



Tantárgy kód

BMETE159301

Tantárgy azonosító adatok

1.	A tárgy címe	Molekulafizika 2									
2.	A tárgy angol címe	Molecular Physics 2									
3.	A tárgy rövid címe	Molekulafizika2	Követelmény	2	+	0	+	0	v	Kredit	2
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	152015	kvantum	152066	Molfiz						
	4.2										
	4.3										
5.	Kizáró tantárgyak										
6.	A tantárgy felelős tanszéke	Elméleti Fizika Tanszék									
7.	A tantárgy felelős oktatója	Dr. Udvardi László	beosztása	tud. f munkatárs							

Akkreditációs adatok

8.	Akkreditációra benyújtás időpontja	2004.04.05.	Akkreditációs bizottsági döntés időpontja	2004.04.19.
----	------------------------------------	--------------------	---	-------------

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 kódot* a dékáni hivatal adja.

1-2. sorok: A tárgy címének (max. 60 karakter) legalább egy karakterben különböznie kell minden más, Neptunban regisztrált tárgy címétől.

3. sor: A rövid cím jellegzetes, legfeljebb 16 karakter hosszúságú rövidítés. A követelmény eladás+gyakorlat+labor formátumú, az utolsó mező a félév végi számonkérés típusa (v,f,a vagy s, részletes információ az F1 gombra). 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 *vagylagos* 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 2001* c. dokumentum 9.1 fejezete tartalmazza.

Tematika			
7.	A tantárgy az alábbi témakörök ismeretére épít Kvantummechanika, Atom és molekulafizika		
8.	A tantárgy célkit zése, feladata a szakképzés céljának megvalósításában szabadon választható a mérnökfizikus hallgatóknak		
9.	A tantárgy részletes tematikája <ul style="list-style-type: none"> • Másodkvantált formalizmus <ul style="list-style-type: none"> • A Hamilton operátor és a Hartree-Fock egyenletek másodkvantált alakja • Post Hartree-Fock módszerek • A konfigurációs kölcsönhatás (CI) módszere, molekulák spektroszkópiai tulajdonságainak meghatározása • Many-body perturbáció számítás <ul style="list-style-type: none"> • Möller-Plesset particionálás • Coupled cluster közelítés • Ionizációs potenciál és elektron affinitás meghatározása • Bevezetés a s r ség funkcionál elméletbe 		
10.	Követelmények, az osztályzat (aláírás) kialakításának módja		
	szorgalmi id szakban	Feladatok kidolgozása	vizsgaid szakban Vizsga
11.	Pótlási lehet ségek Kidolgozandó feladat pótlása a vizsgaid szak els hetéig		
12.	Konzultációs lehet ségek el adó fogadóóráján		
13.	Jegyzet, tankönyv, felhasználható irodalom		
	Kapuv-Török: Atomok és molekulák kvantumelmélete		
	Attila Szabo: Modern quantum chemistry : Introduction to advanced electronic structure theory		
	Surján R. Péter: Second quantized approach to quantum chemistry : An elementary introduction		

14.	A tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka mennyisége órákban (a teljes szemeszterre számítva)		
	14.1	Kontakt óra	28
	14.2	Félévközi felkészülés órákra	14
	14.3	Felkészülés zárthelyire	0
	14.4	Zárthelyik megírása	0
	14.5	Házi feladat elkészítése	0
	14.6	Kijelölt írásos tananyag elsajátítása (beszámoló)	6
	14.7	Egyéb elfoglaltság	0
	14.8	Vizsgafelkészülés	0
	14.9	Összesen	48
15.	Ellenrz adat	Kredit * 30	60

A tantárgy tematikáját kidolgozta			
16.	Név	beosztás	Munkahely (tanszék, kutatóintézet stb.)
	Dr. Udvardi László	tud. f munkatárs	Elméleti Fizika Tanszék

A tanszékvezet		
17.	Neve	aláírása
	Prof. Kertész János	

Megjegyzések

14.1 sor: Értéke automatikusan kitöltődik az online elektronikus változatában, a „Követelmény” címszónál megadott óraszám értékek alapján, az $(el\ adás+gyakorlat+labor) * (14\ oktatási\ hét)$ formula szerint. **14.4 sor:** Értéke 0, ha a zárthelyik íratása kontakt órákon történik, egyébként pedig a minimálisan szükséges számú zárthelyi megírásához felhasználandó idő (a pót zárthelyik nélkül). **14.7 sor:** Az „Egyéb elfoglaltság” szöveg helyére a tevékenység konkrét megnevezését kell írni.

15. sor: Az itt szereplő értéknek és a **14.9 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.