

Vizsgatételek

Számítógépes Kémia, IV. éves informatikus vegyész, 2007/2008 I. félév

1. Potenciális energia felületek és szélsőérték-kereső algoritmusok.
2. Atomok és molekulák kvantummechanikája. A Hartree–Fock módszer és bázisfüggvény készletek.
3. Molekulamechanika.
4. Monte Carlo módszerek.
5. Molekuláris dinamikai módszerek.
6. Molekuláris tulajdonságok számítása.
7. Termokémia – statisztikus mechanika.
8. Sűrűségfacionál elméletek.
9. Kvalitatív elméletek a kémiában.

A vizsga beugró dolgozattal kezdődik. Itt legalább 50 (azaz ötven) %-ot kell elérni, ez alatt a vizsga elégtelen. Sikeres beugró után a vizsgázó egy tételt húz.

Budapest, 2007. december 10.

Császár Attila, Tóth Gergely

This document was created with Win2PDF available at <http://www.win2pdf.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.
This page will not be added after purchasing Win2PDF.