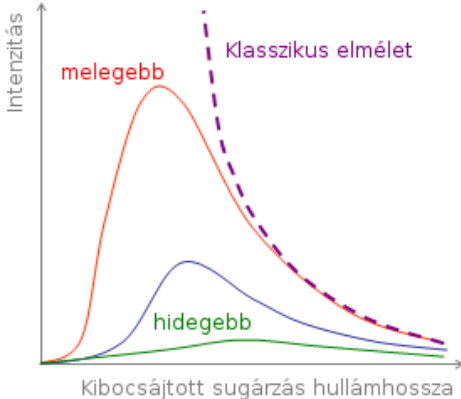
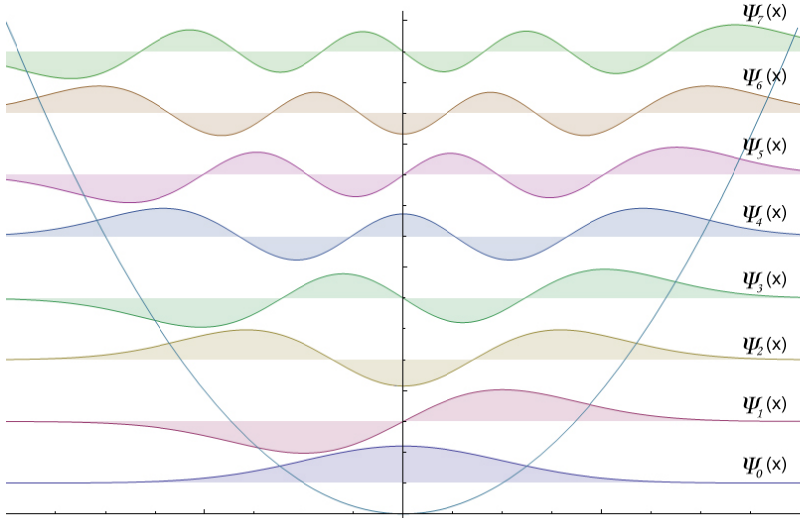


abszolút fekete test black body	<p>Olyan test, amely minden frekvencián egyenletesen képes elnyelni és kibocsátani az elektromágneses sugárzást (pl. hevített dobozon lévő apró lyuk).</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Feketetest-sug%C3%A1rz%C3%A1s</p>
alagúteffektus tunnel effect	<p>Ha a dobozba zárt részecske potenciális energiája a doboz falaiban nem válik végtelenné, akkor ezen a helyen a hullámfüggvénye sem csökken zérussá. Vékony falak esetén (ahol a potenciális energia véges távolság után ismét zérus) a hullámfüggvény exponenciális csökkenése a fal másik oldalán abbamarad, és újra a doboz belsejében megszokott oszcilláció következik. A részecske megtalálható a doboz falain kívül is, noha – a klasszikus mechanika alapján – a szökéshez nincs elég energiája.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Kvantummechanika</p>
anguláris (szögtől függő) hullámfüggvény angular wavefunction	<p>Ugyanaz, mint a gömbfelületen mozgó részecske hullámfüggvénye:</p> $Y_{l,m}(\Theta, \Phi) = N_{l,m} P_l^{ m }(\cos \Theta) e^{im\Phi}$ <p>ahol $N_{l,m}$ a normálási tényező, $P_l^{ m }$ pedig az asszociált Legendre-polinom. Kétféle kvantumszám (l, m) jelenik meg a megoldásban.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Wave_function</p>
anyaghullám-fogalom concept of matter waves	<p>Louis de Broglie vezette be. Minden részecskéhez rendel egyfajta hullámhosszat:</p> $\lambda = \frac{h}{p}$ <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Hull%C3%A1mhossz#Anyaghull.C3.A1m:_de_Broglie_hull.C3.A1mhossz</p>
asszociált Laguerre-polinom associated Laguerre polynomials	$L_q^s(\zeta) = \frac{d^s}{d\zeta^s} \left[e^\zeta \frac{d^q}{d\zeta^q} (\zeta^q e^{-\zeta}) \right]$
atompályák lineáris kombinációja linear combination of atomic orbitals	<p>lásd: LCAO</p>
Bohr-féle korrespondencia-elv Bohr's correspondence principle	<p>A kvantumelmélet és a klasszikus elektrodinamika közötti analógia (pl. a lassú rezgések frekvenciái a kvantumelméletben és a klasszikus elektrodinamikában megfelelnek egymásnak). Amint $n \rightarrow \infty$, a kvantummechanikai eredmény tart a klasszikus mechanikából következő eredményhez.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Correspondence_principle</p>
Bohr-modell Bohr model	<p>A Rutherford-féle atommodell javított változata, ahol a pozitívan töltött atommag körül keringenek az elektronok. A modell sikeresen magyarázta a Rydberg-formulát és a hidrogén spektrumát. Posztulátumokra támaszkodik: (i) Az elektron</p>

	<p>a proton körül körpályán mozog a klasszikus mechanika törvényei szerint. (ii) Az elektronok csak bizonyos megengedett sugarú pályákon keringhetnek, amelyeken nem sugároznak. (iii) A stacionárius állapotok közti átmenetek úgy mennek végbe, hogy az elektron átugrik egyik állapotból a másikba, és eközben az atom elektromágneses hullámokat bocsát ki. (iv) Az energiaszintek az impulzusmomentum diszkrét értékeitől függenek.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Bohr-f%C3%A9le_atommodell</p>
Bohr-sugár Bohr radius	<p>A hidrogénatom Bohr-modelljében a legkisebb energiájú pálya sugara (52,9 pm):</p> $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$ <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Bohr-f%C3%A9le_atommodell</p>
Born–Oppenheimer-közelítés Born-Oppenheimer approximation	<p>Azt feltételezi, hogy az elektronok mozgása sokkal gyorsabb az atommagokénál, az atommagok sokkal nehezebbek az elektronoknál, így gyakorlatilag állónak tekinthetők.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Born%E2%80%93Oppenheimer_approximation</p>
bozon boson	<p>Minden elemi részecske vagy bozon vagy fermion, ideértve az atommagokat, atomokat és molekulákat. Azonos részecskék esetén teljesen szimmetrikus, összetett kvantumállapotot alkotnak, ami miatt a Bose-Einstein statisztikának engedelmeskednek. A spin-statisztika elve szerint belső spinnel rendelkeznek, ami csak pozitív egész szám lehet.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Bozon</p>
Bragg-egyenlet Bragg's law	$2d \sin \Theta = k\lambda$ <p>ahol d a rácsállandó, Θ a rácssík és a beeső sugár által bezárt szög, λ az elektron hullámhossza, k az elhajlás rendje.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Bragg_equation</p>
Compton-effektus Compton effect	<p>Compton röntgensugarak szóródását vizsgálta elektronokon. Azt találta, hogy a szórt sugárzás hullámhossza kissé növekszik, és a növekedés értéke egyetlen jól meghatározott érték, ami függ a szóródási szögtől, de nem függ a beeső sugárzás hullámhosszától:</p> $d\lambda = \lambda_c(1 - \cos \Theta)$ <p>ahol $\lambda_c = 2,43$ pm (az elektron Compton-hullámhossza). A fotonoknak nem csak energiájuk, hanem impulzusuk is van. Az ütközés során az energia- és az impulzusmegmaradás is érvényesül, így értelmezhető a kísérleti adat.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Compton_effect</p>
DFT (sűrűség-funkcionál elmélet) density functional theory	<p>A hullámfüggvény helyett az elektronsűrűségből teszi lehetővé a kémiai rendszerek jellemzőinek a számítását.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Density_functional_theory</p>

<p>dobozba zárt részecske particle in a box</p>	<p>A részecskét (az az azt leíró hullámfüggvényt) jól lokalizálnak nevezzük, ha a megtalálási valószínűség egyetlen hely szűk környezetében különbözik nullától. Áthatolhatatlan falú doboz belsejében mozog a részecske. Végtelen potenciálfalak, a részecske hullámfüggvénye a $(-\infty, 0)$ és $(a, +\infty)$ tartományban zérus. Ha a részecske egy a élhosszúságú dobozban van (mint pl. egy fémkockában lévő elektron), akkor:</p> $1 = \int_0^a \Psi(x) ^2 dx$ <p>A „hullámszerű tartózkodás” valószínűségéhez rendelt hullámhossz:</p> $\lambda = \frac{2a}{n}$ <p>ahol n egy kvantumszám. A dobozba zárt részecske energiája stacionárius állapotban csak diszkrét értékeket vehet fel (azaz kvantált).</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Particle_in_a_box</p>
<p>Einstein–Podolsky–Rosen-paradoxon EPR paradox</p>	<p>lásd: EPR-paradoxon</p>
<p>elektron-diffrakció electron diffraction</p>	<p>Kristályokon elektronnyalábot vezettek keresztül. Diffrakációs képet kaptak. Ha egy elektronnyaláb polikristályos anyagon elhajlást szenved, akkor a Debye–Scherrer-gyűrűk lesznek az elhajlási képből az interferencia-erősítési helyek. Az elhajlási kép jól értelmezhető a kristálydiffrakciót leíró Bragg-egyenlet alapján.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Electron_diffraction</p>
<p>ekvipartíció elmélet equipartition theorem</p>	<p>Egy egyensúlyban lévő rendszerben minden harmonikus oszcillátor szabadság foknál az átlagos energia $(E = kT/2)$. Egy természetes rezgő rendszernél, mint például egy húr, mely egy adott frekvencián rezeg, a frekvencia a húr hosszúságától függ. A klasszikus fizikában egy sugárzó energiája hasonló egy természetes rezgő rendszerhez. Mivel minden rezgésnél hasonló az energia, de a rezgő rendszer energiájának többsége kisebb és nagyobb hullámhosszokon található.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Ekvipart%C3%ADci%C3%B3-elm%C3%A9let</p>
<p>EPR (Einstein–Podolsky–Rosen)-paradoxon EPR paradox</p>	<p>Egy gondolatkíséret, amely szerint egy forrás két elektront bocsát ki, amelyek együttes spinje nulla, és mindkettő a pozitív és a negatív spin kvantum szuperpozíciójában van, (azaz a két részecske összefonódott állapotban van). A részecskék eléggé eltávolodnak egymástól ahhoz, hogy fénysebességnél lassabb kölcsönhatás ne jöhessen közöttük számításba. Ha ezek után a két részecske spinjét megmérjük a (tetszőlegesen választott) z tengely mentén, azt kapjuk, hogy ellentétes spinűek. Ha az x tengely mentén mérjük meg, ugyanezt kapjuk. A másodjára mért részecskénél tehát a mérés eredménye determinisztikus (az első részecskénél mért érték ellentéte). A Heisenberg-féle határozatlansági reláció szerint egy részecske spinje két, egymásra merőleges irányban egyszerre nem mérhető meg. Így, ha megmérjük az első részecskén a z, majd a másodikon az x tengely menti spint, a második részecske x irányú spinje nem lehet ellentéte az</p>

	<p>első részecske mérések előtti spinjének, mert akkor az első részecske mindkét iránybeli spinjét ismernénk. Így tehát az első részecske z irányú mérésének valahogy „el kell rontania” a második részecske x irányú spinjét, éppúgy, ahogy a saját x irányú spinjét elrontja. A két részecske azonban – ha a lokalitást elfogadjuk – túl messze van ahhoz, hogy bármiféle kölcsönhatás felléphessen közöttük.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/EPR-paradoxon</p>
<p>feketetest-sugárzás black-body radiation</p>	<p>Az abszolút fekete testnek a sugárzása, amelyre jellemző, hogy tetszőleges hullámhosszú elektromágneses sugárzást képes elnyelni vagy kibocsátani (és a rá eső sugarakat nem veri vissza).</p>  <p>A hullámhosszfüggés grafikonját nevezzük Planck-görbének, mivel ezt a függést Max Planck német fizikus vezette le 1900-ban, felfedezve, hogy az energia nem folytonos, hanem kvantált. Egy darab foton energiája a sugárzás frekvenciája és a Planck-állandó szorzata:</p> $E = h\nu$ <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Black-body_radiation</p>
<p>fermion fermion</p>	<p>Fermionoknak nevezzük a feles ($1/2$; $3/2$; $5/2$...) spinű részecskéket. Azonos részecskék esetén teljesen antiszimmetrikus kvantumállapotot alkotnak. Teljesül rájuk a Pauli-elv, amely szerint nem lehet két azonos részecske azonos kvantumállapotban, szemben a bozonokkal. Enrico Fermiről nevezték el. Adott hőmérsékleten egy energiaszint átlagos betöltöttségét fermionok esetén a Fermi-Dirac-statisztika határozza meg. Minden elemi részecske vagy fermion, vagy bozon.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Fermion</p>
<p>fotoelektromos effektus photoelectric effect</p>	<p>Az ultraibolya fényvel megvilágított fémekből (bizonyos fémek esetén) elektronok lépnek ki, amiknek az energiáját mérhetjük. Bármekkora is a sugárzás intenzitása, az elektronok nem lépnek ki addig a fémből, amíg a sugárzás frekvenciája meg nem haladja az adott fémre jellemző küszöbértéket. Ha a sugárzás frekvenciája a küszöbérték felett van, az elektronok azonnal kilépnek a fémből. A kilépő elektronok kinetikus energiája lineárisan függ a sugárzás frekvenciájától, de nem függ az intenzitásától. A kilépő elektronok száma függ a sugárzás intenzitásától:</p> $\frac{m_e v^2}{2} = h\nu - E_{\text{kilépési}}$ <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/F%C3%A9nyelektromos_jelens%C3%A9g</p>

függetlenrészecske-közelítés free electron model	lásd: Hartree–Fock (HF) közelítés
Hamilton-operátor Hamiltonian	<div style="text-align: center;">—</div> <p>ahol \hbar a redukált Planck-állandó, μ a részecske tömege, Δ a Laplace-operátor, V a potenciális energia.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Hamilton-oper%C3%A1tor</p>
harmonikus oszcillátor harmonic oscillator	<div style="text-align: right;">erő</div> <p>A harmonikus rezgőmozgást végző tömegpontot nevezzük harmonikus oszcillátornak. Az m tömegű egy dimenziós harmonikus oszcillátorra hat, ahol k az erőállandó. A potenciális energia:</p> <div style="text-align: center;">—</div> <p>Az erre felírható Schrödinger-egyenlet megoldásával az energia:</p> <p>A lineáris harmonikus oszcillátor potenciális energiája és sajátfüggvényei:</p>  <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Harmonic_oscillator</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Harmonikus_oszcill%C3%A1tor</p>
Hartree-féle SCF módszer Hartree method	<p>A több részecskes Schrödinger-egyenletet egy részecske-egyenletekre bontjuk, de az elektronok kölcsönhatását is figyelembe vesszük a számolás során, mint az i-edik elektronnak a többivel való kölcsönhatásából származó potenciális energia:</p> <div style="text-align: center;">— —</div> <p>ahol $i = 1, 2, \dots, N$.</p>
Hartree–Fock-	A sokelektromos rendszerek leírására alkalmas (a nem-relativisztikus Schrödinger-

<p>féle SCF módszer, Hartree-Fock (HF) közelítés</p> <p>Hartree-Fock method, self-consistent field method</p>	<p>egyenlet megoldására dolgozták ki). Ez a módszer más néven a független részecske közelítés, mivel abból indul ki, hogy a sokeletronos hullámfüggvény egyeletron hullámfüggvények szorzataként áll elő. Ez a szorzat nem veszi figyelembe a Pauli-elvet, mely a fermionokra érvényes. A HF-modellnek jól megfogható, szemléletes tartalma van. Az elektronok pályákon mozognak, az adott pályán lévő elektron számára a potenciál az a „tér”, amelyet - a többi elektronnal való átlagos kölcsönhatásként - érez.</p> <p>Az atom teljes hullámfüggvényét determináns alakban veszi fel, ezzel próbálja figyelembe venni az elektronok megkülönböztethetetlen voltát. Zárthéjú rendszerek hullámfüggvénye egyetlen Slater-determinánsként megadható. A számolás minden atomra és ionra elvégezhető, az így megadott teljes energia hibája 1% körüli. Ez a vegyértékhéj energiaváltozásainak a nagyságrendjébe esik, így az ionizációs és gerjesztési energiák nem túl pontosan adhatók meg a módszerrel.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Self-consistent_field</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Hartree%E2%80%93Fock_method</p>
<p>Heisenberg-féle határozatlansági reláció</p> <p>uncertainty principle</p>	<p>A kvantummechanika egyik alapelve, amely azt állítja, hogy nem tudjuk egy részecske bizonyos megfigyelhető változóit egyszerre tetszőleges pontossággal megmérni azonos pillanatban, még elvileg sem; például nem mérhető meg egyszerre pontosan egy részecske térbeli helye és impulzusa:</p> $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$ <p>ahol $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Js (h a Planck-állandó, \hbar pedig a redukált Planck-állandó). Az idő és az energia szintén határozatlansági relációban állnak egymással. A határozatlansági reláció alsó korlátot ad a mérések szórásának szorzatára. Makroszkopikus testeknél nem jár különösebb következménnyel, de atomi méretekben igen. Gyakran összekeverik a megfigyelő hatásával.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Hat%C3%A1rozatlans%C3%A1gi_rel%C3%A1ci%C3%B3</p>
<p>Heisenberg-féle mátrixmechanika</p> <p>matrix mechanics</p>	<p>Einstein relativitáselméletben megfogalmazott gondolata a kiindulópont: az elméletben csak olyan fogalmakat szabad használni, amelyek megfigyelhető fizikai mennyiségeket jelentenek. (Az elektron pályája az atomban nem ilyen.) A pálya helyett a helykoordináták Fourier-sorfejtésében szereplő amplitúdókat kell használni. Kitalálta, hogy ezeknek milyen algebrai szabályoknak kell eleget tenniük, hogy a megfigyelésekkel megegyező eredményt kapjon. Max Born és Pascal Jordan mutatta ki, hogy az elektron helykoordinátájára és impulzusára használt, Heisenberg-féle matematikai szimbólumok mátrixok. Heisenberg 1925 júliusában közölte dolgozatát. Einstein először nem hitt benne, és Bohr is kételkedet, de Pauli a mátrixmechanikával kiszámolta a hidrogénatom energia-sajátértékeit.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Matrix_mechanics</p>
<p>hibridizáció</p> <p>hybridization</p>	<p>A kémiai kötés leírására szolgáló egyik elmélet, a vegyértékkötés-elmélet módszere. Az atompályák keverésével olyan új hibridpályákat hoz létre, melyek alkalmasak az atomok közötti kötés jellemzőinek leírására. A hibridpályák jól használhatók a molekulapályák alakjának magyarázására. A hibridizáció elméletét Linus Pauling vezette be, hogy megmagyarázza az olyan molekulák szerkezetét, mint például a metán (CH₄: sp³ hibridállapot). Ezt az eljárást eredetileg csak az</p>

	<p>ilyen egyszerű kémiai rendszerekre fejlesztették ki, de később szélesebb körben is alkalmazni kezdték, és ma a szerves vegyületek szerkezetének leírásában általánosan használják. A hibridizációs elmélet kvantitatív számításokra nem annyira alkalmas, mint a molekulapálya-elmélet. Különösen a <i>d</i>-pályák bevonása esetén - például a koordinációs kémia és a fémorganikus kémia területén - lépnek fel nehézségek.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Hibridiz%C3%A1ci%C3%B3</p>																		
<p>kvantumszám quantum number</p>	<p>Kvantumszámnak hívjuk bármely megmaradó mennyiség kvantummechanikai operátorának olyan sajátértékét, ami egy adott kvantummechanikai rendszer valamely állapotát jellemzi, azaz ott ennek határozott értéke van.</p> <table border="1" data-bbox="416 600 1401 1205"> <thead> <tr> <th>név</th> <th>jelölés</th> <th>megengedett érték</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>főkvantumszám</td> <td>n</td> <td>$n \geq 1$</td> </tr> <tr> <td>mellékvantumszám</td> <td>l</td> <td>$0 \leq l \leq (n-1)$</td> </tr> <tr> <td>mágneses pályakvantumszám (a pályaimpulzushoz tartozó mágneses kvantumszám)</td> <td>m_l</td> <td>$-l \leq m_l \leq l$</td> </tr> <tr> <td>mágneses spinkvantumszám (a spinhez tartozó mágneses kvantumszám)</td> <td>m_s</td> <td>$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$</td> </tr> <tr> <td>spinkvantumszám</td> <td>s</td> <td>$\frac{1}{2}$ (egy elektronra)</td> </tr> </tbody> </table> <p>A közös n főkvantumszámú elektronokat héjakba soroljuk. Az $n = 1, 2, 3, \dots$ főkvantumszámnak megfelelő héjakat a K, L, M, \dots betűkkel jelöljük. Az adott főkvantumszámnak megfelelő héjon belül a közös l mellékvantumszámú elektronokat alhéjakba csoportosítjuk. Az alhéjak jelölése $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ szerint rendre s, p, d, f, \dots stb.</p> <p>A Pauli-elv szerint egy atomban nem lehetnek olyan elektronok, amelyeknek mind a négy kvantumszáma azonos; így egy többelektronos atom atomi pályáján legfeljebb két elektron helyezkedhet el.</p>	név	jelölés	megengedett érték	főkvantumszám	n	$n \geq 1$	mellékvantumszám	l	$0 \leq l \leq (n-1)$	mágneses pályakvantumszám (a pályaimpulzushoz tartozó mágneses kvantumszám)	m_l	$-l \leq m_l \leq l$	mágneses spinkvantumszám (a spinhez tartozó mágneses kvantumszám)	m_s	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	spinkvantumszám	s	$\frac{1}{2}$ (egy elektronra)
név	jelölés	megengedett érték																	
főkvantumszám	n	$n \geq 1$																	
mellékvantumszám	l	$0 \leq l \leq (n-1)$																	
mágneses pályakvantumszám (a pályaimpulzushoz tartozó mágneses kvantumszám)	m_l	$-l \leq m_l \leq l$																	
mágneses spinkvantumszám (a spinhez tartozó mágneses kvantumszám)	m_s	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$																	
spinkvantumszám	s	$\frac{1}{2}$ (egy elektronra)																	
<p>kvantummechanikai keringő mozgás rotational motion</p>	<p>Adott pont körüli keringést ír le. A Schrödinger-egyenlet megoldásával be kell vezetni egy második kvantumszámot is (n és m). Az $m \neq 0$ szerinti energiaértékekhez egynél több hullámfüggvény (állapot) tartozik, azaz ezek az energiaértékek kétszeresen degeneráltak:</p> $E = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$																		
<p>Laplace-operátor Laplace operator or Laplacian</p>	<p>Térkoordináták szerinti differenciálás:</p> $\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Laplace-oper%C3%A1tor</p>																		

<p>LCAO (atompályák lineáris kombinációja) LCAO (linear combination of atomic orbitals)</p>	<p>A molekulapályákat úgy állítjuk elő, hogy atompályákat kombinálunk lineárisan. Jól használható molekulapályákat kapunk, ha olyan atompályákat kombinálunk, (i) amelyeknek energiája nem túl távoli, (ii) amelyek számottevő mértékben átfednek, (iii) amelyeknek a lineáris kombinációja olyan molekulapályát ad, amely a molekula szimmetriájával összhangban van.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Linear_combination_of_atomic_orbitals_molecular_orbital_method</p>
<p>Lewis-féle vegyérték elmélet concept of the electron-pair bond</p>	<p>Sav olyan anyag, mely elektronpár felvételére képes, azaz elektronpár-akceptor, a bázisok pedig elektronpár-donorok. Az 1938-ban felfedezett elméletet 1963-ban Ralph G. Pearson tovább fejlesztette és mind a savak, mind a bázisok esetén megkülönböztet úgynevezett hard (kemény) és soft (lágy) változatokat. A vegyértékelektronoknak alapvető szerepet tulajdonít a kémiai kötés kialakításában. Elektronátvitellel ionos kötés, elektronok megosztásával kovalens kötés alakul ki. Ennek során az atomok nemesgáz konfiguráció kialakítására törekszenek (oktett-szabály).</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Chemical_bond</p>
<p>MO (molekulapálya)-elmélet MO (molecular orbital) theory</p>	<p>A molekulapálya elméletet szinte teljesen párhuzamosan fejlesztették ki a vegyértékkötés elméletével. Az elmélet azonban nem a kor kémikusainak elképzeléseiből, hanem inkább a fizikusoknak az atomszerkezettel kapcsolatos ismereteinek a molekulákra való kiterjesztéséből indult ki. A molekulapálya-elméletben az egész molekulára kiterjedő pályák szerepelnek. Az alapja az a feltételezés, hogy a molekulák elektronszerkezetének leírása nem alapulhat más törvényszerűségeken, mint amiket az atomok szerkezetének a leírásánál felhasználtak. A kémiai kötés abból származtatható, hogy az egyensúlyi magkonfiguráció esetén kialakuló molekulapályákra lépő elektronok összes energiája csökken az atomi pályán lévő elektronok összes energiájához képest.</p>
<p>molekulapálya-elmélet molecular orbital theory</p>	<p>lásd: MO-elmélet</p>
<p>Pauli-elv Pauli exclusion principle</p>	<p>A Pauli-elv (vagy Pauli-féle kizárási elv) Wolfgang Pauli által 1925-ben megfogalmazott kvantummechanikai elv, mely szerint nem lehet két azonos fermion azonos kvantumállapotban (szemben a bozonokkal, ahol lehet). Adott hőmérsékleten egy energiaszint átlagos betöltöttségét fermionok esetén a Fermi-Dirac-statisztika határozza meg. A Pauli-elv felelős az atomhéjak stabilitásáért.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Pauli-elv</p>
<p>PES (potenciális energia-hiperfelület) PES (potential energy surface)</p>	<p>Molekulák PES-e csak a Born–Oppenheimer-közelítés keretén belül létezik. A PES a molekula energiáját geometriai koordináták függvényében adja meg. N mag esetében egy $(3N+1)$ dimenziós tér. A PES határozza meg a legtöbb molekuláris tulajdonságot. Az egyensúlyi molekulászerkezetek a PES-t jellemző völgyek minimumainak felelnek meg. Reakciók energetikája meghatározható a reaktánsokra és a termékekre jellemző minimumok energiájából, illetve magasságából. A reaktánsokat a termékekkel egy ún. reakcióút köti össze, mely keresztülhalad legalább egy átmeneti állapoton. Az átmeneti állapot a legmagasabb energiájú pont egy legkisebb energiájú úton. A reakciósebességi együtthatók meghatározhatók az átmeneti állapot magasságából és alakjából. A</p>

	völgynek egy minimumhely körüli alakja a molekula rezgési színeképét határozza meg.																																			
potenciális energia-hiperfelület potential energy surface	lásd: PES																																			
radiális hullám-függvény radial wave equation	$R_{n,l}(r) = -N_{n,l} r^l \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)$ <p>Csak a magtól mért távolságtól függ.</p>																																			
radiális sűrűség-függvény radial distribution function	$P_{n,l}(r) = r^2 R_{n,l}(r) $ <p>Megadja annak a valószínűségét, hogy az n, l kvantumszámokkal jellemzett elektron az r sugarú, dr vastagságú gömbhéjon tartózkodik.</p>																																			
Rydberg-formula (Rydberg–Ritz-formula) Rydberg formula	<p>Az atomfizika egyik összefüggése, melyből megállapítható a hidrogén színeképe. Később a Rydberg–Ritz-féle kombinációs elvvel sikerült kiterjeszteni, hogy minden elemre működjön. A spektrum egy hullámhosszhalmaz, melyek kibocsátására egy kémiai elem atomja képes, miközben az elektron a diszkrét energiájú „elektronhéjak” egyikéről a másikra ugrik. A formulát a svéd fizikus, Johannes Rydberg alkotta meg, és 1888-ben tett közzé. A Rydberg-formula hidrogénre:</p> $\frac{1}{\lambda_{\text{vac}}} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$ <p>ahol λ_{vac} a kibocsátott részecske hullámhossza vákuumban, R_H a Rydberg-állandó, n_1 és n_2 pedig olyan egész számok, melyekre $n_1 < n_2$.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Rydberg-formula</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>n_1</th> <th>n_2</th> <th>Név</th> <th>Ide konvergál (nm)</th> <th>Tartomány</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>2-től végtelenig</td> <td>Lyman-sorozat</td> <td>91</td> <td>ultraibolya</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>3-tól végtelenig</td> <td>Balmer-sorozat</td> <td>365</td> <td>látható</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>4-től végtelenig</td> <td>Paschen-sorozat</td> <td>821</td> <td>infravörös</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>5-től végtelenig</td> <td>Brackett-sorozat</td> <td>1459</td> <td></td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>6-tól végtelenig</td> <td>Pfund-sorozat</td> <td>2280</td> <td></td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>7-től végtelenig</td> <td>Humphreys-sorozat</td> <td>3283</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	n_1	n_2	Név	Ide konvergál (nm)	Tartomány	1	2-től végtelenig	Lyman-sorozat	91	ultraibolya	2	3-tól végtelenig	Balmer-sorozat	365	látható	3	4-től végtelenig	Paschen-sorozat	821	infravörös	4	5-től végtelenig	Brackett-sorozat	1459		5	6-tól végtelenig	Pfund-sorozat	2280		6	7-től végtelenig	Humphreys-sorozat	3283	
n_1	n_2	Név	Ide konvergál (nm)	Tartomány																																
1	2-től végtelenig	Lyman-sorozat	91	ultraibolya																																
2	3-tól végtelenig	Balmer-sorozat	365	látható																																
3	4-től végtelenig	Paschen-sorozat	821	infravörös																																
4	5-től végtelenig	Brackett-sorozat	1459																																	
5	6-tól végtelenig	Pfund-sorozat	2280																																	
6	7-től végtelenig	Humphreys-sorozat	3283																																	
Schrödinger-	A Schrödinger-egyenlet egy energia sajátérték-egyenlet. Létezik időfüggetlen																																			

<p>egyenlet Schrödinger equation</p>	<p>(stacionárius) és időfüggő formája is.</p> $H\Psi = E\Psi$ <p>ahol H a Hamilton-operátor, Ψ a hullámfüggvény, E az energia. A Schrödinger-egyenlet axióma, azaz nem lehet levezetni csak posztulálni. A helyességét az igazolja, hogy a segítségével a kísérletekkel egyező eredményeket kapunk.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Schr%C3%B6dinger-egyenlet</p>
<p>Schrödinger-féle hullámmechanika wave mechanics</p>	<p>A de Broglie által bevezetett anyaghullám-fogalom alapján jutott egy differenciálegyenlethez, amelynek reguláris megoldásai megadják az atomok energia-sajátértékeit. Kimutatta, hogy a kétféle tárgyalásmód (a mátrixmechanika és a hullámmechanika) egymással egyenértékű. Paul Dirac dolgozta ki a kvantummechanika Hilbert-térben értelmezett állapotvektorokra és operátorokra alapozott matematikai elméletét. A Dirac-féle tárgyalás lényege, hogy minden fizikai mennyiséghez operátort rendelünk, és ennek sajátértékeit azonosítjuk az illető mennyiség mérésével megállapítható értékeivel.</p> <p>http://www.zbp.univie.ac.at/schrodinger/ewellenmechanik/quantentheorie.htm</p>
<p>Schrödinger macskája Schrödinger's cat</p>	<p>Erwin Schrödinger nevéhez fűződő gondolat-kísérlet. <i>„Tegyük fel, hogy van egy macskám. Ezt beteszem egy ketrecbe, és a ketrec mellé odateszek egy radioaktív készítményt, amely percenként 50%-os valószínűséggel bocsát ki egy alfa-részecskét. Egy számlálót is odateszek, ami egy percenként bekapcsol. Ha ez alatt a perc alatt jön egy alfa-részecske, akkor a számláló megindul, kinyit egy kis ajtót, bejön egy kémiai mérleg, amitől a macska meghal. Ha pedig nem jött alfa-részecske ebben a percben, a macska életben marad. Én ezt nem figyelem. A kísérlet végén a macska állapotfüggvénye olyan, hogy a macska egy fél valószínűséggel él, és egy fél valószínűséggel halott. Heisenberg szerint - mondja Schrödinger - ha most hirtelen ránézek a macskára, attól a tekintettől a macska tényleg meghal, vagy a macska tényleg megél.”</i> Ezzel kívánta szemléltetni a mikrovilágban uralkodó törvények hétköznapi szemlélet számára meghökkenítő idegenszerűségét, azt, hogy a részecskék egyidejűleg több helyen, különféle állapotokban lehetnek. (A kvantummechanikában szuperpozíció elvének nevezzük, amikor egy részecske vagy hullám ún. kevert állapotban van, azaz bizonyos tulajdonságait nem tudjuk egyértelműen megállapítani. A részecske addig marad ebben, amíg valamilyen módon meg nem állapítjuk, hogy valójában hol és milyen állapotban van. A probléma ott kezdődik, hogy mérés (megfigyelés) hatására a szuperpozíció összeroppan, és a részecske egyértelműen a lehetséges állapotok egyikébe kerül.)</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Schr%C3%B6dinger_macsk%C3%A1ja</p>
<p>sűrűség-funkcionál elmélet density functional theory</p>	<p>lásd: DFT</p>
<p>stacionárius Schrödinger-egyenlet stationer</p>	<p>A Schrödinger-egyenlet időtől független alakja:</p> $H\Psi = E\Psi$ <p>http://www.itp.physik.tu-</p>

Schrödinger equation	berlin.de/brandes/public_html/qm/umist_qm/node27.html
Stefan–Boltzmann-törvény Stefan-Boltzmann law	<p>A feketetest-sugárzásra vonatkozik, és megállapítja, hogy a felületegységről időegység alatt kisugárzott összes energia (azaz a kisugárzott felületi teljesítmény) egyenesen arányos a hőmérséklet negyedik hatványával:</p> $\frac{\Delta E}{\Delta A \cdot \Delta t} = \sigma \cdot T^4$ <p>ahol $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$ (Stefan–Boltzmann-állandó).</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Stefan%E2%80%93Boltzmann-t%C3%B6rv%C3%A9ny</p>
szabad részecske free particle	<p>A legegyszerűbb kvantummechanikai objektum, de a valóságban csak rövid ideig teljesül. Nem áll kölcsönhatásban más fizikai objektumokkal, potenciális energiája állandó. Egy dimenzióban megoldható rá a Schrödinger-egyenlet. A Ψ függvény térben és időben periodikus síkhullámot ír le, melyre:</p> $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\mu E}} = \frac{h}{p_x} \text{ (de Broglie) és } E = h\nu \text{ (Planck).}$ <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Free_particle</p>
variációs módszer variational method	<p>A stacionárius Schrödinger-egyenlet közelítő megoldása. Akkor használjuk, ha valamely kvantummechanikai feladat egzakt megoldása nem adható meg, vagy csak korlátozott pontosságú információra van szükség. Az alapállapot meghatározására szolgál.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Variational_method</p>
VB (vegyértékkötés)-elmélet VB (valence bond) theory	<p>A kvantummechanika módszereit alkalmazza a kémiai kötés leírására. Központi kérdése, hogy a molekulaképződés során a különálló atomok atompályái hogyan kombinálódnak az egyes kémiai kötések kialakulásához. A vegyértékkötés-elmélet szerint kovalens kötés két atom között a két atom félig betöltött, egy párosítatlan elektront tartalmazó vegyértékpályáinak átfedésével jön létre. A vegyértékkötés szerkezet hasonló a Lewis szerkezethez, de ha nem lehetséges egyetlen Lewis szerkezetet felírni, akkor több vegyértékkötés szerkezetet használnak. A vegyértékkötés szerkezetek ezen kombinációja a rezonancia-elmélet legfőbb pontja. A vegyértékkötés-elmélet szerint a kémiai kötést az abban részt vevő atomok atompályáinak átfedése hozza létre. Az átfedés következtében az elektronok a legnagyobb valószínűséggel a kötés körüli térrészben tartózkodnak. Az átfedő pályáknak két típusa van: szigma és pi. Szigma(σ)-kötés jön létre, ha a két megosztott elektron pályái fej-fej átfedésben vannak. Pi(π)-kötés keletkezik, ha két egymással párhuzamos pálya között van átfedés. A kötésrend tekintetében az egyszeres kötésben egy szigma-kötés van, a kettős kötések egy szigma- és egy pi-kötésből állnak, a hármas kötésben pedig egy szigma- és két pi-kötés található. A kötést kialakító atompályák hibridpályák is lehetnek. A kötéshez megfelelő típusú (karakterű) atompálya előállítására szolgáló módszer neve hibridizáció.</p> <p>http://hu.wikipedia.org/wiki/Vegy%C3%A9rt%C3%A9kk%C3%B6t%C3%A9s-elm%C3%A9let</p>
vegyértékkötés-elmélet valence bond	lásd: VB-elmélet

theory	
Wien-féle eltolódási törvény Wien's displacement law	<p>A maximális intenzitású sugárzás hullámhossza a sugárzó test hőmérsékletével fordítottan arányos:</p> $\lambda_{\max} T = 2,88 \cdot 10^{-3} \text{ mK}$ <p>A törvényt 1893-ban alkotta meg Wilhelm Wien. A tapasztalat szerint alacsony hőmérsékleten az izzó testek vörös színűek. A hőmérséklet emelkedésével a test színe világos vörös, sárgás-fehéres, végül kellően magas hőmérsékleten kékes színűvé válik. A csillagok színe és az ebből adódó elnevezés is (vörös óriás, fehér törpe) az eltolódási törvénnyel magyarázható.</p> <p>http://en.wikipedia.org/wiki/Wien%27s_displacement_law</p>