

Molekulaszimulációs feladatok a kapott molekulára

A feladat egy olyan dokumentum (.doc, .docx, .odt vagy .pdf formátumban) összeállítása, amely tartalmazza az alábbiakat:

- molekula triviális neve, IUPAC nevezéktan szerinti neve, összegképlete
- képlete (Spartan-ban megrajzolva, amihez érdemes egyensúlyi geometriát számolni, hogy a kötésszögek rendben legyenek)
- pl. aminosavaknál, ahol az ionos/ikerionos forma fordul elő inkább a természetben, azt is rajzoljuk meg (egyensúlyi geometriával)
- H-híd kötések ábrázolása, ha jelentős tulajdonsága a molekulának (pl. víz, nukleinsavak esetén) esetleg több molekula kölcsönhatásakor alakul ki, ekkor érdemes a 2-3 molekulát megrajzolni, hogy láthatók legyenek ezek a másodlagos kötések
- HOMO, LUMO pályák ábrázolása (solid vagy mesh)
 - ezen pályák energiájának különbsége a táblázat segítségével meghatározható, ez színes molekuláknál a látható fény energiatartományába esik, amelyet kiszámolhatunk (és számoljuk is ki ($E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$) a Bohr-féle gerjesztési modell segítségével)
- a potenciálsűrűség alapján (density potential, solid/mesh) lehet-e és milyen fizikai-, kémiai tulajdonságokra következtetni a molekulánál (pl. poláris, apoláris, erős/gyenge sav, Lewis sav, Lewis bázis, stb.), alapvetően mi látszik a molekulán?
- IR spektrum + kísérleti IR spektrum ábrázolása
 - vibrációs módokkal, a legnagyobb intenzitású csúcsokhoz

karikázással érdemes jelölni a vonatkozó molekularészletet/csoportot/kötést

- dipólusmomentum ábrázolása
- a molekula egy alapreakciójának (pl. protonálódás) és annak energiadiagramjának ábrázolása (átmeneti komplexnél potenciálsűrűség ábra)
 - aki nem tudja milyen reakció legyen, kérdezzen!
- színes molekuláknál (pl. indigó, kurkumin) UV/Vis spektrum és értelmezése
- egyéb érdekes, látványos molekulapályát vagy potenciált szívesen látok (leírva, hogy mi az, nyilván...)

A dokumentumba beillesztve szép, látványos, nagy felbontású ábrákat kérek. (Spartan: File menü, save as..., *.jpg például)

Az ábráknál kérem, hogy egyensúlyi geometria számítás (Hartree-Fock vagy Semi-emp., vagy esetleg DFT módszerrel) legyen meg, mert a molekula alakja akkor közelíti meg legjobban az energiaminimumot, azaz a valóságoshoz közeli elrendezést.

A végleges dokumentumot e-mailen kérem az ivan.kristof@itk.ppke.hu -ra 2013. december 15 éjfélig.