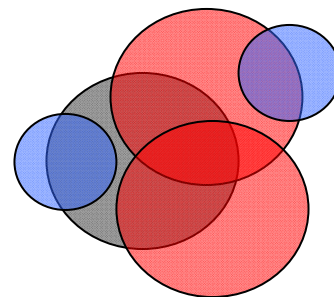


Molekuláris informatika



2 óra előadás (kv1n1in2)

+

2 óra számítógépes gyakorlat (kv1n1in3)

Kötelezően választható tantárgy kémia BSc. hallgatóknak

Tantárgyfelelős: Farkas Ödön

Tematika:

- A kémiai informatika célja és története
- Molekulák reprezentációja: SMILES, InChI, molekulafelületek, gráfok, kötésmátrixok, fileformátumok: MOL, SDF, PDB...
- Sztereokémia, 3D szerkezetek reprezentációja
- Reakciók leírása
- Adatelőkészítés, adatfeldolgozás, adatbázisok
- Potenciálisenergia-(hiper)felületek és a feltérképezésükre alkalmas módszerek
- Erőterek jellemzői, molekuladinamika
- Gyógyszerkutató és molekuláris informatika
- Ligandum-receptor kölcsönhatások modellezése: dokkolás és QSAR