



Tantárgy kód

BMETE12MF51

Tantárgy azonosító adatok

1.	A tárgy címe	Atomi szintű számítógépes szimuláció szilárdtestekben							
2.	A tárgy angol címe	Computational Simulation at Atomic Scale in Solids							
3.	Heti óraszámok (ea + gy + lab) és a félévvégi követelmény típusa	1	+	0	+	1	f	Kredit	3
4.	Ajánlott/kötelező előtanulmányi rend								
	vagy	Tantárgy kód 1	Rövid cím 1	Tantárgy kód 2	Rövid cím 2	Tantárgy kód 3	Rövid cím 3		
	4.1								
	4.2								
	4.3								
5.	Kizáró tantárgyak								
	BMETE12MF44								
6.	A tantárgy felelős tanszéke	Atomfizika Tanszék							
7.	A tantárgy felelős oktatója	Dr. Gali Ádám	beosztása	egyetemi docens					

Akkreditációs adatok

8.	Akkreditációra benyújtás időpontja	2016.03.21.	Akkreditációs bizottsági döntés időpontja	2016.07.06
----	------------------------------------	--------------------	---	-------------------

Megjegyzések

Csak az űrlap fehéren hagyott mezőibe írjunk és a mezők között a **tabulátor** billentyűvel haladjunk! Ha egy kitöltött mezőből tabulátor billentyűvel lépünk ki, több más mező értéke automatikusan megváltozhat. Egy adott mezőre lépve, az állapotsorban megjelenő rövid, ill. az F1 gomb megnyomásakor kapható hosszabb leírás ad segítséget a kitöltéshez. A *tantárgy kódot* és a *tárgy rövid címét* a dékáni hivatal adja.

1-2. sorok: A *tárgy címének* (max. 85 karakter) célszerű legalább egy karakterben különböznie minden más, Neptunban regisztrált tárgy címétől.

3. sor: A *követelmény* előadás+gyakorlat+labor formátumú, az *utolsó mező* a félév végi számonkérés típusa (v,f,a vagy s, részletes információ F1). A *kredit* megadásánál ügyelni kell arra, hogy az alább részletezett, a *tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka* mennyiségével összhangban legyen (összes óraszám = kredit*30 óra).

4. sor: Legfeljebb 3, már korábban hallgatott tárgy adható meg a 4.1 sorban. A 4.2 és 4.3 sorok *vagylagos* lehetőségek megadására szolgálnak, például abban az esetben, ha az egyik tárgynak korábban oktatott változatai is megfelelőek. **5. sor:** A *kizáró tantárgyaknál* azokat a tárgyakat kell felsorolni, amelyek tematikái a most akkreditálandó tárggyal 75% vagy annál nagyobb átfedést mutatnak.

6-7. sorok: A felelős tanszék és oktató hatáskörét, ill. kijelölésének feltételeit a *Képzési Kódex 2010* c. dokumentum 4.§-a tartalmazza.

Tematika			
9.	A tantárgy az alábbi témakörök ismeretére épít Szilárdtestfizika és kvantummechanika alapjainak ismerete.		
10.	A tantárgy szerepe a képzés céljának megvalósításában (szak, kötelező, kötelezően választható, szabadon választható) TTK Fizikus MSc képzés Nanotechnológia-anyagtudomány specializáció kötelezően választható tárgya		
11.	A tantárgy részletes tematikája 1. Bevezetés a lehetséges alkalmazásokba, Unix alapjai 2. Molekulák és tökéletes kristályok geometriája 3. A szilárdtest különböző modelljei 4. Az atommagok és az elektronok szétválasztása: Born-Oppenheimer közelítés, pseudopotenciálok, projektorok 5. Tipikus bázisfüggvények és tulajdonságaik: síkhullámok, lokalizált bázistípusok 6. Hartree-Fock elmélet, azon alapuló módszerek 7. Félempirikus számítási módszerek 8. Sűrűségfunkcionál-elmélet: Hohenberg-Kohn, Kohn-Sham tételek, az elmélet (fél)lokális közelítései 9. A DFT-n alapuló szoros-kötés számítási módszer 10. Hibridfunkcionálok 11. Időfüggő sűrűségfunkcionál-elmélet, sokrészecske perturbációs módszerek: bevezetés A felsorolt fejezetekhez hetenként egy óra előadás illetve egy óra labor tartozik, kivéve a 7., 9. és 11. fejezetet, ahol csak módszerleírást adunk. A 11. fejezet tematikája fakultatív, amely a kvantummechanika másodkvantált formalizmus ismeretét illetve kvázi-részecske fogalmának ismeretét előfeltételezi.		
12.	Követelmények, az osztályzat (aláírás) kialakításának módja		
	szorgalmi időszakban	A laboron mutatott teljesítmény, illetve a házi feladat elvégzésének minősége illetve szóbeli beszámoló alapján alakul ki az osztályzat.	vizsga-időszakban
13.	Pótlási lehetőségek Pótlási héten		
14.	Konzultációs lehetőségek Oktatóval történő megegyezés szerint		
15.	Jegyzet, tankönyv, felhasználható irodalom Gali Ádám: Atomi szintű számítógépes szimuláció szilárdtestekben: elmélet és gyakorlat I.		

16.	A tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka mennyisége órákban (a teljes szemeszterre számítva)		
	16.1	Kontakt óra	28
	16.2	Félévközi felkészülés órákra	28
	16.3	Felkészülés zárthelyire	0
	16.4	Zárthelyik megírása	0
	16.5	Házi feladat elkészítése	34
	16.6	Kijelölt írásos tananyag elsajátítása (beszámoló)	0
	16.7	Egyéb elfoglaltság	0
	16.8	Vizsgafelkészülés	0
	16.9	Összesen	90
17.	Ellenőrző adat		Kredit * 30 90

A tantárgy tematikáját kidolgozta			
18.	Név	beosztás	Munkahely (tanszék, kutatóintézet stb.)
	Dr. Gali Ádám	egyetemi docens	Atomfizika Tanszék

A tanszékvezető		
19.	Neve	aláírása
	Dr. Koppa Pál	

Megjegyzések
16.1 sor: Értéke automatikusan kitöltődik az űrlap elektronikus változatában, a „Követelmény” címszónál megadott óraszám értékek alapján, az (előadás+gyakorlat+labor) * (14 oktatási hét) formula szerint. **16.4 sor:** Értéke 0, ha a zárthelyik íratása kontakt órákon történik, egyébként pedig a minimálisan szükséges számú zárthelyi megírásához felhasználandó idő (a pót zárthelyik nélkül). **16.7 sor:** Az „Egyéb elfoglaltság” szöveg helyére a tevékenység konkrét megnevezését kell írni.
17. sor: Az itt szereplő értéknek és a **16.9 sorban** automatikusan megjelenő tanulmányi óraszám összegnek hozzávetőlegesen meg kell egyeznie! Tájékoztatásul azt vegyük figyelembe, hogy a hallgatók által egy szemeszterben átlagosan 30 kreditnyi munkamennyiséget kell teljesíteni, azaz a szorgalmi és vizsgaidőszak során elvárt terhelés összesen kb. 900 munkaóra.