

	<p>TE: A hallgató megismeri a vegyértékkötés-elmélet alapjait, az atompályák lineáris kombinációjának módszerét, illetve az ilyen elven működő számítógépes programok működésének alapelveit. Képes egy molekula szimmetriaelemeinek és pontcsoportjának megfelelő kvalitatív használatára a molekulapályák értelmezésében.</p>
10. hét	<p>Molekulák elektronszerkezete: sűrűségfunkcionálok</p> <p>TE: A hallgató megismeri a modern kémiában használatos sűrűségfunkcionál-elmélet alapjait és ennek jelentőségét az anyagi sajátságok értelmezésében. Képes néhány gyakran előforduló funkcionál rövidítésének felismerésére és elemi ismeretei vannak az elmélettel végzett számolások pontosságáról és alkalmazhatóságáról.</p>
11. hét	<p>Molekulák szerkezete: elektronátmenetek</p> <p>TE: A hallgató megismeri spektroszkópiai módszerek általános jellemzőit és az elektronátmenetek vizsgálatának legfontosabb kísérleti módszereit. Az elektronátmenetek értelmezésénél ismeri és használni tudja a megfelelő kiválasztási szabályokat, s az oszcillátorerősség fogalmán keresztül kapcsolatot teremt a kiválasztási szabályok erőssége és a kísérleti megfigyelések között.</p>
12. hét	<p>Molekulák szerkezete: rezgések és forgások</p> <p>TE: A hallgató megismeri a mikrohullámú és infravörös spektrumok molekulászerkezeti információtartalmát. Tisztában van a normálrezgések fogalmával illetve ezek egymástól való függetlenségével. A megfelelő paraméterek ismeretében képes megjósolni egyszerű molekulák rezgési és forgási elektronszintjeit.</p>
13. hét	<p>Molekulák szerkezete: elektromos és mágneses sajátságok, magspin és elektronspin</p> <p>TE: A hallgató megismeri az elektromos dipólusmomentum, polarizálhatóság, törésmutató és diszperzió fogalmát, ezek között megfelelő kapcsolatokat tud teremteni. Különbséget tud tenni paramágneses, diamágneses és ferromágneses anyagok között a mágneses szuszceptibilitás segítségével, s fel tudja térképezni a magok illetve elektronok spinjéből származó különböző energiaszinteket. Tisztában van a magmágneses és az elektronspin-rezonancia alapvető összefüggéseivel.</p>
14. hét	<p>Szerkezeti információ diffrakciós jelenségekből</p> <p>TE: A hallgató képes a diffrakciós jelenségek alapját szolgáló összefüggések használatára anyagszerkezeti információk kinyerésében. Megismeri a röntgendiffrakció, elektrondiffrakció és neutrondiffrakció gyakorlati használati körét, képes egy adott kémiai problémához a legmegfelelőbb módszer kiválasztására.</p>