



## Tárgytematika

<b>Félév:</b>	2016/17/1
<b>Tárgynév:</b>	Kvantumkémia I. gyakorlat
<b>Tárgykód:</b>	VEMKAKM122K
<b>Felelős szervezet neve:</b>	Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék
<b>Felelős szervezet kódja:</b>	MKAK
<b>Tárgyfelelős neve:</b>	Dr. Lendvai 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



## Tárgytematika

<b>Félév:</b>	2016/17/1
<b>Tárgynév:</b>	Kvantumkémia I. gyakorlat
<b>Tárgykód:</b>	VEMKAKM122K
<b>Felelős szervezet neve:</b>	Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék
<b>Felelős szervezet kódja:</b>	MKAK
<b>Tárgyfelelős neve:</b>	Dr. Lendvai György

---

### Oktatás célja:

Számítások az egyéni feladat megoldására

Kiselőadás 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.

Matematikai alapok: operátorok I.

Matematikai 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. Kiselőadás készítése és bemutatása



## Tárgytematika

<b>Félév:</b>	2016/17/1
<b>Tárgynév:</b>	Kvantumkémia I. gyakorlat
<b>Tárgykód:</b>	VEMKAKM122K
<b>Felelős szervezet neve:</b>	Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék
<b>Felelős szervezet kódja:</b>	MKAK
<b>Tárgyfelelős neve:</b>	Dr. Lendvai György

---

### Tantárgy tartalma:

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

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