

Szerves vegyületek *in silico* konformációs analízise és spektrumszámítása

A kurzus részletes tematikája:

- 1. hét:** Sztereokémiai alapfogalmak. Izoméria. Abszolút és relatív konfiguráció. Centrális, axiális, planáris kiralitás. Az abszolút és relatív konfiguráció meghatározására alkalmas módszerek. Kiroptikai spektroszkópia, fény és anyag kölcsönhatása, ECD, VCD.
- 2. hét:** Molekulamechanika, *ab initio* módszerek, DFT módszerek. A potenciális energia hiperfelület kitüntetett pontjai és ezek számítása. A CD számítás lépései. Konformációs analízis. Példák kisméretű, rigid származékok ECD számítására.
- 3. hét:** Flexibilis rendszerek konformációs analízise és ECD számítása, a flexibilitás csökkentése csonkolással, újraklaszterezéssel, szilárd módszerekkel és kémiai átalakítással.
- 4. hét:** Változó flexibilitású vegyületek OR és VCD számítása. Több kirotikai módszer kombinált alkalmazása az abszolút konfiguráció meghatározásához.
- 5. hét:** Változó flexibilitású vegyületek NMR számítása a relatív konfiguráció meghatározása céljából. NMR és kirotikai módszerek kombinált alkalmazása az abszolút konfiguráció meghatározásához.
- 6. hét:** Ismerkedés konformergenerálásra, molekuladinamikára alkalmas szoftverekkel. Egyszerű keresések és szimulációk végzése.
- 7. hét:** Ismerkedés szemiempirikus, DFT és *ab initio* számításokra alkalmas szoftverekkel. Optimálások végzése.
- 8. hét:** Ismerkedés a Linux rendszerrel. Alapvető Linux ismeretek, parancsok.
- 9. hét:** Linux parancsok kombinált alkalmazása és összefűzése.
- 10. hét:** Változók, ciklusok. Egyszerű szkriptek írása B shellben.
- 11. hét:** Egyszerű szkriptek írása B shellben input file generáláshoz és adatkinyeréshez.
- 12. hét:** Egy konkrét ECD számítás áttekintése lépésről lépésre. Input file-ok generálása az MM keresés eredményéből DFT optimáláshoz. A lefutott outok klaszterezése. ECD inputok generálása. Rotátorerősség és hullámhossz értékek kinyerése. Spektrumok generálása a kinyert adatokból.
- 13. hét:** Egy konkrét NMR számítás áttekintése lépésről lépésre. A lehetséges diasztereomerek felépítése. Input file-ok generálása az MM keresés eredményéből DFT optimáláshoz. A lefutott outok klaszterezése. NMR inputok generálása. Kémiai eltolódás és csatolás értékek kinyerése. Az adatok összevetése mért értékekkel.
- 14. hét:** A hallgatók által hozott sztereokémiai problémák megvitatása. Szerkezet-felderítési stratégiák megtervezése. Input file-ok generálása.