

Komplex vizsga főtárgy

Molekulamodellezés

Molekula szerkezeti alapfogalmak: konstitúció, konformáció, szupramolekuláris szerkezet, konformációs sokaság. Boltzman eloszlás, szerkezet és dinamika összefüggése. A szerkezet meghatározás kísérleti és elméleti módszerei. Izomerek, kiralitás, relatív és abszolút konfiguráció.

Kvantummechanika. Schrödinger-egyenlet, Hartree-Fock módszer (HF), báziskészlet, bázisfüggvények. Magasabb szintű poszt-HF módszerek. Sűrűségfunkcionál elmélet (DFT). A kvantummechanika előnyei és korlátai.

Molekulamechanika. Az erőter fogalma és tagjainak részletes leírása. Kötő és nem-kötő tagok, az egyes tagok funkció formáinak leírása, jellemző erőállandók bemutatása. Paraméterek és atom típusok definíciója. Topológia. A molekulamechanika előnyei és korlátai. Gyakran használt erőterek és jellemzőik.

Kvantummechanika és molekulamechanika előnyeinek és hátrányainak összehasonlítása.

A potenciális energia felület definíciója és jellemzői pontjai. A potenciális energia felület feltérképezésére alkalmazott szimulációs módszerek. A geometriaoptimalizálás és az energiaminimalizálás algoritmusai és alkalmazási stratégiái. A szisztematikus konformációs analízis elve, kivitelezése és alkalmazási területei. Véletlenszerű konformációs keresések. Monte Carlo keresések algoritmusai. A Metropolis feltétel. Molekula dinamika alapelvei, paraméterei és implementálásuk. Konformációs sokaságok és trajektóriák analízise.

Irodalom:

- Andrew R. Leach: Molecular Modelling: Principles and Applications, 2nd Edition, 2001
- Essentials of Computational Chemistry, Theories and Models
Christopher J. Cramer
- Introduction to Computational Chemistry Paperback
Frank Jensen