

Tételsor 2014.

1. Kovalens kötés

1.1 Hidrogénatom

- Milyen kvantumszámok jellemzik a hidrogénatom-beli elektron-energiasajátállapotokat?
- Hogy függ az energiasajátérték az állapot kvantumszámaitól?
- Mekkora a degenerációja az egyes energiasajátértékeknek?
- Írd fel és szematikusan ábrázold a hidrogénatom elektronjának alapállapotú hullámfüggvényét.
- Ábrázold szematikusan a $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ hullámfüggvényeket. Pontosan mi szerepel az ábrán?

1.2. H_2^+ molekulaion

1.3 H_2 molekula

- Három dimenzióban mozgó elektront írunk le, és eltekintünk a spin szabadsági foktól. Az elektront leíró hullámfüggvény honnan hova kepez? (Mi az értelmezési tartománya és az értékkészlete?)
- Három dimenzióban mozgó elektront írunk le, és figyelembe vesszük az elektron feles spinjét. Az hullámfüggvény honnan hova kepez?
- Egy hidrogénmolekulában két elektron található, és természetesen mindkettő feles spinű. A két elektront együttes állapotú leíró hullámfüggvény honnan hova kepez?
- Milyen feltételt ró ki a két elektron-hullámfüggvényekre a Pauli-elv?
- A fenti három hullámfüggvény esetén hogyan definiáljuk a skalárszorzatot?
- A fenti három esetben hogy néz ki a normalizációs feltétel?
- Létezik-e H_2 molekula? Milyen algoritmussal keressük a választ az ún. molekulapályamódszer? Milyen választ ad?
- Hogy néz ki a H_2 molekula esetén a molekulapályamódszer próbahullámfüggvénye?
- A H_2 molekula alapállapotú energiasajátértékét csak becsléssel a molekulapályamódszerrel tudunk megmondani ezen becslés alapján a tényleges alapállapotú energiasajátértékről, feltevéssel hogy az alkalmazott felklasszikus módszer (a protonok klasszikus ponttöltései) helytálló?
- Milyen algoritmussal keressük a "létezik-e a H_2 molekula" kérdésre a választ a Heitler-London módszerrel? Milyen választ ad?

1.4 Kristályok elektronszerkezete: a szoroskötésű közelítés

1.4.1. Egyatomos lánc: kristálytani alapfogalmak, Bloch-tétel

- Rajzold fel az egyatomos lánc kristályrácsát, és jelöld a rajzon a rácsláncot és az elemi cellát.
- Add meg az elemi reciprokrácsvektort.
- Rajzold fel a reciprokrácsot.
- Jelöld be a Brillouin-zonát.
- Milyen szimmetriával rendelkezik a kristálypotencial?
- Mit mond ki a Bloch-tétel?
- Mi az egyatomos lánc minimalis LCAO modelljének alapfeltevése a hullámfüggvényre?
- Milyen feltételt ad a fenti minimalis LCAO hullámfüggvényre a Bloch-tétel?
- Hogy néz ki az adott k hullámszámmal tartozó energiasajátállapot ebben a minimalis modellben?
- Add meg a modelltől kapott energiasajátértékeket a hullámszám függvényében (azaz a diszperziós relációt).

1.4.2. Egyatomos lánc: fém vagy szigetelő?

1.4.3. Torzult (dimerizált) lánc: fém vagy szigetelő?

1.4.4. Grafén és az sp^2 -hibridizáció

- Rajzold fel a grafen kristályracsát.
- Add meg és rajzold be az elemi rácsvektorokat.
- Számold ki az elemi reciprokrácsvektorokat.
- Rajzold fel a reciprokrácsot.
- Szerkeszd meg a Brillouin-zonát.
- Add meg a Brillouin-zona nemekvivalens sarkaiba mutató K és K' hullámvektorokat.
- Add meg az elektronokat leíró Hamilton-operátort.
- Milyen szimmetriái vannak az ebben szereplő kristálypotencialnak?
- Szemleltesd rajzzal az s , p_x , p_y , p_z atomi hullámfüggvények térbeli strukturáját. Mit ábrázol a rajz?
- Tekintsd a grafen elektronrendszerének azon sávjait, melyek a szén 2-es főkvantumszámú pályájából épülnek fel. Ismertesd ezen sávok szerkezetének minimalis LCAO modelljét. Milyen atomi hullámfüggvény-bázist érdemes használni? Milyen szimmetria egyszerűsíti a 8×8 -as Hamilton-operátort?
- Add meg a p_z -pályából felepülő π -sávok diszperziós relációit. Lásd be, hogy a π valenciasáv és a π vezetési sáv között nincs tiltott sáv, és hogy a K és K' pontokban a két sáv összeér.
- Milyen egyszerűsítő feltevéseken alapul a σ -sáv minimalis modellje? Milyen diszperziós reláció származik ebből?
- Egy szénatom hány elektronnal járul hozzá a szigma és π -sávokhoz összesen?
- Ncell darab elemi cellából álló mintában hány állapot található a szigma és π sávokban összesen? Hány darab elektron található a mintában? Zeró hőmérsékleten milyen energiaszintig vannak betöltve az elektronállapotok, azaz hol van a Fermi-energia? Ez alapján fém vagy szigetelő a grafen?

1.5 Reszben ionos, részben kovalens kötés

- Add meg általánosan az időfüggetlen perturbációs zavarból adódó energiakorrekciót másodrendben, és a hullámfüggvény korrekcióját elsőrendben.
- Add meg a részben ionos, részben kovalens kötést modellező minimalis modellt (a Hamilton-operátort és bázisként szolgáló hullámfüggvényeket).
- A minimalis modell milyen speciális esete felel meg a tisztán kovalens kötésnek? Mik a Hamilton-operátor energiasajátállapotai és energiasajátértékei ebben a határesetben?
- A minimalis modell milyen speciális esete felel meg az erősen ionos kötésnek? Mik a Hamilton-operátor energiasajátállapotai és energiasajátértékei ebben a határesetben?
- Mi az a "szint-taszítás" vagy "nivo-taszítás"?

1.6 van der Waals kölcsönhatás

- Add meg az $f(x) = 1/(1+x)$ függvény másodrendű Taylor-sorát.
- Add meg a harmonikus oszcillátorra vonatkozó leptető operátorok definícióját és tulajdonságait.
- Írd fel a van der Waals kölcsönhatás egydimenziós minimalis modelljének Hamilton-operátorát.
- Milyen elv alapján következtetünk a két távoli atom közötti kölcsönhatás jellegére?
- Két távoli atom közötti kölcsönhatás hogyan függ az atomok távolságától? Hogyan függ az atomi elektron-hullámfüggvények térbeli kiterjedésétől (azaz a Bohr-sugartól)? Hogyan jönnek ki ezek az összefüggések a fenti Hamilton-operátorból?