

Az Elméleti Szerves kémia alapjai (kv1n1es7/1)

Előzetes tematika

- 1a Atom-atom és molekula-molekula közti kölcsönhatások
- 1b Egyensúlyok termodinamikája és reakciók kinetikája
- 2a Molekuláris geometria és kémiai reaktivitás
- 2b Reakció mechanizmusok
- 3a Elméleti szerves kémiai háttér
- 3b Kvantum kémiai alapok
- 4a A Hartree-Fock módszer
- 4b Post-Hartree Fock módszerek
- 5a Számítógépes kémia alapjai
- 5b Molekuláris geometriák optimálása
- 6 Termodinamikai függvények számolása
Teljes potenciál energia felületek és kritikus pontjainak meghatározása
- 7 Elemi reakciótípusok számolása: pl. SN, SE, AN, AE, E1, E2, stb.