



# TANTÁRGYI ADATLAP

|                             |  |                               |                     |
|-----------------------------|--|-------------------------------|---------------------|
| <b>Tárgy neve:</b>          |  | <b>Kódja:</b>                 |                     |
| Kvantumkémia II.            |  | VEMKAKM212K                   |                     |
| Quantum Chemistry II.       |  |                               |                     |
| <b>Tárgyfelel s oktató:</b> |  | <b>Tárgyfelel s tanszék:</b>  |                     |
| Lendvay György Dr.          |  | Általános és Szervetlen Kémia |                     |
| <b>Elmélet (óra):</b>       |  | <b>Kredit:</b>                | <b>Számonkérés:</b> |
| 2 (/hét)                    |  | 2                             | Vizsga              |

| A tárgy oktatója:  |               |              |        |
|--------------------|---------------|--------------|--------|
| név                | kurzus típusa | kurzus kódja | nyelv  |
| Lendvay György Dr. | Elmélet       | 01           | magyar |

### Tantárgy képzési célja:

A kvantumkémiai használatos rutin módszerek elveinek elsajátítása.

### Tantárgy tematikája:

1. Atompálya-bázisok felépítésének elvei. Gyakran használatos AO bázisok.
2. Populációanalízis, NBO analízis, kötésrend számítás
3. A kvantumkémiai programok felépítése és működési elvei.
4. Kanonikus és lokalizált molekulapályák. Az elektronkorreláció fogalma. Konfigurációs kölcsönhatás.
5. Az elektronkorreláció számítása perturbációs módszerrel.
6. Coupled Cluster módszerek. Multikonfigurációs SCF módszerek. CAS-SCF. Multireferencia-CI. Félévközi dolgozat.
7. Sűrűségfunkcionál elmélet. A Hohenberg-Kohn és Kohn-Sham tételek. Kicszerélődési-korrelációs funkcionálok
8. Több szintű kvantumkémiai módszerek.
9. Potenciálfelületek tulajdonságai. Geometria optimalás.
10. Rezgési spektrumok számításának alapjai
11. Az elektronspektroszkópia alapfogalmai és kvantumkémiai leírása
12. Termodinamikai mennyiségek számítása: statisztikus mechanika ab initio alapon. Félévközi dolgozat.
13. Az elemi reakciók kinetikájának alapfogalmai.
14. Reakciók potenciálfelületének tulajdonságai. A reakciók sebességének számítása. Reakciómechanizmusok felderítése.

### Tantárgy követelménye:

Kis, 3-4-kérdéses dolgozat minden második órán. Két félévközi zárthelyi 10-12 kérdéssel. A kisdolgozatok átlagában minimum 60%-os, a két félévközi dolgozat átlagában minimum 50%-os teljesítmény szükséges a vizsgára bocsátáshoz.

### Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

Kapuy Ede-Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975  
 Mayer István: Kvantumkémia, Budapest, 1980  
 M. A. Ratner, G.C. Schatz, Quantum mechanics in chemistry, Wiley, 1998  
 J. Simons, J. Nichols: Quantum mechanics in chemistry, Oxford University Press, 1997  
 Ladik János: Kvantumkémia, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1960  
 Póta György: Elméleti Kémia, jegyzet, Debreceni Egyetem, 2000