



Tantárgy kód

**BMETE15MF15**

**Tantárgy azonosító adatok**

1.	A tárgy címe	<b>A s r ség funkcionál elmélet alapjai</b>									
2.	A tárgy angol címe	<b>Foundations of Density Functional Theory</b>									
3.	A tárgy rövid címe	<b>AS r ségFunkcionál</b>	Követelmény	<b>2</b>	+	<b>0</b>	+	<b>0</b>	v	Kredit	<b>3</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>Elméleti Fizika Tanszék</b>									
7.	A tantárgy felelős oktatója	<b>Dr. Pipek János</b>	beosztása	<b>egyetemi docens</b>							

**Akkreditációs adatok**

8.	Akkreditációra benyújtás időpontja	<b>2008.09.22.</b>	Akkreditációs bizottsági döntés időpontja	2008.12.16.
----	------------------------------------	--------------------	---	-------------

**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.

<b>Tematika</b>			
7.	A tantárgy az alábbi témakörök ismeretére épít		
	Kvantummechanika, funkcionálanalízis		
8.	A tantárgy célkit zése, feladata a szakképzés céljának megvalósításában		
	A tárgy az oklevélben nem nevesített szakirány kötelez en választható tantárgya		
9.	A tantárgy részletes tematikája		
	Sok-részecskés Fock-tér és $s, r$ ségoperátor. Redukált $s, r$ ségoperátorok. A kölcsönható elektron rendszerek egzakt egyenletei és a független részecske közelítés $s, r$ ségoperátor képbén. $N$ -el állíthatóság. A Fermi-lyuk és a lokalizált pályák. Az elektron $s, r$ ség. Kato tétele és a cusp (csúcs) feltételek. Az elektron $s, r$ ség és $N$ el állíthatósága. Hohenberg és Kohn tételei. Az univerzális $s, r$ ség funkcionál létezése. A Levy-féle korlátozott keresés módszere. Skálatulajdonságok. Kohn és Sham egyenletei. Tört betöltési számok. A kémiai potenciál és az elektronegativitás. Közelít módszerek. Gradiens sorfejtés. Modern funkcionálok.		
10.	Követelmények, az osztályzat (aláírás) kialakításának módja		
	szorgalmi id szakban	nincs	vizsgaid szakban szóbeli vizsga
11.	Pótlási lehet ségek		
	Az érvényes TVSz szerint.		
12.	Konzultációs lehet ségek		
	Az oktatóval történ megállapodás szerint.		
13.	Jegyzet, tankönyv, felhasználható irodalom		
	Nagy Ágnes: Molekulák elektrons $r$ ség elméletie (KLTE Elméleti Fizika Tanszék, Debrecen, 1994)		
	R.M. Dreizler, E.K.U. Gross: Density Functional Theory (Springer, Berlin, 1990)		
	R.G. Parr, W. Yang: Density-functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford, New York, 1989)		

14.	A tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka mennyisége órákban (a teljes szemeszterre számítva)		
	14.1	Kontakt óra	28
	14.2	Félévközi felkészülés órákra	28
	14.3	Felkészülés zárthelyire	0
	14.4	Zárthelyik megírása	0
	14.5	Házi feladat elkészítése	0
	14.6	Kijelölt írásos tananyag elsajátítása (beszámoló)	0
	14.7	Egyéb elfoglaltság	0
	14.8	Vizsgafelkészülés	34
	14.9	<b>Összesen</b>	<b>90</b>
15.	Ellenrz adat		<b>Kredit * 30</b>
			<b>90</b>

A tantárgy tematikáját kidolgozta			
16.	Név	beosztás	Munkahely (tanszék, kutatóintézet stb.)
	<b>Dr. Pipek János</b>	<b>egyetemi docens</b>	<b>Elméleti Fizika Tanszék</b>

A tanszékvezet		
17.	Neve	aláírása
	<b>Dr. Szunyogh László</b>	

**Megjegyzések**

**14.1 sor:** Értéke automatikusan kitöltődik az rlap elektronikus változatában, a „Követelmény” címszónál megadott óraszám értékek alapján, az (eladás+gyakorlat+labor) \* (14 oktatási hét) formula szerint. **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.