

Nem kémiai természettudományi tárgyak

Tantárgy neve: Alkalmazott statisztika

kredit: 2

tantárgyfelelős neve: Dr. Keszei Ernő

tanszéke: Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: kémia BSc törzsanyag matematikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Bevezető áttekintés: Véletlen kísérletek, valószínűségi változók. A valószínűségszámítás axiómái. Várható értékek és fontosabb tulajdonságaik. A sztochasztikus konvergencia. Nagy számok törvényei. Valószínűségi eloszlások jellemzése. Binomiális- és Poisson-eloszlás. Egyenletes, exponenciális és normális eloszlás. A Poisson folyamat. Chi-négyzet-eloszlás, Student-féle t -eloszlás és Fisher-féle F -eloszlás.

Részletes tárgyalás: Sokaság és minta. Mintavételi módszerek. Minták jellemzése. Mintastatisztikák. A statisztikai vizsgálatok célja. Sokaság várható értékei és mintastatisztikák közti hasonlóságok és különbségek. Becslési módszerek: maximum likelihood, legkisebb négyzetek módszere, momentumok módszere. Becslőfüggvények tulajdonságai. Konfidencia intervallumok. Statisztikai próbák. Két várható érték összehasonlítása. Több várható érték összehasonlítása (variancia-analízis módszerek). Szórásnégyzetek összehasonlítása. Statisztikai modellek. Lineáris és nemlineáris paraméterbecslés. Az illeszkedés jóságának vizsgálata. Implicit regresszió. Numerikus paraméterbecslő eljárások. Kitekintés a többváltozós módszerek alkalmazására.

Kötelező irodalom: Reimann-Tóth: Valószínűségszámítás és matematikai statisztika, Tankönyvkiadó, 1989

Ajánlott irodalom: J.R.Green, D.Margerison: Statistical Treatment of Experimental Data, Elsevier, 1978

William Feller: An Introduction to Probability Theory and its Application, John Wiley, 1971

W.H.Press és mások: Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 1986

C.Chatfield, A. J. Collins: Introduction to Multivariate Analysis, Chapman and Hall, 1980

Tantárgy neve: C és Fortran kémiai alkalmazásai

Kredit:0+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Szalay Péter egyetemi tanár, Fizikai Kémiai Tsz.

Előtanulmányi feltételek: kémia BSc törzsanyaga informatikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A hallgatók alapfokon megismerkednek a Fortran és C programozási nyelvek szintaktikájával, a programírás mikéntjével, hibakereséssel, programok fordításával és futtatásával.

Kötelező irodalom*:

Lócs-Vigassy: A FORTRAN programozási nyelv, Műszaki Kiadó, 1981

M. Metcalf és John Reid: FORTRAN 91/95 explained, Oxford University Press, 2000.

Brian W. Kernighan és Dennis M. Ritchie: A C programozási nyelv, Műszaki Kiadó 2005.

Ajánlott irodalom:

Tantárgy neve: C programozás

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Lagzi István László, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: ---

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A C nyelv kialakulásának története. Egy egyszerű C program struktúrája és megírása. Változók és kezelésük. Vezérlési szerkezetek. Parancssori argumentumok kezelése. A program fordítása, linkelése, futtatása, make, Makefile. Konstansok, változók, tömbök. Kifejezések, operátorok. Vezérlő utasítások. Függvények. Be- és kimeneti műveletek. Fájlkezelés. Struktúrák és unionok. Pointerek. Dinamikus allokáció, többdimenziós tömbök. Stringek, karakter és bitmanipulációk. Külső könyvtárak. Függvények, globális és lokális változók. Tárkezelés. Matematikai függvények. Kapcsolat az operációs rendszerrel. Egyszerű modellezési feladatok programozása.

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

1. B.W. Kernighen, D.M. Ritchie, The C Programming Language, Prentice Hall: 1998
2. Pethő János: abC programozási nyelv
3. Benkő Tiborné, Benkő László, Tóth Bertalan Programozzunk C nyelven! Computer Book, Budapest, 1995

Tantárgy neve: Elemi részecskefizika

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Süvegh Károly

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: BSc. szintű magfizikai/magkémiai ismeretek, kvantummechanika

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

megmaradási tételek, megmaradó mennyiségek származtatása, szimmetriák, szimmetriasértések, kvázirészecskék, a részecskefizika kísérleti eszközei, adatbázisok, elemi kölcsönhatások, virtuális részecskék, bozonok, Feynmann diagrammok, kvarkok és részecskék, a kvarkok színei, részecskék és az Univerzum

Ajánlott irodalom:

Harald Fritzsch: Quarks, *Penguin Books*, London, 1992

Patkós, Polónyi: Sugárzás és részecskék, *Typotex Kiadó*, Budapest, 2002

Muhin K.N.: Kísérleti magfizika, *Tankönyvkiadó*, Budapest, 1985

Kiss D., Horváth Á., Kiss Á.: Kísérleti atomfizika, *ELTE Eötvös Kiadó*, Budapest, 1998

Tantárgy neve: FIZIKA (2)

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kürti Jenő, Biológiai Fizika Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga fizikából, Fizika(1)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

1. Elektrosztatika vákuumban

elektromos töltés, Coulomb-törvény, elektromos mező, erővonalak, fluxus, Gauss-törvény, cirkuláció, potenciál, töltött gömbhéj, henger illetve síklemez elektromos tere, kondenzátor, fémek sztatikus elektromos mezőben, csúcshatás

2. Magnetosztatika vákuumban

mozgó töltésre ható erő, áramvezetők között ható erő, egyenes vezető tere, Biot-Savart törvény, fluxus, cirkuláció, Ampère-féle gerjesztési törvény, tekercs

3. Elektromos- illetve mágneses multipólusok

elektromos dipólus, kvadrupólus, multipólus saját elektromos tere illetve kölcsönhatása külső elektromos térrel; áramhurok saját mágneses tere illetve kölcsönhatása külső mágneses térrel; elektromos illetve mágneses dipólus összehasonlítása

4. Töltött részecskék mozgása elektromos illetve mágneses mezőben

Lorentz-erő, mozgás homogén illetve inhomogén mezőben, példák: oszcilloszkóp, elektronmikroszkóp, tömegspektrométer

5. Elektromos és mágneses mező anyagokban

elektromos polarizáció, E, D, permittivitás, ferroelektromosság; mágneszettség, B, H, permeabilitás, para-, dia-, ferromágneses anyagok; E, D, B, H viselkedése közegek határán

6. Időben változó mágneses és elektromos mező

mozgási indukció, nyugalmi indukció, Faraday-tv, önindukció, Lenz-törvény, örvényáramok, transzformátor, generátorok, motorok, "eltolási áram"

7. Maxwell egyenletek

Maxwell-egyenletek vákuumban ill. homogén közegben: integrális alak, differenciális alak, skalár- és vektorpotenciál, töltésmegmaradás, megoldás töltés- és árammentes térben: elektromágneses hullám; elektromos és mágneses egységek az SI-ben

8. Egyenáramú és váltóáramú alapjelenségek

ellenállás, Ohm-törvény, induktivitás, kapacitás, Kirchhoff-törvények, egyszerű áramkörök, RLC-körök

9. Anyagok elektromos transzporttulajdonságai

Drude-modell, fémek, szigetelők, félvezetők, fajlagos vezetőképesség (ellenállás) hőmérsékletfüggése, Hall-effektus, termoelektromos effektusok

10. Az elektromágneses mező energiaviszonyai

elektromos teljesítmény, kondenzátor energiája, tekercs energiája, Joule-hő, elektromágneses energia-sűrűség, elektromágneses energia áramlása, Poynting-vektor

11. A fény

gyorsuló töltés ill. rezgő dipólus sugárzása, elektromágneses síkhullám, a fény polarizációja, fénysebesség, a fény terjedése anyagi közegben, törésmutató; a speciális relativitáselmélet alapjai; Fourier-felbontás, frekvencia, hullámszám, hullámcsomag, az elektromágneses hullámok spektruma; szinkrotron-sugárzás; Cserenkov-sugárzás; Huygens-elv, interferencia, elhajlás, törés, visszaverődés

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

A fizika alapjai, Szerk. Erostyák János és Litz József, Tankönyvkiadó, Budapest
Fizika II, Szerk. Litz József, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest 2005

Mai fizika, R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands, Műszaki Könyvkiadó, Bp.1970

Tantárgy neve: Kémiai matematika

Kredit: 4+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Surján Péter, Fizikai Kémiai

Előtanulmányi feltételek: kémiai BSc törzsanyaga matematikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A mátrixszámítás kémiai alkalmazásai

Vektorok, mátrixok, tenzorok. Dipólusmomentum, polarizálhatóság. Sajátértékfeladatok a kémiában.

A vektoranalízis kémiai és fizikai alkalmazásai

Parciális deriválás. Termodinamikai alkalmazások: Fundamentális függvények közti összefüggések, Maxwell-relációk. Gradiens, divergencia, rotáció. Áramlási terek, örvények, forrás. Laplace operátor. Ponttöltés potenciáltere. Többváltozós függvények szélsőértéke, mellékfeltételek. Molekulák geometriájának optimalása. Variációs elvek a kémiában.

Többváltozós integrálok alkalmazásai

Térfogai, vonal- és ívhosszintegrálok, munkavégzés kiszámítása. Kontinuitási egyenlet. Ferde- és görbevonaltú koordinátarendszerek, polárkoordináták. Átfedési mátrix, átfedési integrálok.

Differenciálegyenletek

Közönséges és parciális differenciálegyenletek. Kémiai reakciók, radioaktív bomlás. A harmonikus oszcillátor klasszikus és kvantumos leírása. Hidrogén atom, harmonikus gömbfüggvények.

Függvénysorok

Fourier-sor, Fourier-transzformáció. Konvolúció. Laplace transzformáció. Ortogonális polinomok.

A szimmetria matematikája: a csoportelmélet alkalmazásai a kémiában

Szimmetria operátorok, pontcsoportok. Molekulák szimmetriatulajdonságai. Mátrixreprezentációk, karaktertáblák. Rezgési módusok meghatározása. Rejtett szimmetriák, hidrogén atom, kiválasztási szabályok. Molekulák dipólusmomentuma. Szimmetria adaptált bázisfüggvények

A heti 2 órás gyakorlaton a hallgatók feladatmegoldásokat végeznek a fenti témák megértését elősegítő példákon.

Kötelező irodalom*: az előadáson kiosztott segédanyag

Ajánlott irodalom: Matematikai kézikönyvek (Bronstein, Korn)

Tantárgy neve: Kiegészítő fejezetek a fizikából I. (klasszikus mechanika – kvantummechanika)

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kürti Jenő, Biológiai Fizika Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc: Fizika(1), Fizika(2)

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A kvantummechanikához vezető legfontosabb kísérletek
Lagrange- és Hamilton-formalizmus a klasszikus- és kvantummechanikában
Bohr-Sommerfeld féle kvantálás a fázistérben
de Broglie féle anyaghullámok
Hullámmechanika (Schrödinger) – mátrixmechanika (Heisenberg)
Poisson-zárójel - kommutátor
Felcserélési relációk, határozatlansági relációk
Szimmetriák és fizikai mennyiségek
Kétréses interferencia („a legszebb valaha elvégzett fizikai kísérlet”)
Harmonikus oszcillátor a kvantummechanikában
Impulzusmomentum a kvantummechanikában

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

- Erostyák János, Kürti Jenő, Raics Péter, Sükösd Csaba: Fizika III, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2006 (VI. rész: Atomhéjfizika)
- R.P. Feynman: Mai fizika 3. kötet (26., 37. és 38. fejezetek), 6. kötet (71. fejezet), Műszaki Könyvkiadó, 1969
- Marx György: Kvantummechanika, Műszaki Könyvkiadó, 1971
-

Tantárgy neve: Kiegészítő fejezetek a fizikából II. (relativitáselmélet)

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Kürti Jenő, Biológiai Fizika Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc: Fizika(1), Fizika(2), MSc: Kiegészítő fejezetek a fizikából I.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Klasszikus elektrodinamika

A relativitáselmélet előzményei

A téridő koordinátafüggetlen és koordinátafüggő leírása

Relativisztikus kinematika – a Lorentz-transzformáció

Relativisztikus dinamika – az anyagvektor

Négyesvektorok, négyestenzorok

Relativisztikus elektrodinamika

Dirac-egyenlet – a spin

Az általános relativitáselmélet alapjai

Kötelező irodalom*:

Az előadás jegyzetelt anyaga, kiadható/internetes vázlat

Ajánlott irodalom:

– Erostyák János, Kürti Jenő, Raics Péter, Sükösd Csaba: Fizika III, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2006 (V. rész: Relativitáselmélet)

– R.P. Feynman: Mai fizika 2. kötet (15-17. fejezetek), 3. kötet (34. fejezet), 5. és 6. kötet, Műszaki Könyvkiadó, 1969

– E.F.Taylor - J.A.Wheeler: Téridő-fizika, Gondolat Kiadó, 1974

–

Tantárgy neve: A modern biológia alapjai

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Gáspári Zoltán

A tantárgyfelelős tanszéke: Szerves Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: -

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tantárgy keretében a hallgatók megismerkednek a modern biológia szemléletével, aktuális problémáival és áttekintést kapnak néhány alapvető módszerről, az élet molekuláris alapjairól. Ezen túl a hallgatók megismerkednek a legalapvetőbb biológiai adatbázisok használatával.

Kötelező irodalom:

A tantárgy anyagából készült internetes segédanyag.

Ajánlott irodalom:

Bálint Miklós: Molekuláris biológia I-II-III.,

Berg-Tymocko-Stryer: Biochemistry, 5th edition

Ernst Mayr: Mi az evolúció?

Tantárgy neve: Scripting

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Magyarfalvi Gábor / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek:

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Bevezetés: a nagyon magas szintű (script) programozási nyelvek jellemzői, előnyei és alkalmazhatósága tudományos feladatokra.

A kurzus kezdőknek, és nem elsősorban programozóknak szól. A célja, hogy mindenféle adat rugalmas és gyors feldolgozására, más programok vezérlésére, a számítógépekkel való kölcsönhatás automatizálására adjon könnyen használható, gyakorlatias segítséget. Az oktatás javarészt kémiához kapcsolódó példákon mutatja be az anyagot.

A kurzus ismerteti két programozási nyelv a Perl és Python alapjait, bemutat gyakran ismétlődő feladatokat, programozási fogásokat. Tárgyalja a szövegfeldolgozás és a numerikus számítások könyvtárait, módszereit. Ismerteti a grafikus felhasználói felületek programozását, a más programokkal, programozási nyelvekkel (C, Fortran) való együttműködés lehetőségeit.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom:

H. P. Langtangen: *Scripting for Computational Science*, Springer, 2004

M. Pilgrim: *Dive into Python*, Apress, 2004

D. M. Beazley: *Python Essential Reference*, New Riders, 2001

L. Wall, T. Christiansen, R. L. Schwartz: *Programming Perl*, O'Reilly , 1996

Tantárgy neve: Sejtbiológia

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Réz Gábor, ELTE Anatómiai, Sejt- és Fejlődésbiológiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémiai alapismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása: A prokaryota és eukaryota (növényi, állati) sejtek összehasonlítása, sejtmag, kromoszómák, gének, génexpresszió, a sejt membránrendszerei, fehérje-szintézis és degradáció, növényi sejtek vakuolumai, vezikuláris transzport, receptorok, sejtvezetési és mozgásjelenségek, szemiautonóm organellek, sejtadhézió, extracelluláris mátrix, növényi sejtfa, sejtciklus, sejtosztódás, differenciálódás, sejtpusztulás

Kötelező irodalom*:

Kovács János: Sejtbiológia, Eötvös Kiadó 1999

Ajánlott irodalom:

Szabó Gábor (szerk.): Sejtbiológia, Medicina, 2004

Cooper G. F. The Cell. Sinauer Associates, 2000

Alberts B and oth. Molecular Biology of the Cell. Garland Sciences, 2002

Lodish H and oth. Molecular Cell Biology. Freeman&Co 2000

Tantárgy neve: UNIX haladóknak

Kredit: 0+2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Farkas Ödön egyetemi docens, Szerves Kémia Tanszék

oktatók: Farkas Ödön és Jákli Imre

Előtanulmányi feltételek: informatikai alapismeretek, UNIX operációs rendszer alapvető parancsainak felhasználói szintű ismerete

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A UNIX operációs rendszer eszközeinek hatékony felhasználása kémiai problémák megoldásának támogatására: UNIX-os parancsértelmezők, grafikus környezetek, munkakörnyezetünk testreszabása, beállítása speciális alkalmazásaink futtatásához, héj (shell) programozás, reguláris kifejezések, AWK programnyelv. Programok fordítása, telepítése UNIX környezetben.

Kötelező irodalom:

Órai jegyzet

Ajánlott irodalom:

Ketler Iván, Szeberényi Imre, Szigeti Szabolcs: UNIX – A rendszer használata (Panem)

Tantárgy neve: Valószínűség-számítás vegyésztávlatból

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Nagy Sándor egyetemi docens

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei, ill. – alternatív módon – bármely természettudományi vagy műszaki BSc program alapmatematikája

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Eloszlások jellemzése és jellemzőik becslése, eloszlások közti „összefüggőség” jellemzése, változók összege és szorzata, konvolúció–dekonvolúció, véletlen tagszámú összegek, centrális határeloszlás-tétel, hibaterjedés, nevezetes eloszlások (Bernoulli, binomiális, Poisson, exponenciális, gamma, normális, χ^2 , Cauchy), felújítási folyamatok (Poisson folyamat), súlyozott legkisebb négyzetek módszere mint maximum likelihood módszer (példa: nukleáris spektrumok illesztése).

Kötelező irodalom:

Nagy Sándor: Nukleáris mérések statisztikája (Valószínűség-számítási összefoglaló alkalmazásokkal). Letölthető a <http://www.chem.elte.hu/Sandor.Nagy/okt/nms/index.html> webhelyről egyéb témába vágó dokumentumokkal együtt. (Elektronikus jegyzet.)

Ajánlott irodalom:

Vetier András: Szemléletes mérték- és valószínűségelmélet, Tankönyvkiadó Vállalat, Budapest, 1991

Reimann József: Valószínűségelmélet és matematikai statisztika mérnököknek, Tankönyvkiadó, Budapest, 1992

Angol nyelvű irodalom:

Sándor Nagy: Statistical Aspects of Nuclear Measurements. In A. Vértes, S. Nagy, Z. Klencsár: Handbook of Nuclear Chemistry, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003 (Vol. 1, Chapter 7, pp. 325-390.) (A tárgyfelvevők – igény szerint – kölcsön kaphatják a tantárgyfelelőستől a fejezet különlenyomatát szókincsgazdagítás céljából.)

Tantárgy neve: Kvantummechanika: elméleti problémák, problémás elméletek

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Süvegh Károly

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a kvantummechanika BSc. szintű ismerete

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

a kvantummechanika axiomái, az axiomák következményei, valóságértelmezések, az EPR-paradoxon, kvantumteleportáció, kvantumkriptográfia, rejtett paraméteres elméletek, Bell-teoréma, Bohm kvantumpotenciálja, méréselmélet, energia-idő "bizonytalanság", természetes vonalszélesség, a klasszikus spin, a Dirac-egyenlet, a relativisztikus spin

Ajánlott irodalom:

Kapuy, Török: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, *Akadémiai Kiadó*, Budapest, 1975

Nagy Károly: Kvantummechanika, *Tankönyvkiadó*, Budapest, 1978

Wheeler, Zurek: Quantum Theory and Measurement, *Princeton University Press*, Princeton, 1983

L. Ballentine: Quantummechanics, *Prentice Hall*, Englewood Cliff, 1990

D. Bohm: Quantum Theory, *Dover Publications*, 1989

Tantárgy neve: Számítástechnika

Kredit: 1

Tantárgyfelelős: Kuzmann Ernő

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: A tárgy a középiskolai általános matematika és fizika tananyag tudásán kívül más előismeretet nem feltételez

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A számítástechnika fejlődése napjainkig. Számítógép-generációk. Számítástechnikai alapfogalmak. A digitális számítás matematikai alapjai. Boole algebra alaptételei. Logikai függvények és Karnaugh táblák. Logikai alapkapcsolások diódákkal ill. tranzisztorokkal. AND, OR, NOT, NAND kapcsolások. Multivibrátorok és számlálók. Személyi számítógépek működésének logikai struktúrája. Gépi kód, regiszterek és utasítások. A DOS és WIDOWS operációs rendszerek felépítése és működése. A Fortran programozási nyelv alapjai. A Pascal programozási nyelv alapjai.

Kötelező irodalom:

Egységes tankönyv vagy jegyzet nincs.

Ajánlott irodalom:

Löcs Gyula és Vigassy József, Fortran programozási nyelv, Műszaki Könyvkiadó, Bp. 1985
Gordon Erzsébet, Körtvélyesi Gézáné, Sós István, Székely Zoltán, PASCAL programozási nyelv, SZÁMALK, Bp. 1982.

Tantárgy neve: Számítástechnika gyakorlat

Kredit: 1

Tantárgyfelelős: Kuzmann Ernő

A tantárgyfelelős tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: A tárgy a középiskolai általános matematika és fizika tananyag tudásán kívül más előismeretet nem feltételez. Közvetlenül kapcsolódik az előadáshoz.

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Gépi kód és utasítások. A DOS és WIDOWS operációs rendszerek használata. Programok készítése Fortran nyelven. Programok készítése Pascal nyelven.

Kötelező irodalom:

Egységes tankönyv vagy jegyzet nincs.

Ajánlott irodalom:

Löcs Gyula és Vigassy József, Fortran programozási nyelv, Műszaki Könyvkiadó, Bp. 1985
Gordon Erzsébet, Körtvélyesi Gézáné, Sós István, Székely Zoltán, PASCAL programozási nyelv, SZÁMALK, Bp. 1982.

Tantárgy neve: Kémiai adatfeldolgozás Java nyelven

Kredit: 2

tantárgyfelelős neve/tanszéke: Rohonczy János / Szervetlen Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: a vegyész MSc. belépési követelményei

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

A tárgy célja egy kiválóan hordozható, korszerű, objektumorientált programozási nyelv elemeinek és objektumosztályainak megismertetése, valamint alkalmazási lehetőségeinek bemutatása kémiai feladatok megoldásában. Így többek között NMR kísérletek grafikus modellezése web felületen (java.awt és javax eszközökkel), Monte Carlo folyamatszimulációs feladatok megoldása multiprocesszoros környezetben (szerializáció és RMI). Kézi műszerek jeleinek kiolvasása és adatainak továbbítása számítógépes hálózatban Java programmal.

Kötelező irodalom*:

<http://vegyszer/szervetlen/rj-java/java.pdf>

Ajánlott irodalom:

Nyékiné G. Judit szerk.: Java 1.3 útikalauz programozóknak, ELTE TTK Hallgatói Alapítvány, Budapest, 2001.

D. Flanagan: Java in a Nutshell, 5th Edition O'Reilly & Associates Inc., 2005.

Csizmazia Balázs: Hálózati alkalmazások készítése, Kalibán Kiadó, Budapest, 1999.

Tantárgy neve: Kemometria

Kredit: 2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Tóth Gergely, Fizikai Kémiai

Előtanulmányi feltételek: kémiai BSc matematikai törzsanyag

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Kemometria = sokváltozós matematikai statisztikai módszerek alkalmazása. Ezen belül (a) feltáró statisztikai eljárások (adatok fajtái: kategorikusak és metrikusak, skálázásuk, grafikus kezelésük, nem felügyelt és felügyelt alakfelismerés, azaz klaszter-analízis és osztályozások, feladatok dimenziójának csökkentése azaz főkomponens analízis; (b) paraméterbecslő eljárások, legkisebb négyzetek több változóra, lineáris és nem lineáris esetre, a regresszió diagnosztikája, problematikus regresszió megoldása: ridge-, főkomponens- és parciális legkisebb négyzetes regresszió. Soft modellek.

Kötelező irodalom*:

Ajánlott irodalom: Prékopa András : Valószínűség-elmélet, F. Reza: Bevezetés az információ elméletbe, Horvai (ed): Sokváltozós adatelemzés (kemometria), Frank és Todeschini: Data Analysis Handbook.

Tantárgy neve: Kvantummechanika

Kredit: 2+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Surján Péter Fizikai Kémia

Előtanulmányi feltételek: Kémiai Matematika

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Fizikai mennyiségek ábrázolása hermitikus operátorokkal. A fizikai állapot leírása hullámfüggvényekkel. Valószínűségi interpretáció. Schrödinger egyenlet. Perturbációszámítás. Atomok elektronszerkezete. Szórás számítás. Az elektronspin. Pauli elv. A kémiai kötés kialakulása a kvantummechanikában, egyszerű molekulák. A Hartree-Fock modell.

A heti 2 órás gyakorlaton a hallgatók konkrét feladatokat oldanak meg az előadásanyaghoz kapcsolódó témákban, hogy az elméleti tudás alkalmazását is megtanulják.

Kötelező irodalom*: Marx György: Kvantummechanika

Ajánlott irodalom:

Landau - Lifsic: Kvantummechanika (Elméleti fizika III.)

Tantárgy neve: Numerikus módszerek a kémiában gyakorlat

Kredit: 0+2

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Tóth Gergely, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga matematikából, párhuzamosan a hasonló nevű előadás

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Programozás C vagy Fortran nyelven az alábbi témákban:

Lineáris egyenletrendszer megoldása: megoldhatóság, Sorba rendezés, véletlen számok generálása, Nemlineáris egyenlet gyökei, polinomok gyökei, nemlineáris egyenletrendszer gyökei, szélsőérték meghatározása, Numerikus differenciálás, Numerikus integrálás, Sajátérték-feladat numerikus megoldása, Paraméterbecslés, Differenciálegyenletek numerikus megoldása, Fourier-transzformáció, Globális szélsőérték keresése, Mesterséges ideghálózatok, Faktor- és főkomponens-elemzés

Kötelező irodalom*

(1) Császár Attila: Előadási fóliák (fénymásolat, ELTE TTK KTCS könyvtár).

Ajánlott irodalom:

(1) C. Lanczos: Numerical Analysis, Dover: New York, 1976.

Valkó P. és Vajda S.: Műszaki–tudományos feladatok megoldása személyi számítógéppel, Műszaki, 1987.

Horvai (ed): Sokváltozós adatelemzés (kemometria),

Tantárgy neve: Numerikus módszerek a kémiában előadás

Kredit: 2+0

Tantárgyfelelős neve/tanszéke: Császár Attila, Fizikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: Kémia BSc törzsanyaga matematikából

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

Lineáris egyenletrendszer megoldása: megoldhatóság, Sorba rendezés, véletlen számok generálása, Nemlineáris egyenlet gyökei, polinomok gyökei, nemlineáris egyenletrendszer gyökei, szélsőérték meghatározása, Numerikus differenciálás, Numerikus integrálás, Sajátérték-feladat numerikus megoldása, Paraméterbecslés, Differenciálegyenletek numerikus megoldása, Fourier-transzformáció, Globális szélsőérték keresése, Mesterséges ideghálózatok, Faktor- és főkomponens-elemzés

Kötelező irodalom*

(1) Császár Attila: Előadási fóliák (fénymásolat, ELTE TTK KTCS könyvtár).

Ajánlott irodalom:

(1) C. Lanczos: Numerical Analysis, Dover: New York, 1976.

Valkó P. és Vajda S.: Műszaki–tudományos feladatok megoldása személyi számítógéppel, Műszaki, 1987.

Horvai (ed): Sokváltozós adatelemzés (kemometria),

Tantárgy neve: A nukleáris tudományok alapjai

Kredit: 2

Tantárgyfelelős: Süvegh Károly

A tantárgyfelelős neve/tanszéke: Analitikai Kémiai Tanszék

Előtanulmányi feltételek: kémia BSc.-szintű matematikai és fizikai alapismeretek

Az elsajátítandó ismeretanyag rövid (néhány soros) leírása:

az atommag mérete, tömeg- és töltéseloszlása, a mag spinje és mágneses momentuma, az atommag alkotórészei, magerők, stabil magok, magreakciók, a radioaktív bomlás típusai, kinetikája, radioaktív kormeghatározás, sugár anyag kölcsönhatás, detektorok, atomerőművek

Ajánlott irodalom:

Kiss István, Vértes Attila: Magkémia I., *Tankönyvkiadó*, Budapest, 1975

Muhin K.N.: Kísérleti magfizika, *Tankönyvkiadó*, Budapest, 1985

Kiss D., Horváth Á., Kiss Á.: Kísérleti atomfizika, *ELTE Eötvös Kiadó*, Budapest, 1998

Muhin, K.N.: Magfizika mindenkinek, *Műszaki Könyvkiadó*, Budapest