



SZÁMÍTÓGÉPES KÉMIA ALAPJAI
VEGYÉSZMÉRNÖK BSc. NAPPALI TÖRZSANYAG

TANTÁRGYI KOMMUNIKÁCIÓS DOSSZIÉ

**MISKOLCI EGYETEM
MŰSZAKI ANYAGTUDOMÁNYI KAR
KÉMIAI INTÉZET**

Miskolc, 2019/20. tanév I. félév

Tartalomjegyzék

1. Tantárgyleírás

Tárgyjegyző, óraszám, kreditérték. A tantárgy feladata és célja. A tantárgy tematikus leírása. A kurzusra jelentkezés módja. Oktatási módszer. Félévközi számonkérés módja. Követelmények. Értékelés módja. Kötelező- és ajánlott irodalom.

2. Tantárgytematika

3. Egyéb követelmények

1. Tantárgyleírás

Tantárgy neve: SZÁMÍTÓGÉPES KÉMIA ALAPJAI	Tantárgy neptun kódja: MAKKEM102VB Tárgyfelelős intézet: Kémiai Intézet Tantárgyelem: ¹ Kötelező (K)
Tárgyfelelős: Dr. Szőri Milán, egyetemi docens	
Közreműködő oktató(k):-	
Javasolt félév: ² Ö	Előfeltétel: -
Óraszám/hét: ³ Előadás: 1 Gyakorlat: 1	Számonkérés módja (a/gy/k/b): ⁴ aláírás-gyakorlati jegy
Kreditpont: 3	Munkarend: ⁵ Nappali
<p>Tantárgy feladata és célja: Készség szinten sajátítsa el a mérések kiértékeléséhez szükséges statisztikai és regressziós eszközöket, valamint kvantummechanika alapelveit. Betekintés kapjon a modern kémiai kötés elméletekbe és képes legyen az alapvető molekuláris sajátságokat értelmezni és egyszerűsített kvantumkémiai modellek segítségével számítani. A kvantummechanikai számításokból származó eredményeket kiértékelni és kísérleti adatokkal összevetni. A kvantumkémiai modellek jóságára vonatkozóan mennyiségi jellemzést adni. A hallgató képes legyen a számított adatokat könnyen értelmezhető formában vizualizálni.</p> <p>Fejlesztendő kompetenciák: <i>tudás:</i> VBT1, VBT5, VBT8. <i>képesség:</i> VBK1, VBK6, VBK7. <i>attitűdje:</i> VBA1, VBA5. <i>autonómia:</i> VBF2, VBF6.</p>	
Tantárgy tematikus leírása:	
<p>Előadás és gyakorlat:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Bemutakozás. A félév teljesítésének feltételei. 2. Mérési eredmények kiértékelése. Statisztikai alapfogalmak és számításuk. Hibaterjedések. Egyszerű kiugróérték keresések. 3. Kémiai egyenletek gyors megoldása Wolfram Alpha segítségével (pH számítások). 4. Lineáris és nemlineáris regressziók Origin program segítségével. 5. Zárthelyi munka (ZH1) 6. Kémiai modellalkotás. Egy- és kétdimenziós molekulamodellek. 7. Molekulaszerkezet meghatározása: geometriai optimalás. Háromdimenziós molekulamodellek. 8. Atomi- és molekulapályák vizualizációja. Molekuláris elektrosztatikus potenciál. Elektronsűrűsége alapuló molekulamodellek (Atoms in Molecules). Kötések elektronsűrűség alapú jellemzése. 9. Molekula normálrezgéseinek meghatározása és megjelenítése. Animációkészítés. 10. Egyszerű potenciális energiafelület számítások I. Le Chatelier-Braun elv igazolása számításokkal. 11. Gyakorlás. 12. Zárthelyi munka (ZH2) 13. Pótlások, az elért eredmények értékelése. (ZH1 vagy ZH2) 	
<p>Félévközi számonkérés módja:</p> <ul style="list-style-type: none"> ❖ Az előadáson és a ráépülő számítógépes gyakorlatokon való részvétel kötelező. A gyakorlatokról hiányozni csak indokolt esetben, orvosi igazolás bemutatása esetén lehetséges. Az aláírás feltétele a félév során mindegyik gyakorlaton való részvétel. ❖ A félév során a hallgató két alkalommal ad számot a megszerzett gyakorlati tudásáról: <ul style="list-style-type: none"> ○ Zárthelyi a kémiai adatok kiértékeléséből. A ZH értékelése 5 fokozatú minősítéssel történik (ZH1). ○ Zárthelyi kémiai problémák kvantumkémiai megoldásából. A ZH értékelése 5 fokozatú minősítéssel történik (ZH2). ❖ Zárthelyi dolgozat írásáról, valamint a kiselőadások tartásáról hiányozni csak indokolt esetben, orvosi igazolás bemutatása esetén lehetséges. Csak egyetlen számonkérés pótlása lehetséges, ha ettől több pótlására lenne szükség a félévi aláírás megtagadására kerül sor. ZH-k pótlására 	

KOMMUNIKÁCIÓS DOSSZIÉ

csak aláírás-pótlás keretében van mód, melynek időpontja a vizsgaidőszak első két hetében a tantárgyjegyző által rögzített időpont.

Kollokvium teljesítésének módja, értékelése⁶:

- ❖ A vizsga témakörei előadásanyag tematikájából áll és a hallgatónak szóbeli beszámolót kell belőle tartania. A beszámoló 5 fokozatú érdemjeggyel kerül osztályzásra. Minősége és kidolgozottsága alapján kapott érdemjegy a kollokvium értékelésében kétszeres súllyal szerepel (BESZÁMOLÓ). A két zárthelyi érdemjegyének (ZH1 és ZH2) súlya egyszeres. A kollokvium értékelése az előbb említett súlyozású számtani átlag alapján történik kiszámításra az alábbi képlet szerint:
$$\text{Kollokviumi érdemjegy} = \frac{\text{Kerekítés}((\text{ZH1} + \text{ZH2} + 2 \times \text{BESZÁMOLÓ})/4)}$$
- ❖ 5 fokozatú értékelés.

Kötelező irodalom:

- ❖ Veszprémi Tamás, Fehér Miklós: *A Kvantumkémia alapjai és alkalmazása*. Műszaki Könyvkiadó 2002. (magyar nyelvű)
- ❖ Michael J. Pilling, Paul W. Seakins: *Reakciókinetika*. Nemzeti Tankönyvkiadó Zrt. 1997. (magyar nyelvű)
- ❖ James B. Foresman, Aileen Frisch: *Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian* Gaussian Inc.; 2nd edition (August 1996) (angol nyelvű)
- ❖ Frank Jensen: *Introduction to Computational Chemistry*. Second Edition. Wiley & Sons, Ltd. 2007. (angol nyelvű)

Ajánlott irodalom:

- ❖ http://www.gaussian.com/g_whitepap/white_pap.htm (hozzáférés: 2019. szeptember 1.)
- ❖ http://www.gaussian.com/g_ur/keywords.htm (hozzáférés: 2019. szeptember 1.)
- ❖ <http://www.originlab.hu/Hungarian-Origin-8.5-Getting-Started-Booklet-edition1.pdf> (hozzáférés: 2019. szeptember 1.)

¹Kötelező, kötelezően választható, szabadon választható (K, KV, SZV)

²Javasolt félév számmal és keresztfélév miatt őszi/tavaszi (Ő/T) megjelöléssel. (pl.: 3. T)

³Nappali/15 heti bontásba, levelező/félév

⁴Számonkérés módja: aláírás, aláírás-gyakorlati jegy, aláírás-kollokvium, aláírás-beszámoló

⁵Nappali/levelező

⁶Értékelés fajtájának értelmezése: a: kétfokozatú (nem megf., megf.), gy: ötfokozatú (1-5), k: ötfokozatú (1-5), b: háromfokozatú (nem megf., megf., kiv.megf.)

2. Tantárgytematika

HÉT	GYAKORLAT
1.	Bemutakozás. A félév teljesítésének feltételei.
2.	Mérési eredmények kiértékelése. Statisztikai alapfogalmak és számításuk. Hibaterjedések. Egyszerű kiugróérték keresések.
3.	Kémiai egyenletek gyors megoldása Wolfram Alpha segítségével (pH számítások).
4.	Lineáris és nemlineáris regressziók Origin program segítségével.
5.	Zárthelyi munka
6.	Kémiai modellalkotás. Egy- és kétdimenziós molekulamodellek.
7.	Molekulaszerkezet meghatározása: geometriai optimalás. Háromdimenziós molekulamodellek.
8.	Atomi- és molekulapályák vizualizációja. Molekuláris elektrosztatikus potenciál. Elektronsűrűségen alapuló molekulamodellek (Atoms in Molecules). Kötések elektronsűrűség alapú jellemzése.
9.	Molekula normálrezgéseinek meghatározása és megjelenítése. Animációkészítés.
10.	Egyszerű potenciális energiafelület számítások I. Le Chatelier-Braun elv igazolása számításokkal.
11.	Gyakorlás.
12.	Zárthelyi munka
13.	Pótlások, az elért eredmények értékelése.

3. Egyéb követelmények

A kurzus eredményes teljesítése a félév során a kötelező óralátogatásokon túlmenően minimum heti 1 óra egyéni felkészülést (ismétlést, gyakorlást) igényel.

Miskolc, 2019. szeptember 5.

Dr. Szőri Milán
tantárgyjegyző