

A tantárgy neve:		magyarul:	Számítógépes kvantumkémia					Kódja:	TTKMG0902	
		angolul:	Computational quantum chemistry							
Tavaszi félév										
Felelős oktatási egység:			DE TTK, Fizikai Kémiai Tanszék							
Kötelező előtanulmány neve:								Kódja:		
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	X	Heti	0	Heti	3	Heti	0	gyakorlati jegy	2	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató			neve:		Dr. Purgel Mihály			beosztása:	tudományos munkatárs	
A kurzus célja, hogy a hallgatók										
<p>Elsajátítsák a kvantumkémiai számítások elméleti alapjait, illetve önállóan képesek legyenek kivitelezni kvantumkémiai számításokat. Képesse váljanak azok informatikai eszközökkel való kiértékelésére, illetve a számítások során nyert adatoktól alapvető következtetések levonására.</p>										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<i>Tudás:</i>										
<p>Ismeri a kémia tudományos eredményein alapuló, az atomok és molekulák szerkezetére, a kémiai kötés kialakulására vonatkozó legfontosabb igazolt elméleteket, modelleket.</p> <p>Rendelkezik azokkal a kémiai alapismeretekkel, amelyek lehetővé teszik az alapvető kémiai reakciók leírását, az erre épülő gyakorlat elemeinek megismerését, az ismeretek rendszerezését.</p> <p>Rendelkezik azokkal az ismeretekkel, amelyek (megfelelő szakmai irányítással) lehetővé teszik számára a vizsgálható kémiai folyamatok, rendszerek, tudományos problémák tudományos gyakorlatban elfogadott módszerekkel történő tesztelését, a mérési eredmények számítógépes feldolgozását.</p> <p>Tisztában van a kémia és a vegyipar lehetséges fejlődési irányjaival és határaival.</p> <p>Felhasználói szinten ismeri a Linux operációs rendszert és a kvantumkémiai számításokra alkalmas programok működésének alapjait.</p>										
<i>Képesség:</i>										
<p>Képes a számítási eredmények kiértékelésére, értelmezésére, dokumentálására.</p> <p>Képes a kémia szakterületen szerzett tudását alapvető gyakorlati megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is.</p> <p>Ismeretei alapján rendelkezik a természettudományos alapokon nyugvó érvelés képességével.</p> <p>Képes elsajátítani azt az idegen nyelvű szókinccset, amellyel ismeretanyagát idegen nyelvű közegben is kommunikálni tudja.</p> <p>Képes a gyakran ismételt műveletek azonosítására és azok egy részének megfelelő irányítás / programozói segítség melletti automatizálására saját munkájának megkönnyítése céljából.</p>										
<i>Attitűd:</i>										
<p>Nyitott a szakmai eszmecserére mind a kémiai szakterületen, mind a kapcsolódó területeken dolgozó szakemberekkel.</p> <p>Elkötelezett új kompetenciák elsajátítására és világképének bővítésére.</p> <p>Tudatosan vállalja szakmája etikai normáit.</p> <p>Tisztában van a szakmai kijelentések jelentőségével és következményeivel.</p> <p>Megszerzett ismereteinek alkalmazásával törekszik kémiai folyamatok és szerkezetek megfelelő kvantumkémiai leírására.</p>										

Autonómia és felelősség:

A természettudományos világnézetet szakmai megbeszélések, viták során felelősséggel vállalja.
Munkája során képes önállóan végiggondolni alapvető szakmai kérdéseket, képes erről felettesének érdemi összeállításokat készíteni, amelyek döntések alapjául szolgálhatnak.
Szakmai irányítás mellett képes együttműködni más szakterületek szakembereivel (pl. szintetikus vegyész, analitikus, biokémikus, programozó).

A kurzus tartalma, témakörei

Hartree-Fock elmélet
Sűrűségfunkcionál elmélet
Báziskészlet, bázisfüggvény
Oldószerhatás
Reakciómechanizmus
Konformáció-analízis
Linux alapismeretek
Scriptek írása

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

Aktív részvétel az órákon.
Egy egyéni esetfeldolgozás elkészítése és ismertetése (egyeztetett témában és időpontban).
Egy gyakran ismételt elemi lépés automatizálása megfelelő script létrehozásával (egyeztetett témában és időpontban).

Értékelés

Órai munka (34 %)
Esetfeldolgozás (33 %)
Script írás (33 %)
- A hallgatók a referátumok, (csoportos) esetfeldolgozás eredményéről a kurzus végén önértékelést készítenek
- A hallgatók egymás referátumáról és esetbeszámolóiról a tanóra végén (az órai vitát, megbeszélést figyelembe véve) értékelést adnak
Sikertelen teljesítés esetén a javítás módja, határideje: a tematika egymásra épülő gyakorlatokból áll, így a hiányzások pótlása nélkülözhetetlen a következő gyakorlatra (gyakorlaton) ill. a félév végi vizsga sikeres teljesítéséhez, ami egy komplex számítási feladat és egy script megírása.

Kötelező olvasmány:

Purgel Mihály, Viskolcz Béla: Modern fizikai kémia, 4. fejezet - Kvantumkémiail alkalmazások
http://www.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop412A/2011_0025_vegy_7/ch04.html

Ajánlott szakirodalom:

Veszprémi Tamás, Fehér Miklós: A kvantumkémia alapjai és alkalmazása
http://www.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop425/2011_0001_531_kvantumkemia/adatok.html
http://wanglab.bu.edu/g03guide/G03Guide/www.gaussian.com/g_ur/keywords.htm
http://zeus.nyf.hu/~blahota/ubuntu/Linux_11_10_06.pdf

Heti bontott tematika

1. hét	<p>Az alapvető elméleti ismeretek átismétlése: Schrödinger egyenlet, Hartree-Fock módszer (HF), bázisok.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a kémia tudományos eredményein alapuló, az atomok és molekulák szerkezetére, a kémiai kötés kialakulására vonatkozó legfontosabb igazolt elméleteket, modelleket. Rendelkezik azokkal a kémiai alapismeretekkel, amelyek lehetővé teszik az alapvető kémiai reakciók leírását, az erre épülő gyakorlat elemeinek megismerését, az ismeretek rendszerezé-</p>
--------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

	sét.
2. hét	Molekulatervezés, a GaussView program használata. <hr/> TE: Képes a számítási eredmények kiértékelésére, értelmezésére, dokumentálására.
3. hét	A Gaussian 03W program ismertetése, geometriaoptimalás. <hr/> TE: Képes elsajátítani azt az idegen nyelvű szókincset, amellyel ismeretanyagát idegen nyelvű közegben is kommunikálni tudja.
4. hét	Molekularezgések számítása, a potenciális energia hiperfelület (PEH) nevezetes pontjainak azonosítása. <hr/> TE: Képes a kémia szakterületen szerzett tudását alapvető gyakorlati megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is.
5. hét	Reakciók szabadentalpiájának meghatározása. <hr/> TE: Képes a kémia szakterületen szerzett tudását alapvető gyakorlati megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is. Munkája során képes önállóan végiggondolni alapvető szakmai kérdéseket, képes erről felettesének érdemi összeállításokat készíteni, amelyek döntések alapjául szolgálhatnak.
6. hét	Magasabb szintű módszerek ismertetése I.: post-HF módszerek. <hr/> TE: Képes a kémia szakterületen szerzett tudását alapvető gyakorlati megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is. A természettudományos világnézetet szakmai megbeszélések, viták során felelősséggel vállalja.
7. hét	Magasabb szintű módszerek ismertetése II.: Sűrűségfüggvény módszer (DFT). <hr/> TE: Képes a kémia szakterületen szerzett tudását alapvető gyakorlati megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is. Képes a kémia szakterületen szerzett tudását alapvető gyakorlati megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is.
8. hét	Oldószerhatás, a polarizált kontinuum modell ismertetése, a korábbi feladatok bővítése. <hr/> TE: Képes a kémia szakterületen szerzett tudását alapvető gyakorlati megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is. Munkája során képes önállóan végiggondolni alapvető szakmai kérdéseket, képes erről felettesének érdemi összeállításokat készíteni, amelyek döntések alapjául szolgálhatnak.
9. hét	Reakcióutak feltérképezése, intermedierek és átmeneti állapotok meghatározása. <hr/> TE: Munkája során képes önállóan végiggondolni alapvető szakmai kérdéseket, képes erről felettesének érdemi összeállításokat készíteni, amelyek döntések alapjául szolgálhatnak. Képes a kémia szakterületen szerzett tudását alapvető gyakorlati megoldására alkalmazni, beleértve azok számításokkal történő alátámasztását is. Ismeretei alapján rendelkezik a természettudományos alapokon nyugvó érvelés képességével.
10. hét	A konformáció-analízis lépéseinek áttekintése. Ismerkedés a Linux környezettel, hasznos parancsok. <hr/> TE: Képes végiggondolni a vizsgálni kívánt rendszer tanulmányozásához szükséges lépéseket. Képes Linux környezetben egyszerű parancsok kiadására.
11. hét	Linux parancsok összekapcsolása (átírányítás, paraméter átadás). <hr/> TE: Képes Linux környezetben bonyolultabb parancsok kiadására, kapcsolók használatára, egyszerűbb parancsok összekapcsolására.
12. hét	Egyszerű scriptek írása b-shellben. <hr/> TE: Képes a korábban megtanult Linux parancsokat az elvégzendő feladatnak megfelelően sorba rendezni, változókat használni.
13. hét	Input fájlok generálásához szükséges scriptek írása. <hr/> TE: Képes a számításokhoz szükséges input adatok azonosítására. Képes input fájlok köte-

	gelt létrehozására programozói segítség mellett.
14. hét	Adatkinyeréséhez szükséges scriptek írása b-shellben. <hr/> <hr/> <p>TE: Képes a szükséges számítási adatok output fájlokban történő azonosítására. Képes az adatok output fájlkból történő kötegelt kinyerésére programozói segítség mellett.</p>