

## Vizsgatételek

### Számítógépes Kémia, IV. éves informatikus vegyész, 2008/2009 II. félév

1. Potenciális energia felületek és szélsőérték-kereső algoritmusok.
2. Atomok és molekulák elektronszerkezet számítása. 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.
10. Magmozgás számítások.

**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, 2009. május 4.**

**Császár Attila, Tóth Gergely**