



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



# Számítógépes spektroszkópia és termodinamika

Prof. Dr. Szóri Milán

**TANTÁRGYLEÍRÁS**

2024.

Szerző: Prof. Dr. Szóri Milán

# Számítógépes spektroszkópia és termodinamika

Prof. Dr. Szőri Milán

## Tantárgy jegyzője

Prof. Dr. Szőri Milán, egyetemi tanár, Kémiai Intézet.  
Szoba: Informatika épület I. emelet 104.  
e-mail: milan.szori@uni-miskolc.hu  
tel: +36 46 565-111/1635  
www: <https://ki.uni-miskolc.hu/szorimilan>

## 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 kurzus fő célja, hogy áttekintést adjon a hallgatóknak a modern számításhoz kémiai eszközökről, és megtanítsa őket arra, hogyan használják ezeket a technikákat a legkülönbözőbb alkalmazásokban kiegészítve a kísérleti technikákat.

## Tantárgy módszertana

A kurzus személyes előadások és gyakorlati foglalkozások keretében zajlik. Az előadások és a gyakorlatok úgy vannak felépítve, hogy átfogó ismereteket nyújtsanak az elméleti kémiai módszerekről. A hallgatók ezután kvantumkémiai szoftvercsomagok segítségével megtanulják alkalmazni ezeket a módszereket, lehetővé téve számukra, hogy tudásukat a gyakorlatban is alkalmazzák az őket érdeklő rendszerekre.

## Tantárgy tematikája

- Molekularezgésekhez tartozó spektrumok kvantumkémiai számítása.
- Molekuláris rendszerek elektrongerjesztési spektrumának kvantumkémiai számítása: Abszorbancia és fluoreszcencia spektrumok.
- Kiralitás meghatározása molekuláspektrumok számításával
- NMR spektrumok számítása
- Termodinamikai függvények ab initio alapú prediktív számítása.

## Tantárgyhoz kapcsolódó irodalmak

1. Höltzl Tibor, Veszprémi Tamás: *Kémiai szimulációk az atomoktól a vegyipari reaktorokig* Akadémiai Kiadó **2019** (ISBN: 9789630599726)
2. Martin Kaupp; Michael Bühl; Vladimir G Malkin: *Calculation of NMR and EPR parameters: theory and applications* Wiley-VCH, **2004** (ISBN: 3527307796)
3. Frank Neese: *ORCA An ab initio, DFT and semiempirical SCF-MO package - Version 5.0.4* ([https://www.orcasoftware.de/tutorials\\_orca/](https://www.orcasoftware.de/tutorials_orca/))
4. Yukihiro Ozaki, Marek Janusz Wójcik, Jürgen Popp(ed.): *Molecular Spectroscopy A Quantum Chemistry Approach*. **2019** Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. (ISBN: 9783527344611).
5. Frank Jensen: *Introduction to Computational Chemistry* (3 ed.) John Wiley & Sons **2017** (ISBN: 9781118825983).

## Tantárgy teljesítése, számonkérés

Projektmunka.

## Tantárgyhoz kapcsolódó komplex vizsga kérdések

1. Milyen spektrumok tartalmaznak rezgési átmenetekhez tartozó spektrumjeleket? Milyen effektusok befolyásolják a spektrumsávok helyét és intenzitását? Hogyan lehet ezen tényezőket a számítós kémia eszköztárával figyelembe venni?
2. Ismertesse a molekuláris rendszerek elektrongerjesztési spektrumának kvantumkémiai számítására használható elméleti eljárásokat! Milyen spektrumok köthetők az elektronikusan gerjesztett molekulaállapotokhoz?
3. Milyen kísérleti és elméleti kémiai módszert ismer molekula kiralitásának eldöntésére? Milyen kiegészítő információt adnak a kvantumkémiai számítások a kísérleti spektrum értelmezéséhez?
4. Hogyan határozhatók meg NMR paraméterek számítós kémiai eszközökkel? Milyen információt lehet kinyerni a kísérleti és a számított spektrumok összevetésével?
5. Mire használhatók a kvantumkémiai számításokon alapuló termodinamikai protokollok? Milyen termodinamikai függvények becslésére van mód kvantumkémiai módszerekkel? Milyen pontossággal bírnak ezen protokollok?