



Tantárgy kód

BMETE15MF15

Tantárgy azonosító adatok

1.	A tárgy címe	A sűrűség funkcionál elmélet alapjai									
2.	A tárgy angol címe	Foundations of Density Functional Theory									
3.	A tárgy rövid címe	ASűrűségFunkcionál	Követelmény	2	+	0	+	0	v	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										
6.	A tantárgy felelős tanszéke	Elméleti Fizika Tanszék									
7.	A tantárgy felelős oktatója	Dr. Pipek János			beosztása	egyetemi docens					

Akkreditációs adatok

8.	Akkreditációra benyújtás időpontja	2008.09.22.	Akkreditációs bizottsági döntés időpontja	2008.12.16.
----	------------------------------------	--------------------	---	-------------

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* a dékáni hivatal adja.

1-2. sorok: A *tárgy címének* (max. 60 karakter) legalább egy karakterben különböznie kell minden más, Neptunban regisztrált tárgy címétől.

3. sor: A *rövid cím* jellegzetes, legfeljebb 16 karakter hosszúságú rövidítés. A *követelmény* előadás+gyakorlat+labor formátumú, az *utolsó mező* a félév végi számonkérés típusa (v,f,a vagy s, részletes információ az F1 gombra). 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 2001* c. dokumentum 9.1 fejezete tartalmazza.

Tematika			
7.	A tantárgy az alábbi témakörök ismeretére épít Kvantummechanika, funkcionálanalízis		
8.	A tantárgy célkitűzése, feladata a szakképzés céljának megvalósításában A tárgy az oklevélben nem nevesített szakirány kötelezően választható tantárgya		
9.	A tantárgy részletes tematikája Sok-részecskés Fock-tér és sűrűségoperátor. Redukált sűrűségoperátorok. A kölcsönható elektron rendszerek egzakt egyenletei és a független részecske közelítés sűrűségoperátor képbén. N-előállíthatóság. A Fermi-lyuk és a lokalizált pályák. Az elektron sűrűség. Kato tétele és a cusp (csúcs) feltételek. Az elektron sűrűség és N előállíthatósága. Hohenberg és Kohn tételei. Az univerzális sűrűség funkcionál létezése. A Levy-féle korlátozott keresés módszere. Skálatulajdonságok. Kohn és Sham egyenletei. Tört betöltési számok. A kémiai potenciál és az elektronnegativitás. Közelítő módszerek. Gradiens sorfejtés. Modern funkcionálok.		
10.	Követelmények, az osztályzat (aláírás) kialakításának módja		
	szorgalmi időszakban	nincs	vizsgaidőszakban szóbeli vizsga
11.	Pótlási lehetőségek Az érvényes TVSz szerint.		
12.	Konzultációs lehetőségek Az oktatóval történő megállapodás szerint.		
13.	Jegyzet, tankönyv, felhasználható irodalom		
	Nagy Ágnes: Molekulák elektronsűrűség elméletie (KLTE Elméleti Fizika Tanszék, Debrecen, 1994)		
	R.M. Dreizler, E.K.U. Gross: Density Functional Theory (Springer, Berlin, 1990)		
	R.G. Parr, W. Yang: Density-functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford, New York, 1989)		

14.	A tantárgy elvégzéséhez átlagosan szükséges tanulmányi munka mennyisége órákban (a teljes szemeszterre számítva)		
	14.1	Kontakt óra	28
	14.2	Félévközi felkészülés órákra	28
	14.3	Felkészülés zárthelyire	0
	14.4	Zárthelyik megírása	0
	14.5	Házi feladat elkészítése	0
	14.6	Kijelölt írásos tananyag elsajátítása (beszámoló)	0
	14.7	Egyéb elfoglaltság	0
	14.8	Vizsgafelkészülés	34
	14.9	Összesen	90
15.	Ellenőrző adat		Kredit * 30 90

A tantárgy tematikáját kidolgozta			
16.	Név	beosztás	Munkahely (tanszék, kutatóintézet stb.)
	Dr. Pipek János	egyetemi docens	Elméleti Fizika Tanszék

A tanszékvezető		
17.	Neve	aláírása
	Dr. Szunyogh László	

Megjegyzések

14.1 sor: Értéke automatikusan kitöltődik az űrlap elektronikus változatában, a „Követelmény” címszónál megadott óraszám értékek alapján, az (előadás+gyakorlat+labor) * (14 oktatási hét) formula szerint. **14.4 sor:** Értéke 0, ha a zárthelyik íratása kontakt órákon történik, egyébként pedig a minimálisan szükséges számú zárthelyi megírásához felhasználandó idő (a pót zárthelyik nélkül). **14.7 sor:** Az „Egyéb elfoglaltság” szöveg helyére a tevékenység konkrét megnevezését kell írni.

15. sor: Az itt szereplő értéknek és a **14.9 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.