

Elméleti kémiai módszerek alkalmazása reakciók mechanizmusának felderítésében és szerkezetvizsgálatban

A közeg definiálása: gázfázis, oldószermodell, felületi kémia. A frekvencia-analízis alkalmazása a reakciókoordináta felderítésére. IRC számítások. A termokémiai paraméterekhez szükséges korrekciós tagok meghatározása. A báziskészlet definíciója, illetve annak hatása az energetikai paraméterekre. Gyenge kölcsönhatások megfelelő leírása. A legismertebb kvantumkémiai szoftverek ismertetése.

A konformáció és a konfiguráció hatása a molekulák spektrális sajátosságaira. A globális minimum probléma. Konformációs keresési algoritmusok és szoftverek. Molekuladinamika alkalmazása konformerek generálására, szoftverek. Klaszterezés jelentősége és típusai. NMR, UV, IR, ECD, VCD spektrumok szimulálása. Relatív és abszolút konfiguráció, ill. konformáció meghatározása számolt és mért spektrumok alapján. Spektrumok statisztikai összehasonlítása (pl. confidence level NMR-ben vagy VCD-ben).

1. A. R. Leach: *Molecular Modelling: Principles and Applications*, 2nd Edition, Pearson Education, Harlow, **2001**.
2. S. Superchi, P. Scafato, M. Gorecki and G. Pescitelli, *Curr. Med. Chem.*, **2018**, *25*, 287–320.
3. A. Mándi and T. Kurtán, *Nat. Prod. Rep.*, **2019**, *36*, 889–918.
4. L. Grauso, R. Teta, G. Esposito, M. Menna and A. Mangoni, *Nat. Prod. Rep.*, **2019**, *36*, 1005–1030.
5. M. W. Lodewyk, M. R. Siebert and D. J. Tantillo, *Chem. Rev.*, **2012**, *112*, 1839–1862.