



**MISKOLCI EGYETEM**  
**Műszaki Anyagtudományi Kar**  
**Kerpely Antal Anyagtudományok és Technológiák**  
**Doktori Iskola**



# Összetett molekuláris rendszerek szimulációja, molekulatervezés és termokémiai számítások

**Dr. Szőri Milán**

**TANTÁRGYLEÍRÁS**

2016.  
Szerző: Dr. Szőri Milán

# Összetett molekuláris rendszerek szimulációja, molekulatervezés és termokémiai számítások

Dr. Szőri Milán

## Tantárgy jegyzője

Dr. Szőri Milán, egyetemi docens, Kémiai Intézet.

Szoba: A/2. mfsz. 1. A3e-mail: milan.szori@uni-miskolc.hu, tel: 1337, 703357820, <http://www.uni-miskolc.hu/~kemszori/>

## Tantárgy célcsoportja

A tárgy a Kerpely Antal doktori iskolamindenhallgatójának ajánlott, de különösen a Határfelületi- és nanotechnológiák, Anyaginformatika, Úranyag tudomány és technológia, Nagyhőmérsékletű berendezések és hőenergia-gazdálkodás, Kémiai folyamatok és technológiák tématerülettel foglalkozóaknak.

## Tantárgy nyelve

Magyar vagy angol.

## Tantárgy célja

A tantárgy célja az, hogy a hallgató megismerje és megértse a modern számításon alapuló kémiai módszereket, amelyeket felhasználva, képessé váljon azokat széles körben alkalmazni.

## Tantárgy módszertana

Kontaktóra keretében kerül a tananyag átadásra. Az elméleti háttér ismertetése után, az elméletet implementáló programcsomagok segítségével mélyítem el a hallgatók elméleti tudását.

## Tantárgy tematikája

Born-Oppenheimer közelítés és következményei: a molekula koncepció. Potenciális energiafelületek „letapogatása”.

Molekulába zárt atom modellje (AIM). Molekulák és szilárd testek elektroneloszlás függvényének analízise. Kötéselméletek.

Virtuális kombinatorikus kémia: molekulák gráf reprezentációinak előállítás, illetve alkalmazása. A kémiai tér feltérképezése elméleti kémiai módszerekkel.

Molekuláris sajátságoktól sokaság jellemzőkig: állapotösszeggel felírt állapotfüggvények; szabadsági fokok hozzájárulásai az állapotösszeghez és számításuk. Sokaság termodinamikai paramétereinek számítása.

Nagypontosságú termokémiai modellek és alkalmazásuk. Előnyök és hátrányok bemutatása.

Reakciómechanizmusok felderítése és az azokból származtatott abszolút sebességi állandó meghatározás elméleti alapjai. A számítási eredmények SWOT analízise és bizonytalansága. Összetett reakciórendszerek kinetikai vizsgálata: égések és légköri oxidáció.

Molekuláris rendszerek leírása implicit elektronmodellek segítségével. Adszorpciós jelenségek molekuladinamikai megközelítése. Adszorpciós jelenségek tanulmányozása nagykanonikus Monte Carlo szimulációval.

### Tantárgyhoz kapcsolódó irodalmak

1. Christopher J. Cramer: *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd Edition), Wiley, 2004.
2. Veszprémi Tamás, Fehér Miklós: *A Kvantumkémia alapjai és alkalmazása*, Műszaki Könyvkiadó, 2002.
3. Frank Jensen: *Introduction to Computational Chemistry. Second Edition*. Wiley & Sons, Ltd. 2007.
4. + Amennyiben a hallgató kutatási témája során használja a módszert, a témájához szorosan kapcsolódó irodalmat is kap.

### Tantárgy teljesítése, számonkérés

Szóbeli vizsga.

### Tantárgyhoz kapcsolódó komplex vizsga kérdések

1. Számításos kémiai módszerek szerepe a szerkezetvizsgálatban. Előnyök, hátrányok, korlátok.
2. Virtuális kombinatorikus kémia vizsgálatok, a különböző módszerek információ tartalma, alkalmazási területei.
3. Termodinamikai paraméterek számításához használt elméleti modellek és azok kritikai teljesítményjellemezése.
4. Kvantumkémiai számításokon alapuló abszolút sebességi állandó meghatározási módok, gyakorlati alkalmazásuk és korlátaik.
5. Adszorpciós folyamatok molekulaszintű értelmezésére használt szimulációs modellek bemutatása és teljesítőképeségű ismertetése egy példán keresztül.