

Molekulafizika II / Molecular Physics II (2/0/0/v/3)

Tárgyfelelős / Responsible lecturer: Udvardi László

A tantárgy a Fizika alapképzési (BSC) szakon oktatott kvantummechanika és molekulafizika ismeretekre építkezve a kvantumkémiai alkalmazott többtestprobléma módszerek alapjaiba kíván betekintést nyújtani. A képzés során kiemelt témakörök: másodkvantált formalizmus a molekulafizikában, időtől független többtestprobléma perturbáció számítás, a konfigurációs kölcsönhatás módszere, bevezetés a coupled cluster elméletbe.

Based on the quantum mechanics and molecular physics studies of the physics BSC education the course intend to introduce the basic methods of the many body problem applied in modern quantum chemistry. The following topics will be outlined: second quantized formalism in molecular physics, time independent many body perturbation theory, method of configuration interaction, introduction to the coupled cluster theory.

Irodalom / Literature: Kapuy-Török: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Attila Szabó, Neil S. Ostlund: Modern Quantum chemistry, T. D. Crawford, H.F. Shaefer: An Introduction to Coupled Cluster Theory for Computational Chemists.