

### **Atom- és molekulafizika / Atomic and molecular physics (2/1/0/f/3)**

Tárgyfelelős / Responsible lecturer: László István

A tantárgy a Fizika alapképzési (BSC) szakon megszerezhető kvantummechanika ismeretekre építve atomok és molekulák kvantummechanikai tárgyalásának az alapjait mutatja be a következő témakörök tárgyalásával: sokrészecskés rendszerek Schrödinger egyenlete, a Born-Oppenheimer közelítés, variációs elvek, a Hartree-Fock módszer, a Roothaan-féle egyenletek, a bázisfüggvények megválasztása, az atomok elektronszerkezete, csoportelmélet és a hullámfüggvény szimmetria tulajdonságai, a sűrűségmátrix, a viriáltétel, a Hellmann-Feynman tétel, molekulák elektronszerkezete, a sűrűségfunkcionál módszer.

This course describes the quantum mechanical study of atoms and molecules building on quantum mechanical knowledge gained while earning a BSC degree in Physics. The following topics are discussed: Schrödinger equation of many particle systems, the Born-Oppenheimer approximation, variational principles, The Hartree-Fock method, the Roothaan equations, the choice of basis functions, electronic structure of atoms, the group theory and the symmetry of the wave function, the density matrix, the virial theorem, the Hellmann-Feynman theorem, electronic structure of molecules, the density functional method.

*Irodalom / Literature:* Kapuy E. és Török F.: Atomok és molekulák kvantumelmélete (Akadémia Kiadó, Budapest, 1975).