

Válogatott fejezetek az elméleti kémiából

A kurzus részletes tematikája:

Napjaink kémiai kutatásaiban az elméleti kémia, azaz a kvantumkémia és a molekulamodellezés egyre nagyobb szerepet tölt be. A kurzus célja, hogy a hallgatót az érdeklődésének megfelelő témabeli példán vagy példákon keresztül megismertesse az elméleti kémia nyújtotta lehetőségekkel, és megteremtse az alapjait annak, hogy a hallgató a későbbiekben képes legyen kommunikálni elméleti kémikus szakemberekkel. Ezért az elméleti háttér rövid ismertetése után a hallgató a kutatási területéhez kapcsolódó feldolgozandó elméleti kémiai irodalmat, és gyakorlati feladatot kap, amelyet az oktató vezetésével számítógép mellett el kell végeznie.

1 - 4 hét: Kvantumkémia alapjai (Hartree-Fock módszer, korrelációs ab initio módszerek, DFT, potenciálisenergia-hiperfelület, geometria optimalás, oldószermodellek).

5 - 7 hét: Molekuladinamika (mozgásegyenletek, integráló algoritmusok, periodikus határfeltételek, termosztátok és barosztátok, erőterek, párkorrelációs függvények).

8 - 12 hét: A gyakorlati feladatok kivitelezése.