



Tárgytematika

Félév:	2014/15/2
Tárgynév:	Kvantumkémia II.
Tárgykód:	VEMKAKM212K
Felelős szervezet neve:	Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKAK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Lendvai György

Oktatás célja:

A kvantumkémiai rutin módszerek elveinek elsajátítása.

Tantárgy tartalma:

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. Sűrűségfüggvény elmélet. A Hohenberg-Kohn és Kohn-Sham tételek. Kicserélődési-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.

Számonkérési és értékelési rendszere:

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.

Kötelező és ajánlott 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