

Az informatikai kémia szakirány felépítése*	EA	GY	LAB	FÉLÉV
<i>1. MSc törzsanyagból ajánlott tárgyak</i>				
Kémiai Matematika	4	2		1
<i>2.a. Kötelező előadások</i>				
Numerikus módszerek a kémiában előadás	2			2
<i>2.b. Kötelező gyakorlatok</i>				
Numerikus módszerek a kémiában gyakorlat		2		2
Kémiai informatikai gyakorlat A**			4	1
Kémiai informatikai gyakorlat B**			4	2
<i>3.a. Kötelezően választható tárgyak I. (min 12 kredit)</i>				
A Monte Carlo számítógépes szimulációs módszer	2			2
Alkalmazott statisztika	2			1
Alkalmazott számítógépes szimulációk	2			1
Az analitikai kémiai eredmények kiértékelésének módszerei	2			2
Computational chemistry	2			2
Elektronszerkezet számítási módszerei (előadás és gyakorlat)	2	2		2
Elemi reakciódinamika	2			2
Elméleti anyagszerkezet-kutatás	2			szünetel
Elméleti módszerek a fehérjekutatásban	2			2
Folyadékfázisú kémiai dinamika	2			2
Idegrendszeri modellezés	2			2
Kemometria	2			1
Kvantumkémia szeminárium A		2		1
Kvantumkémia szeminárium B		2		2
Molekulaforgások kvantummechanikája	2			1
Molekularezgések kvantummechanikája	2			2
Molekuláris informatika (előadás és gyakorlat)	2	2		2
Molekulaspektrumok és fotokémiai reakciók elméleti vizsgálata	2			1
Reakciódiffúzió-rendszerek és modellezésük	2			szünetel
Reakciómechanizmusok felderítése elméleti módszerekkel	2			2
Reakciómechanizmusok vizsgálata	2			1
Rendezetlenség kondenzált fázisokban	2			2
Számítógépes gyógyszertervezés	2			1,2
<i>3.b. Kötelezően választható tárgyak II. (min 6 kredit)***</i>				
C és Fortran kémiai alkalmazásai		2		1
C programozás		2		szünetel
Kémiai adatfeldolgozás Java nyelven	2			2
Scripting		2		szünetel
Számítógépes mérés technika		2		2
Unix haladóknak		2		1

*Ennek a szakiránynak az elvégzése csak betétlap formájában lesz csatolva az oklevélhez, mivel nincs a Magyar Akkreditációs Bizottságnál akkreditálva.

**A kémiai informatikai gyakorlat két félévben, két különböző témavezetőnél vehető fel

***Ide beszámítható minden egyéb a TTK és IK által meghirdetett programozási nyelv, operációs rendszer, komplex alkalmazói-fejlesztői környezet használatára vonatkozó gyakorlat

Érvényes a 2010/2011. tanév I. félévétől. A korábban kezdő vegyész MSc hallgatókra a változások opcionálisan érvényesek: a szakirányú képesítést megszerezhetik bármelyik a képzésük alatt érvényes tantárgylista alapján.