



Tantárgy kód

**BMETE12MF44**

**Tantárgy azonosító adatok**

|     |                                   |   |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
|-----|-----------------------------------|---|-------------|----------------|-------------|------------------------|-------------|----------|----------|--------|----------|
| 1.  | A tárgy címe                      | <b>Atomi szint számítógépes szimuláció szilárdtestekben</b> |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
| 2.  | A tárgy angol címe                | <b>Computational Simulation at Atomic Scale in Solids</b>   |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
| 3.  | A tárgy rövid címe                |   | Követelmény | <b>2</b>       | +           | <b>1</b>               | +           | <b>0</b> | <b>f</b> | Kredit | <b>4</b> |
| 4.  | Ajánlott/kötelező tanulmányi rend |   |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
|     | vagy                              | Tantárgy kód 1  | Rövid cím 1 | Tantárgy kód 2 | Rövid cím 2 | Tantárgy kód 3         | Rövid cím 3 |          |          |        |          |
| 4.1 |                                   |   |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
| 4.2 |                                   |   |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
| 4.3 |                                   |   |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
| 5.  | Kizáró tantárgyak                 |   |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
| 6.  | A tantárgy felelős tanszéke       | <b>Atomfizika Tanszék</b>                                   |             |                |             |                        |             |          |          |        |          |
| 7.  | A tantárgy felelős oktatója       | <b>Dr. Gali Ádám</b>  |             |                | beosztása   | <b>egyetemi docens</b> |             |          |          |        |          |

**Akkreditációs adatok**

|    |                                    |                    |   |                    |
|----|------------------------------------|--------------------|---|--------------------|
| 8. | Akkreditációra benyújtás időpontja | <b>2012.10.18.</b> | Akkreditációs bizottsági döntés időpontja | <b>2012.11.27.</b> |
|----|------------------------------------|--------------------|---|--------------------|

**Megjegyzések**

Csak az űrlap fehéren hagyott mezőibe írjunk és a mezők között a **tabulátor** billentyűvel haladjunk! Ha egy kitöltött mezőből tabulátor billentyűvel lépünk ki, több más mező értéke automatikusan megváltozhat. Egy adott mezőre lépve, az állapotsorban megjelenő rövid, ill. az F1 gomb megnyomásakor kapható hosszabb leírás ad segítséget a kitöltéshez. A *tantárgy kód*ot és a *tárgy rövid címét* a dékáni hivatal adja.

**1-2. sorok:** A tárgy címének (max. 85 karakter) célszerű legalább egy karakterben különböznie minden más, Neptunban regisztrált tárgy címétől.

**3. sor:** A követelmény eladás+gyakorlat+labor formátumú, az *utolsó mező* a félév végi számonkérés típusa (v,f,a vagy s, részletes információ F1). A *kredit* megadásánál ügyelni kell arra, hogy az alább részletezett, a *tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka* mennyiségével összhangban legyen (összes óraszám = kredit\*30 óra).

**4. sor:** Legfeljebb 3, már korábban hallgatott tárgy adható meg a 4.1 sorban. A 4.2 és 4.3 sorok *vagyilag*os lehetőségek megadására szolgálnak, például abban az esetben, ha az egyik tárgynak korábban oktatott változatai is megfelelnek. **5. sor:** A *kizáró tantárgyaknál* azokat a tárgyakat kell felsorolni, amelyek tematikái a most akkreditálandó tárggyal 75% vagy annál nagyobb átfedést mutatnak.

**6-7. sorok:** A felelős tanszék és oktató hatáskörét, ill. kijelölésének feltételeit a *Képzési Kódex 2010* c. dokumentum 4.§-a tartalmazza.

| <b>Tematika</b> |   |  |                   |
|-----------------|---|--|-------------------|
| 9.              | <b>A tantárgy az alábbi témakörök ismeretére épít</b>   |  |                   |
|                 | Szilárdtestfizika és kvantummechanika alapjainak ismerete.  |  |                   |
| 10.             | <b>A tantárgy szerepe a képzés céljának megvalósításában (szak, kötelező, kötelezően választható, szabadon választható)</b>   |  |                   |
|                 | TTK, VBK és VIK BSc és MSc képzéseinek ajánlott szabadon választható tárgya   |  |                   |
| 11.             | <b>A tantárgy részletes tematikája</b>  |  |                   |
|                 | <p>Bevezetés a lehetséges alkalmazásokba, Unix alapjai</p> <p>Molekulák és tökéletes kristályok geometriája</p> <p>A szilárdtest különböző modelljei</p> <p>Az atommagok és az elektronok szétválasztása: Born-Oppenheimer közelítés, pszeudopotenciálok, projektorok</p> <p>Tipikus bázisfüggvények és tulajdonságaik: síkhullámok, lokalizált bázistípusok</p> <p>Hartree-Fock elmélet, azon alapuló módszerek</p> <p>Félempirikus számítási módszerek</p> <p>Sűrűségfüggvény-elmélet: Hohenberg-Kohn, Kohn-Sham tételek, az elmélet (fél)lokális közelítései</p> <p>A DFT-n alapuló szoros-kötés számítási módszer</p> <p>Hibridfüggvény-elmélet</p> <p>Időfüggő sűrűségfüggvény-elmélet, sokrészecske perturbációs módszerek: bevezetés</p> |  |                   |
| 12.             | <b>Követelmények, az osztályzat (aláírás) kialakításának módja</b>  |  |                   |
|                 | szorgalmi idő szakban   | A gyakorlaton mutatott teljesítmény, illetve a házi feladat elvégzésének minősége alapján alakul ki az osztályzat. | vizsgaidő szakban |
| 13.             | <b>Pótlási lehetőségek</b>  |  |                   |
|                 | Pótlási hét   |  |                   |
| 14.             | <b>Konzultációs lehetőségek</b>   |  |                   |
|                 | Oktatóval történő megbeszélés szerint   |  |                   |
| 15.             | <b>Jegyzet, tankönyv, felhasználható irodalom</b>   |  |                   |
|                 | Gali Ádám: Atomi szintű számítógépes szimuláció szilárdtestekben: elmélet és gyakorlat I.   |  |                   |
|                 |   |  |                   |

|     |  |   |                                  |
|-----|--|---|----------------------------------|
| 16. | A tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka mennyisége órákban (a teljes szemeszterre számítva) |   |                                  |
|     | 16.1   | Kontakt óra                                       | 42                               |
|     | 16.2   | Félévközi felkészülés órákra                      | 28                               |
|     | 16.3   | Felkészülés zárthelyire                           | 0                                |
|     | 16.4   | Zárthelyik megírása                               | 0                                |
|     | 16.5   | Házi feladat elkészítése                          | 50                               |
|     | 16.6   | Kijelölt írásos tananyag elsajátítása (beszámoló) | 0                                |
|     | 16.7   | Egyéb elfoglaltság                                | 0                                |
|     | 16.8   | Vizsgafelkészülés                                 | 0                                |
|     | 16.9   | <b>Összesen</b>                                   | <b>120</b>                       |
| 17. | Ellenrz adat   |   | <b>Kredit * 30</b><br><b>120</b> |

| A tantárgy tematikáját kidolgozta |                      |                        |   |
|-----------------------------------|----------------------|------------------------|---|
| 18.                               | Név                  | beosztás               | Munkahely (tanszék, kutatóintézet stb.) |
|                                   | <b>Dr. Gali Ádám</b> | <b>egyetemi docens</b> | <b>Atomfizika Tanszék</b>               |
|                                   |                      |                        |   |
|                                   |                      |                        |   |

| A tanszékvezet |                          |          |
|----------------|--------------------------|----------|
| 19.            | Neve                     | aláírása |
|                | <b>Dr. Richter Péter</b> |          |

**Megjegyzések**  
**16.1 sor:** Értéke automatikusan kitöltődik az rlap elektronikus változatában, a „Követelmény” címszónál megadott óraszám értékek alapján, az (eladás+gyakorlat+labor) \* (14 oktatási hét) formula szerint. **16.4 sor:** Értéke 0, ha a zárthelyik íratása kontakt órákon történik, egyébként pedig a minimálisan szükséges számú zárthelyi megírásához felhasználandó idő (a pót zárthelyik nélkül). **16.7 sor:** Az „Egyéb elfoglaltság” szöveg helyére a tevékenység konkrét megnevezését kell írni.  
**17. sor:** Az itt szereplő értéknek és a **16.9 sorban** automatikusan megjelenő tanulmányi óraszám összegnek hozzávetőlegesen meg kell egyeznie! Tájékoztatásul azt vegyük figyelembe, hogy a hallgatók által egy szemeszterben átlagosan 30 kreditnyi munkamennyiséget kell teljesíteni, azaz a szorgalmi és vizsgaidőszak során elvárt terhelés összesen kb. 900 munkaóra.