



MISKOLCI EGYETEM
Műszaki Anyag- és Vegyészmérnöki Kar
Kerpely Antal Anyagtudományok és
Technológiák Doktori Iskola



Számításos szerves kémia

Prof. Dr. Mucsi Zoltán

TANTÁRGYLEÍRÁS

2026.

Szerző: Prof. Dr. Mucsi Zoltán

Számításos szerves kémia

Prof. Dr. Mucsi Zoltán

Tantárgy jegyzője

Prof. Dr. Mucsi Zoltán, egyetemi tanár, Kémiai Intézet.

Szoba: Kémia épület B/7.

e-mail: zoltan.mucsi@uni-miskolc.hu

tel: +36 46 565-111/1635

www: <https://ki.uni-miskolc.hu/munkatarsak/dr-mucsi-zoltan/>

Tantárgy célcsoportja

Az előadást a Kerpely Antal Anyagtudományok és Technológiák Doktori Iskola minden hallgatójának ajánljuk, különös tekintettel a kémia és a számítógépes szimulációk iránt érdeklődő hallgatókra.

Tantárgy nyelve

Magyar.

Tantárgy célja

A tantárgy elsődleges célja, hogy átfogó ismereteket nyújtson a szerves kémiában alkalmazott számításos módszerekről. A kurzus középpontjában a kvantumkémiai megközelítések állnak, különös tekintettel a reakciómechanizmusok, a molekulaszervezet, a reaktivitás és a fotokémiai folyamatok vizsgálatára. A hallgatók betekintést nyernek abba, hogy az elméleti számítások miként támogatják a modern szerves kémiai kutatásban a kísérlettervezést, az eredmények értelmezését és az előrejelzést.

Tantárgy módszertana

A kurzus előadásokból és gyakorlati, számítógépes foglalkozásokból áll. A kvantumkémia elméleti alapjainak bemutatása szorosan kapcsolódik a gyakorlati alkalmazásokhoz, széles körben használt szoftverek (pl. Gaussian) segítségével. A hallgatók megtanulják a molekulamodellek felépítését, a geometriai optimalizálás elvégzését, reakcióútvonalak számítását, valamint az elektronikus szerkezet elemzését. A hangsúly azon van, hogy a számításos eredményeket kémiaiailag értelmezhető és releváns módon tudják feldolgozni és alkalmazni.

Tantárgy tematikája

1. A kvantumkémia alapjai szerves rendszerekben (hullámfüggvény, DFT, báziskészletek)
2. Geometriai optimalizálás és konformációanalízis
3. Potenciálisenergia-felületek és reakciókoordináta-analízis
4. Átmenetiállapot-elmélet és reakciómechanizmusok feltárása

5. Termodinamika és kinetika számításhoz szükséges adatok alapján
6. Oldószerhatások és implicit szolvatációs modellek (PCM, SMD)
7. Elektronszerkezet-elemzés (NBO, töltéeloszlás, határpályák)
8. Aromás jelleg és reaktivitási leírók (pl. NICS)
9. Fotokémia és gerjesztett állapotok (TD-DFT, $S_0/S_1/T_1$ állapotok, ISC)
10. Esettanulmányok: szerves reakciók, katalízis és funkcionális molekulatervezés

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalmak

1. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models – C. J. Cramer, 2nd Edition, Wiley (2004)
→ Comprehensive theoretical foundation with strong relevance to organic chemistry applications.
2. Introduction to Computational Chemistry – F. Jensen, 3rd Edition, Wiley (2017)
→ Practical and method-oriented overview, widely used in graduate-level education.
3. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods – J. B. Foresman, Æ. Frisch, Gaussian Inc. (latest edition)
→ Application-focused guide, especially useful for hands-on computational work (e.g., Gaussian).

Tantárgy teljesítése, számonkérés

Projektmunka.

Tantárgyhoz kapcsolódó komplex vizsga kérdések

1. Reakciómechanizmus-analízis: Ismertesse, hogyan tárható fel egy teljes reakciómechanizmus számításhoz szükséges kémiai módszerekkel. Térjen ki az intermedierek és átmeneti állapotok azonosítására, valamint a potenciálisenergia-felület felépítésére. Hogyan hasonlíthatók össze kvantitatívan az egymással versengő reakcióutak?
2. Átmeneti állapot igazolása: Mutassa be az átmeneti állapot szerkezetének megerősítéséhez szükséges kritériumokat kvantumkémiai számításokban. Tárgyalja a frekvenciaanalízis, az intrinsic reaction coordinate (IRC) számítások szerepét, valamint az átmeneti állapot kapcsolatát a kiindulási anyagokkal és a termékekkel.
3. Módszerválasztás és korlátok: Hasonlítsa össze a sűrűségfunkcionál-elméletet (DFT) és a hullámfüggvény-alapú módszereket (pl. MP2, CCSD). Milyen feltételek mellett megbízható a DFT szerves reakciók modellezésére, és mely esetekben vezethet hibás eredményekhez? Illusztrálja válaszát konkrét szerves kémiai példákkal.

4. Oldószerhatások és realiztikus modellezés: Tárgyalja az oldószerhatások szerepét a reakciók energetikájában és mechanizmusában szerves kémiai rendszerekben. Hasonlítsa össze az implicit (pl. PCM, SMD) és explicit oldószermodelleket, és értékelje azok előnyeit és korlátait gyakorlati alkalmazások szempontjából.
5. Gerjesztett állapotok és fotokémia: Ismertesse, hogyan alkalmazhatók számítási módszerek fotokémiai reakciók vizsgálatára. Mutassa be az S_0 , S_1 és T_1 állapotok szerepét, az intersystem crossing (ISC) folyamatát, valamint a konikus metszések jelentőségét. Hogyan használhatók ezek a fogalmak a fotokémiai kötésbontási folyamatok vagy fluoreszcencia-kioltási mechanizmusok értelmezésére?