

Sztereokémiai szerkezetvizsgáló módszerek

A kurzus részletes tematikája:

- 1. hét:** Sztereokémiai szerkezetvizsgáló módszerek
- 2. hét:** Aszimmetria és kiralitás jelentősége.
- 3. hét:** Sztereokémiai alapfogalmak: izomerek.
- 4. hét:** Kiralitás típusai. Konformációs és konfigurációs enantiomerek és diasztereomerek.
- 5. hét:** Abszolút konfiguráció megadása: R/S és D/L jelölők használata, Cahn-Ingold-Prelog rendszer.
- 6. hét:** Több sztereogén elemet tartalmazó vegyületek. Axiális kiralitás
- 7. hét:** Optikai forgatás. Enantiomerek elválasztása.
- 8. hét:** Királis gyógyszerhatóanyagok.
- 9. hét:** Abszolút és relatív konfiguráció meghatározásának lehetőségei. Kémiai korreláció és kinetikus rezolválás.
- 10. hét:** NMR módszerek az abszolút konfiguráció meghatározására. Mosher módszer és módosításai.
- 11. hét:** Fény és anyag kölcsönhatása. Cirkuláris dikroizmus és cirkuláris kettőtörés. Kiroptikai módszerek.
- 12. hét:** Félempirikus ECD szabályok és exciton csatolt cirkuláris dikroizmus.
- 13. hét:** TDDFT-ECD számítások természetes vegyületek konfigurációjának meghatározására I.
- 14. hét:** TDDFT-ECD számítások természetes vegyületek konfigurációjának meghatározására II.