

TÉMAVÁZLAT II.

Kémiai Számítástechnika Gyakorlat, Kémia BSc I. évf. 2016/2017 I. félév

II. RÉSZ (6-7. FOGLALKOZÁS + BEADANDÓ FELADAT)

TUDOMÁNYOS KOMMUNIKÁCIÓ - ALAPISMERETEK

Szakmai önéletrajz

Többnyire tételes stílus, minták: Word, Europass Curriculum Vitae ...

Személyes adatok, Munkahelyek-Alkalmazások, Tanulmányok-Iskolák-Képzettségek, Nyelvismeret, Kutatási tapasztalat-ösztöndíjak-tanulmányutak, Oktatási tapasztalatok, Egyéb szakmai munka - szervezetek, Kitüntetések-elismerések, egyedi érdekességek (+publikációs lista)

Szerkesztési finomságok

A szöveg a lényeg, nem a betű!

Times New Roman, Ariel, Courier (egyenletes)

Szerkesztési jelek ki és bekapcsolásával ellenőrizhető:

Lágy elválasztójel: ctrl/- (nem numerikus)	labda
Nem törhető szóköz: ctrl/shift/szóköz, alt(bal oldali)/0160	8 Ft
Nem törhető kötőjel: ctrl/shift/- (nem numerikus)	lehet-e
Gondolatjel: ctrl/- (numerikus), alt(bal oldali)/0150	–
Idézőjel: alt(bal oldali)/0132 és alt(bal oldali)/0148	„ ”
Fok: alt(bal oldali)/0176	°

További részletek az érdeklődőknek: www.chem.elte.hu/toth/kemsz_bsc/BetuIrasGeppel.doc

Egyenletek szerkesztése

Beszűrés/Objektum/Microsoft Equation

Fizikai mennyiség - változó: dőlt betű, Vektor: vastag betű, vagy aláhúzás, Mátrix: nagybetű, Index: többnyire normál betű, Állandók, matematikai jelek, mértékegységek: többnyire normál betű, Egyenletek számozása (ha hivatkozunk rá)

Hivatkozások

Kézzel, vagy lábjegyzet szerkesztésével (vannak kész programok is), sok formai lehetőség, az alábbiak csak példák (pl. cím bevétel szakdolgozatnál, doktori disszertációnál ajánlott):

A szövegben a hivatkozás számmal vagy zárójelben a szerzőkkel: *a korábbi számolások alapján*²³ [23] (Kovács 1924; Kovács és Nagy, 1923; Kovács et al. 1925a) (időben a legrégebbi először, szám szerint növekedve)

Az irodalom felsorolásánál:

[1] Hill, T. L. 1956 *Statistical Mechanics* (New York, McGraw-Hill)

²Metropolis, N.; Rosenbluth, A. W.; Rosenbluth, M. N.; Teller, A. N. and Teller, E. 1953 *J. Chem. Phys.* **21** 1087.

[3] Alder, B. J. and Wainwright, T. E. in *Proceedings of the International Symposium on statistical mechanical theory of transport processes Brussels 1956* (ed. Prigogine, I.) 1958 p. 97-131. (Wiley, New York)

[4] WEB of Science (<http://isiknowledge.com> accessed at August 2006)

Dolgozatok

Példa - rövidebbeknél más a szerkezet

Szakilaboratóriumban végzett szakirodalmi és/vagy kísérleti és/vagy elméleti munkán alapuló írásos anyag, amely a témavezető személyén keresztül tanszékhez kötődik.

Formai elvárások:

Teljes terjedelme: 25-50 oldal. - A4 méretű oldalak, másfeles sorközzel, 12 pontos betűmérettel, 2,5 cm-es alsó, felső és oldalsó margók. - 25 oldalnál kisebb terjedelmű szakdolgozat nem fogadható el, 50 oldal felett pontlevonás járhat. Ha a függelék a megértéshez fontos és hasznos részletes adatokat, kiegészítő eredményeket, ábrákat tartalmaz, annak oldalszáma nem korlátozott, azért pontlevonás nem jár. - A dolgozat szerkezete nem szigorúan kötött, de meg kell felelnie az adott szakterület dokumentációs elvárásainak. Javasolt formai felépítés: Címlap; Köszönetnyilvánítás; Tartalomjegyzék; Bevezetés; Irodalmi áttekintés; A munka előzményeinek áttekintése, Célkitűzések; Saját munka ismertetése; Eredmények, Eredmények értékelése és következtetések; Egy-egy oldalas magyar és angol nyelvű összefoglaló; Irodalomjegyzék; A dolgozat eredetiségére vonatkozó „Nyilatkozat” (letölthető a Tanulmányi Osztály honlapjáról). (A Nyilatkozatot minden esetben a szakdolgozat végére, az Irodalomjegyzék után köttessék be.) Címlap, összefoglalók formája kötött.

Ábrák - táblázatok

Pl. EXCEL-ből megfelelő formában, a grafikus megoldások kisebb méretűek (Szerkesztés/Irányított beillesztés), Ábra (alatta) és táblázatfeliratok (felette), számozásuk

Szakmai cikk szerkezete

Title / Author / Affiliation / Abstract / Introduction / Theory-Experiments-Calculation details / Results / Discussion / Conclusion / Acknowledgment / References / Tables / Figure captions / Figures

Internetes források

<http://www.eisz.hu>: Web of Science (keresések, hivatkozásra is), Science Direct

Könyvtári elérhetőségek: www.oszk.hu (nemzeti periodika adatbázis=NPA fül jobbra, felső keresőhely)

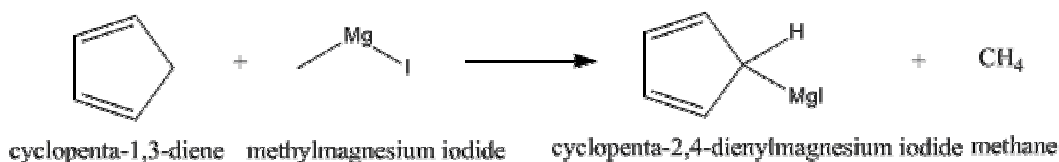
Előfizetett újságok: pl. www.aps.org, www.aip.org, www.acs.org

www.webelements.com

további forrásokra keresés

Kémiai képletek és ábrák készítése a Chem Office programcsomaggal (hallg-app2 gépen)

Chem Draw Ultra: egyszerű szerkezetek bevitele, módosítása, View menü pontjai, reakció ábrázolása, nyilak, töltések, név és szerkezet azonosítása, beépített tutorial. Példa elkészítése:



Chem 3D Ultra: térbeli szemléltetés, párhuzamosan 1D és 3D ablakban való munka, forgatás, megjelenítési módok, Calculation/MM2/Energia minimalizálás, név/SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) kód beírása (lineáris kód, zárójelben az elágazások, további kötési helyek számmal jelölve, = kettős ill, # hármas kötés, szögletes zárójelben további elemek, . nem kovalens kötés, kis c aromás szén) Példa:

C1=CC=CC1[Mg][I]

Keresés kémiai adatbázisban

Chem Finder Ultra

Adatbázis megnyitása Open : ISICCR (c:/Program Files/cambridgesoft/chemfinder/samples)

Enter Query: bevitel Chem Draw-ból, aztán Find

Chem Office: próba verzió letölthető www.cambridgesoft.com (illegális megoldások...)

Beadandó házi feladat

Pontosan kétoldalas dolgozat készítése rövid szakmai cikknek megfelelő formában (Times New Roman betűtípus, 11-es betűméret, 1,5-ös sorköz) egy tetszőleges vegyületről, pl. szerepelhetnek benne: tulajdonságai, felfedezése-története, fő reakciói, érdekességei. A dolgozat tartalmazzon reakcióegyenletet + ábrát + táblázatot és megfelelő formában hivatkozásokat (min. 1 szakmai cikk + min. 1 könyv + min. 1 internetes oldal). A dolgozatot nyomtatott formában kell a 8. foglalkozás elején a gyakorlatvezetőnek leadni. A dolgozat későbbi és más jellegű beadása nem lehetséges! Az értékelés főleg formai szempontok alapján történik.