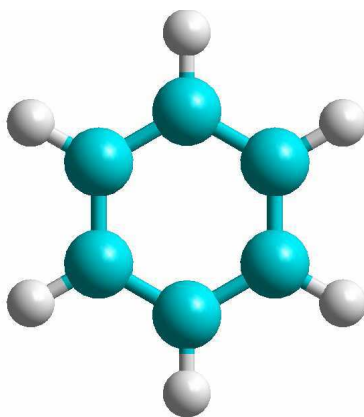


Komputerowe modelowanie cząsteczek związków chemicznych przy użyciu programu *HyperChem Lite*



Czym jest Modelowanie Molekularne?

Modelowanie molekularne jest zbiorem technik obliczeniowych, które służą do modelowania i przewidywania własności cząsteczek lub układów ponadcząsteczkowych. Modelowanie molekularne polega na tworzeniu dla cząsteczek chemicznych modeli, za pomocą których opisuje się lub przewiduje ich rzeczywiste własności fizykochemiczne. Za patrona modelowania można by uznać André Kekulé'go, który na podstawie znanych mu właściwości i wzoru sumarycznego benzenu określił (trafnie!) jego strukturę. Według legendy doszedł do tego budując w wyobraźni model z sześciu małych trzymających się rękoma i nogami na kształt pierścienia.

Wprowadzenie komputerów oraz rozwój fizyki molekularnej pozwoliło na stworzenie modeli teoretycznych opisujących oddziaływania występujące między atomami oraz cząsteczkami. Umożliwia to symulacje zachowania prawdziwej cząsteczki na podstawie znanych nam praw fizycznych. Naukowcy tworzą specjalne systemy (tzw. algorytmy pól siłowych) opisujące oddziaływania rozmaitych typów atomów występujących w naturze. Jest to nazywane mechaniką molekularną. Właściwości niewielkich cząsteczek można również przewidywać przy użyciu wzorów mechaniki kwantowej. Konieczne tu obliczenia dają znacznie dokładniejsze wyniki, wymagają jednak ogromnych mocy obliczeniowych. Moc obliczeniowa decyduje o dokładności wykonywanych symulacji rozmaitych zjawisk na poziomie pojedynczych cząsteczek. W układach o dużej złożoności stosuje się uproszczone założenia i/lub wychodzi się z pewnych założeń początkowych, wynikających z wcześniejszych danych eksperymentalnych. Ośrodki naukowe zaangażowane w modelowanie molekularne posiadają własne centra komputerowe lub korzystają z czasu, jaki jest im przydzielony na superkomputerach należących do innych. Obliczenia chemiczne prostych układów lub obliczenia przy użyciu mniej dokładnych metod można już przeprowadzać na komputerze osobistym.

Ważnym czynnikiem, który wpłynął na szybki rozwój badań teoretycznych jest koszt oraz czas badań teoretycznych, które są niejednokrotnie o wiele mniejszy niż wstępne badania praktyczne a uzyskane wyniki coraz bardziej zbliżają się do wyników eksperymentalnych. Modelowanie molekularne znajduje m.in. zastosowanie w nanotechnologii, do projektowania leków, poznawania struktur biologicznych, których sekwencja jest znana a budowa i funkcja jeszcze nie, w badaniach materiałowych i w wielu innych miejscach. Modelowanie molekularne odgrywa obecnie bardzo istotną rolę we wszystkich dziedzinach chemii. Rozwój chemii teoretycznej i opracowywanie nowych metod obliczeniowych pozwala na bardzo dobre oszacowanie właściwości fizycznych i chemicznych, modelowanie reakcji oraz stanów przejściowych, symulowanie widm spektroskopowych (IR, NMR), czy też na badanie bardziej skomplikowanych układów, na przykład białek. Modelowanie komputerowe często nie może dać jednoznacznej odpowiedzi na zadawane pytania, ale w znaczny sposób pomaga zrozumieć oraz rozwiązać problemy.

Wszechstronnie wykształcony chemik powinien umieć korzystać z najnowszych dobrodziejstw, jakim niewątpliwie jest wsparcie badań eksperymentalnych obliczeniami.

Niektóre programy używane w MM:

Gaussian
HyperChem
Cerius2
InsightII
Molsoft ICM
PyMOL
VMD
GROMOS
Sirius
NOCH
Sybyl
MOE
Agile Molecule
SPARTAN
Millsian

HyperChem Lite

HyperChem Lite jest zintegrowanym i elastycznym programem służącym do modelowania molekularnego przeznaczonym dla celów edukacyjnych, naukowych oraz profesjonalnego budowania modeli cząsteczek. Program pozwala na wizualizację, analizowanie oraz symulowanie cząsteczek, a także dostarcza informację o strukturze modelowanych cząsteczek. W celu zaznajomienia się z możliwościami i charakterystyką programu HyperChem można zapoznać się z informacjami ze strony: <http://www.hyper.com>. Na tej stronie znajdują się informacje o programie HyperChem i jego możliwościach. Istnieje możliwość ściągnięcia czasowej wersji programu.

Materiały źródłowe:

<http://www.man.poznan.pl/~bielecki/mm.htm>
<http://www.molnet.eu/index.php>
<http://www.hyper.com>

Jak używać programu HyperChem?

Dokładny opis i zastosowanie wszystkich funkcji będą przedstawione na zajęciach.

Opis okna programu HyperChem.

