



Tárgytematika

Félév:	2014/15/2
Tárgynév:	Számítógépes kémia
Tárgykód:	VEMKAKM243S
Felelős szervezet neve:	Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKAK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Lendvai György

Oktatás célja:

Bevezetés a kvantumkémiai módszerek alkalmazásának gyakorlatába

Tantárgy tartalma:

A potenciálfelület fogalmának, alapvető tulajdonságainak bemutatása
A molekulageometria megadásának lehetőségei. A Z-mátrix
Gyakorlatok a Z-mátrix definiálására. Szimmetria rögzítése
Atompályák tulajdonságainak tanulmányozása a Molden program segítségével
A geometria-optimalás fogalma. Kötéshossz-optimalás manuálisan
Egyszerű molekulák geometriájának optimalása a Gaussian program segítségével HF módszerrel
Bonyolult molekulák szerkezetének megadása a Molden program segítségével; geometria-optimalás
Rezgési frekvenciák számítása optimal geometriáknál. A rezgési módusok azonosítása, értelmezése. Imaginárius frekvenciák kezelése. Kiselőadás készítése és bemutatása
A Gaussian program parancsainak megismerése. Kvantumkémiai számítások indításának és az adatok letöltésének megismerése az MTA Linux klaszterén
Molekulák tulajdonságainak számítása a sűrűségfüggvény elmélet módszereivel és perturbációszámítással
Egyéni feladat kiválasztása, a megoldás stratégiájának megbeszélése
Számítások az egyéni feladat megoldására
Számítások az egyéni feladat megoldására
Számítások az egyéni feladat megoldására
Kiselőadás készítése a számítási eredmények alapján; az előadás bemutatása

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