

Kémiai Informatika záróvizsga tételek

Minden informatikus vegyész vizsgázó egy tételt kap a „Kémiai Informatika” tételsorból. Ezen túlmenően kap egy másik tételt a másik rendelkezésre álló sorozatok tételei közül is. A vizsgán ezt a két tételt fejti ki részletesen a hallgató, de a többiből is lehet kérdezni.

Ajánlott irodalom:

- P. W. Atkins: Fizikai kémia, Budapest, 2002
- Török Ferenc, Pulay Péter: Elméleti Kémia I, Nemzeti Tankönyvkiadó, 1994
- Török F. szerkesztő: A kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elmélete, ELTE TTK jegyzet, 1974
- W. H. Press et al., Numerical Recipes, Cambridge University Press: 1997
- S. Gisberg, G. Takó: Numerikus módszerek I-III, Typotex. Budapest, 1993-1997
- A. S. Tannenbaum, Számítógéphálózatok, Novotrade: 1995
- T. H. Cormen, C. E. Leiserson, R. L. Rivest, Algoritmusok, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1999
- I. N. Bronstein, K. A. Szemengyajev, Matematikai zsebkönyv, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1987

I (kémiai informatika):

- I1. A hagyományos és szimbolikus algebrai programozás (Fortran, C, C++, Java és Mathematica) elemei és gyakorlata.
- I2. Adatok és adatsorok statisztikus kiértékelése. Hibaszámítás. Becslési módszerek, statisztikai modellek. Paraméterbecslő eljárások.
- I3. Molekuláris tulajdonságok meghatározása és megjelenítése a számítógépen. Modelllezés különböző fázisokban. Molekulamechanika.
- I4. Molekulák összehasonlító analízise számítógépes algoritmusokkal. Biomolekulák konformáció analízise. Gyógyszerhatóanyagok dokkolása. Lineáris és térszerkezeti molekuláris információk tárolása.
- I5. Az elektronszerkezet számítás alapvető módszerei. Sűrűségfüggvény elméletek.
- I6. A szerkezetkutató módszerek matematikai, fizikai és információtechnológiai alapjai. Színképek mérésének és feldolgozásának számítógépes háttéré. Számítógépes mérés-technika.
- I7. Függvények közelítése, interpoláció egy- és több dimenzióban. Numerikus differenciálás, numerikus integrálás. Direkt és iteratív numerikus matematikai módszerek a kémiában.
- I8. Számítógépes hálózatok (vonal- és csomagkapcsolt). Hálózati adatkezelés, hálózati szabványok, hálózati eszközök. Erőforrás megosztás. Az Internet. Virtuális valóság.
- I9. Differenciálegyenletek numerikus megoldása. Kémiai reakciók modellezése.
- I10. Kvantumkémiai, számítógépes gyógyszerkutató és egyéb elméleti kémiai programrendszerek.