

Számítástechnikai módszerek a komplexkémiában

tematika

Előadó: Dr. Jakusch Tamás (jakusch@chem.u-szeged.hu)

pH-metria – egyensúlyi számítások:

kalibrációs módszerek / ionerősség / pH vagy E mérése / oldószerkelet

egyszerű sav-bázis folyamatok és kiértékelésük excel-ben

Eloszlásgörbe készítés (Excel)

Koncentrációs határok és a hiba / pH tartományok és a hiba / sok ($n > 10$ / 20) pK-jú ligandum problematikája

Háromkomponensű rendszer eloszlásgörbéjének számítása (Excel)

Stabilitás állandó becslése adott összetételhez, a megjelenés valószínűségének pH-függése.

Eloszlásgörbe számítása sed / psequad stb. programmal, a komponens mátrix.

A komponens mátrix transzformációja. Predominanciagörbék és társaik.

Valós pH-metriás mérések kiértékelése, a típushibák bemutatása.

Minor részecskék problémája.

Saját illetve társaik mérésének kiértékelése, modellalkotás és a hiba minimalizálása.

Spektroszkópiák:

ESR / NMR (UV-VIS / CD)

Mátrix rang analízis.

ESR spektrum illesztése / NMR spektrum szimulálása (Excel)

A 2D-EPR program bemutatása

PSEQUAD / HYPERQUAD és a spektroszkópiák

Hiányos méréstartományú kísérlet kiértékelése. A hiba becslése, perturbáció és robosztusság. Kiugró adatok.

DFT számítások (hallgatói bemutató, esetleges)

Röntgenkristallográfiai számítások (hallgatói bemutató, esetleges).

A Mercury program bemutatása.