



Tárgytematika

Félév:	2014/15/1
Tárgynév:	Kvantumkémia I. gyakorlat
Tárgykód:	VEMKAKM122K
Felelős szervezet neve:	Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKAK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Lendvay György

Oktatás célja:

Matematikai ismeretek felfrissítése. Lineáris algebra	
Matematikai ismeretek felfrissítése. Matematikai analízis, differenciálegyenletek, komplex számok.	
Matematiaki alapok: operátorok I.	
Matematiaki alapok: operátorok II.	
Számítógépes gyakorlatok. A potenciálfelületek tulajdonságainak vizsgálata	
Kémiai reakcióknak megfelelő nyeregponatok keresése	
Energiaszámítás magasszintű kvantumkémiai módszerekkel	
Gyakorlatok az atompálya bázisok tulajdonságainak, alkalmazhatóságának megismerésére	
A minimális energiájú reakcióút követése és a tapasztalatok értelmezése. Kiseladás készítése és bemutatása	
Egyéni feladat meghatározása – egy közösen kiválasztott reakció tanulmányozása	
Számítások az egyéni feladat megoldására	
Számítások az egyéni feladat megoldására	
Számítások az egyéni feladat megoldására	
Számítások az egyéni feladat megoldására	
Kiseladás készítése a számítási eredmények alapján; az előadás bemutatása	
Kötelező és ajánlott irodalom:	

Tantárgy tartalma:

Matematikai ismeretek felfrissítése. Lineáris algebra	
Matematikai ismeretek felfrissítése. Matematikai analízis, differenciálegyenletek, komplex számok.	
Matematiaki alapok: operátorok I.	
Matematiaki alapok: operátorok II.	
Számítógépes gyakorlatok. A potenciálfelületek tulajdonságainak vizsgálata	
Kémiai reakcióknak megfelelő nyeregponatok keresése	
Energiaszámítás magasszintű kvantumkémiai módszerekkel	
Gyakorlatok az atompálya bázisok tulajdonságainak, alkalmazhatóságának megismerésére	
A minimális energiájú reakcióút követése és a tapasztalatok értelmezése. Kiseladás készítése és bemutatása	
Egyéni feladat meghatározása – egy közösen kiválasztott reakció tanulmányozása	
Számítások az egyéni feladat megoldására	
Számítások az egyéni feladat megoldására	
Számítások az egyéni feladat megoldására	
Számítások az egyéni feladat megoldására	



Tárgytematika

Félév:	2014/15/1
Tárgynév:	Kvantumkémia I. gyakorlat
Tárgykód:	VEMKAKM122K
Felelős szervezet neve:	Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKAK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Lendvay György

Tantárgy tartalma:

Kiselőadás készítése a számítási eredmények alapján; az előadás bemutatása	
Kötelező és ajánlott irodalom:	

Számonkérési és értékelési rendszere:

A hallgatónak minden laboratóriumi foglalkozáson részt kell vennie és a félév folyamán folyamatos aktivitást kell tanúsítania. Demonstrálnia kell, hogy érti, hogy mit csinál. Mindkét kiselőadást úgy kell megtartani, hogy az külső hallgató számára is érthető legyen. Értelmezni kell az eredményeket és utalni kell az esetleges hibalehetőségekre.

Kötelező és ajánlott irodalom:

Kapuy Ede-Török Ferenc: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975

Mayer István: Kvantumkémia, Budapest, 1980