



TANTÁRGYI ADATLAP

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

A tárgy oktatója:

név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
Dr. Lendvay György	Elmélet	1	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. Kicszerelő-dési-korrelációs funkcionálok
8. Többszintű 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