

NAUCZANIE MODELOWANIA MOLEKULARNEGO W CHEMII ORGANICZNEJ Z WYKORZYSTANIEM PROGRAMÓW GAUSSIAN ORAZ HYPERCHEM

**Marek Doscokz, Jacek Doscokz, Szczepan Roszak, Piotr Wojciechowski,
Roman Gancarz**

*Zakład Chemii Medycznej i Mikrobiologii Wydziału Chemicznego Politechniki
Wrocławskiej, Wybrzeże Wyspiańskiego 27; 50-370 Wrocław
e-mail: marek.doscokz@pwr.wroc.pl*

słowa kluczowe: modelowanie molekularne, mechanizmy reakcji, Gaussian, HyperChem.

Chemia, biochemia, inżynieria materiałowa i nanotechnologia posługują się już od dłuższego czasu modelowaniem molekularnym (chemią obliczeniową). W dzisiejszych czasach rozwój komputerów oraz programów sprawił, że modelowanie molekularne stało się dostępne dla wszystkich, a obliczenia chemiczne można już przeprowadzać na komputerze osobistym. Koszt oraz czas badań teoretycznych jest niejednokrotnie o wiele mniejszy niż wstępne badania praktyczne, a uzyskane wyniki coraz bardziej zbliżają się do wyników eksperymentalnych. Korzystając z doświadczeń chemii teoretycznej możemy dziś z bardzo dobrymi rezultatami obliczać właściwości fizyczne i chemiczne, modelować reakcje oraz stany przejściowe, symulować widma spektroskopowe, czy też badać układy bardziej skomplikowane, jakimi są centra aktywne enzymów. Wszechstronnie wykształcony chemik korzysta z najnowszych osiągnięć nauki, jakim niewątpliwie jest także wsparcie badań eksperymentalnych obliczeniami. Dlatego ważną rzeczą jest zapewnienie gruntownego wykształcenia oraz nauczania studentów podstaw oraz sposobów przeprowadzania studiów teoretycznych.

Kształcenie możemy prowadzić używając dwóch programów do chemii obliczeniowej: Gaussian oraz HyperChem. Program HyperChem jest przeznaczony do modelowania molekularnego głównie w środowisku Windows i jest dostępny w wersji testowej poprzez strony producenta. Zawiera on narzędzia do:

- budowania struktur cząsteczek i ich modyfikacji,
- obliczeń: energii, optymalizacji, oddziaływań,
- symulacji widm przy użyciu metod mechaniki molekularnej, metod półempirycznych oraz *ab initio*.

Jest atrakcyjnym programem dla początkujących użytkowników. Program Gaussian to „klasyka” chemii obliczeniowej, efekt pracy kilku pokoleń teoretyków, pierwotnie skupiających się wokół Johna Popla, który w 1998 roku otrzymał wspólnie z Walterem Kohnem nagrodę Nobla, za wkład w metody obliczeniowe w chemii. Jest to profesjonalne narzędzie chemii obliczeniowej. Dzięki dodatkowym programom, umożliwiającym przygotowanie obliczeń oraz interpretacje wyników takich jak:

- GaussView,
- ChemCraft,
- Gabedit,
- Molden,

stał się on bardzo przyjazny dla początkującego użytkownika. Prezentujemy skrypt oraz materiały dydaktyczne, przeznaczone dla studentów uczących się modelowania molekularnego z wykorzystaniem wymienionych programów. Zawiera on instrukcje oraz opracowane zagadnienia z analizy struktury, parametrów spektroskopowych, mechanizmów reakcji chemicznych. Skrypt powstał przy okazji opracowania pracy doktorskiej oraz podczas prowadzonych na Politechnice Wrocławskiej zajęć dydaktycznych, dotyczących mechanizmów reakcji chemicznych oraz właściwości spektroskopowych związków fosforoorganicznych.

Bibliografia:

- *Gaussian 03, Revision C.02*, M. J. Frisch, et al; Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004; <http://www.gaussian.com>.
- *HyperChem™ Professional 7.51*, Hypercube, Inc., 1115 NW 4th Street, Gainesville, Florida 32601, USA; <http://www.hyper.com>.
- Doskocz M.; Doskocz J.; Gancarz R., Roszak S., *Modelowanie molekularne w chemii organicznej*. Wrocław 2006-2007; przygotowywane do wydania.
- Doskocz M.; dysertacja w przygotowaniu.