

Héjfizika vizsgatematika

1.

Részecskerendszerek általános leírása.

Hamilton-operátor, Schrödinger-egyenlet, kontinuitási egyenlet, skalárszorzat, normálás teljesség,

2.

Megmaradó mennyiségek.

Energia, Szimmetriaoperátorok, Impulzusmegmaradás, Impulzusmomentum megmaradása, Paritás, Galilei invariancia, Időtüközés.

3.

A spin

Spinoperátorok, spinfüggvények. A teljes spin operátora

Részecskerendszer teljes impulzusmomentumának operátora.

4.

Azonos részecskékből álló rendszerek általános tulajdonságai.

Permutáció, mint mozgásállandó, szimmetrikus és antiszimmetrikus állapotfüggvények, Pauli-elv, független bozonok és fermionok hullámfüggvényei, Fermion hullámfüggvény szeparálása helytől és spintől függő tényezőkre

5.

Perturbációs számítás a He alap és néhány gerjesztett állapotára.

6.

Spin pálya kölcsönhatás.

Spin-pálya kölcsönhatás 1 elektronra: relativisztikus effektusok becslése, spin pálya kölcsönhatás energiájának meghatározása perturbációs számítással. skalár és vektoroperátorok, Wigner-Eckart tétel.

Spin pálya kölcsönhatás részecskerendszerre, Landé intervallumszabály.

7.

Atomi szintek jellemzése.

LS termék, finomszerkezet, hiperfinom szerkezet, Hund szabályok.

8.

Sűrűségeloszlás és párkorreláció azonos részecskékre.

Sűrűségoperátor, átlagsűrűség, párelloszlás operátor, párelloszlás függvény, sűrűségmátrix. A kölcsönhatási operátor és energia a párelloszlással kifejezve.

A sűrűségoperátor és párelloszlás függvény ortogonális egyrészecske függvényekből felépített Slater-determináns esetén (zárt héjak esete).

Független Bose-részecskék alapállapota.

9.

Atomok mágneses térben.

A mágneses térrel való kölcsönhatás operátora, diamágneses tag.

Anomális és normális Zeemann effektus, Landé faktor. Felhasadások mágneses térben a magspin figyelembevételével.

10.

Variációs elv és variációs módszer.

A variációs módszer az alap és gerjesztett állapotok számítására, Ritz-módszer.

11.

Független részecske modell, bozonok.

Bose rendszer alapállapota, Gross-Pitaevskii egyenlet.

12.

Független részecske modell, fermionok.

A Hartree és a Hartree-Fock módszer.

Hartree-Fock egyenletek származtatása. Alkalmazás zárt héj esetén.

13.

Atomok elektronszerkezete.

A He-atom alapállapota perturbációsan, variációsan, A He atom gerjesztett állapotai variációsan, Egyszerű közelítések többelektronos atomokra.

14.

Molekulák elektronszerkezete.

A Hamilton operátor adiabatikus közelítésben.

Kéttomos molekulák szimmetriái.

A hidrogén molekula-ion alap és gerjesztett állapotai LCAO-módszerrel és variációsan.

15.

A hidrogén molekula alap és gerjesztett állapotai.

Azonos magú kéttomos molekulák, különböző magú kéttomos molekulák.

Vegyérték, Többatomos molekulák (víz, ammónia), hibridizáció, példák hibridizációra, delokalizált elektronpályák.