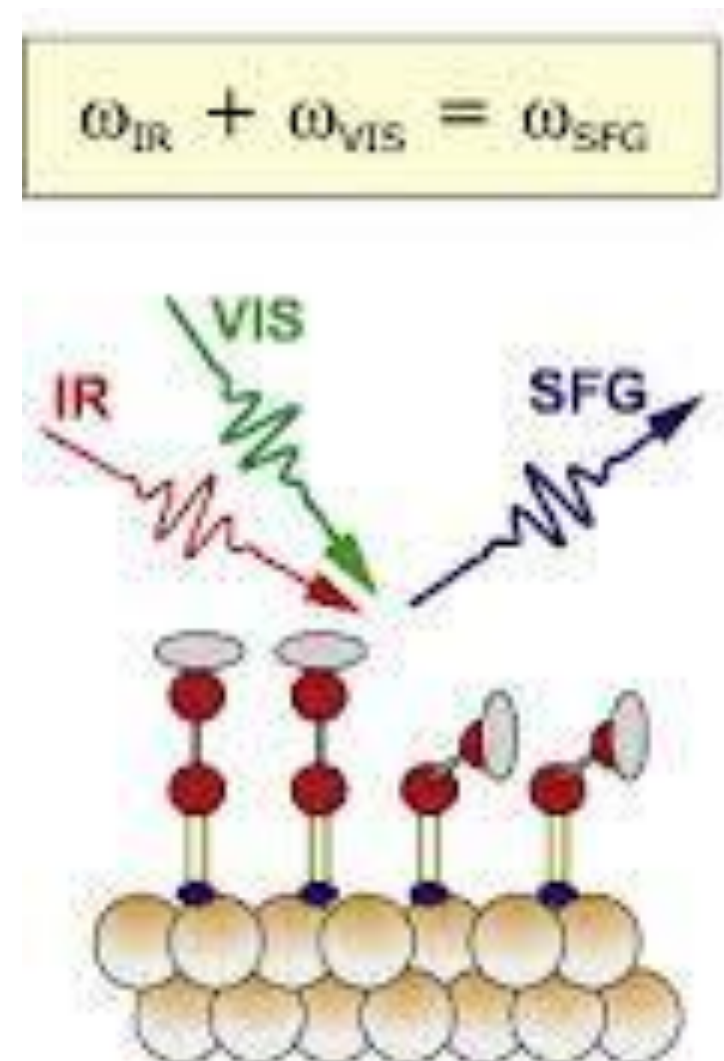


Cele projektu

- Zapoznanie się z podstawowymi pojęciami i metodami obliczeniowymi niezbędnymi do przeprowadzenia symulacji komputerowych za pomocą wybranych pakietów obliczeniowych: MOLPRO i GAUSSIAN
- Przyswojenie pakietu graficznego GABEDIT w celu wizualizacji wyników
- Przeprowadzenie symulacji komputerowych właściwości wybranych molekuł (reszt fosfolipidów) takich jak (geometria, częstość drgań, energia potencjału, energia jonizacji, orbitale molekularne)
- Badanie właściwości optycznych fosfolipidów za pomocą metody SFG



Rys.1 Idea metody SFG

Metodologia

TASK-Trójmiejska Akademicka Sieć Komputerowa

- obliczenia na komputerze dużej mocy-klastery Galera
- zapotrzebowanie projektu: 8 rdzeni obliczeniowych, 8GB RAM

DFT- Density Functional Theory –Metoda Funkcjonału Gęstości

- Modelowanie struktury cząsteczek chemicznych lub kryształów
- Zakłada, że wszystkie własności układu kwantowego w stanie stacjonarnym wynikają z gęstości elektronowej stanu podstawowego
- Uwzględnia energię korelacyjno-wymenną

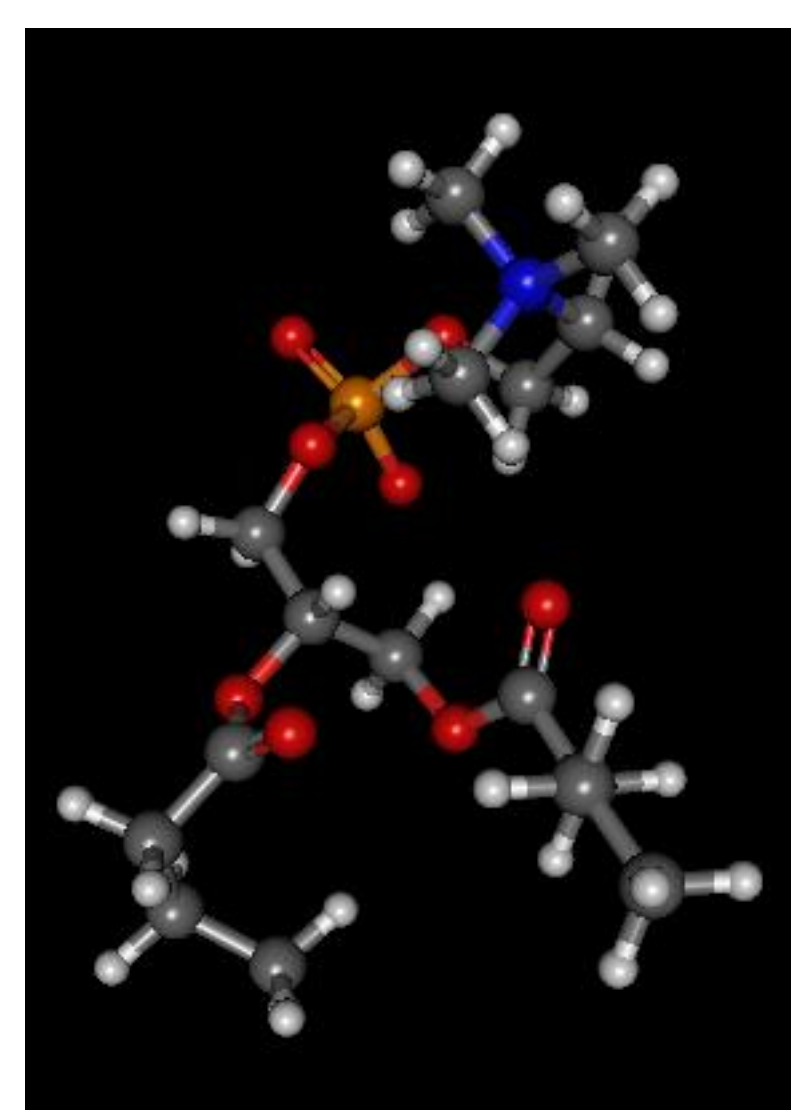
Przykładowy plik wejściowy w programie GAUSSIAN (cholina)

```
%chk=opt_choline.chk
%mem= 4000MB
%NProcShared= 8
#P HF/6-31G(d) opt=tight Int=UltraFine

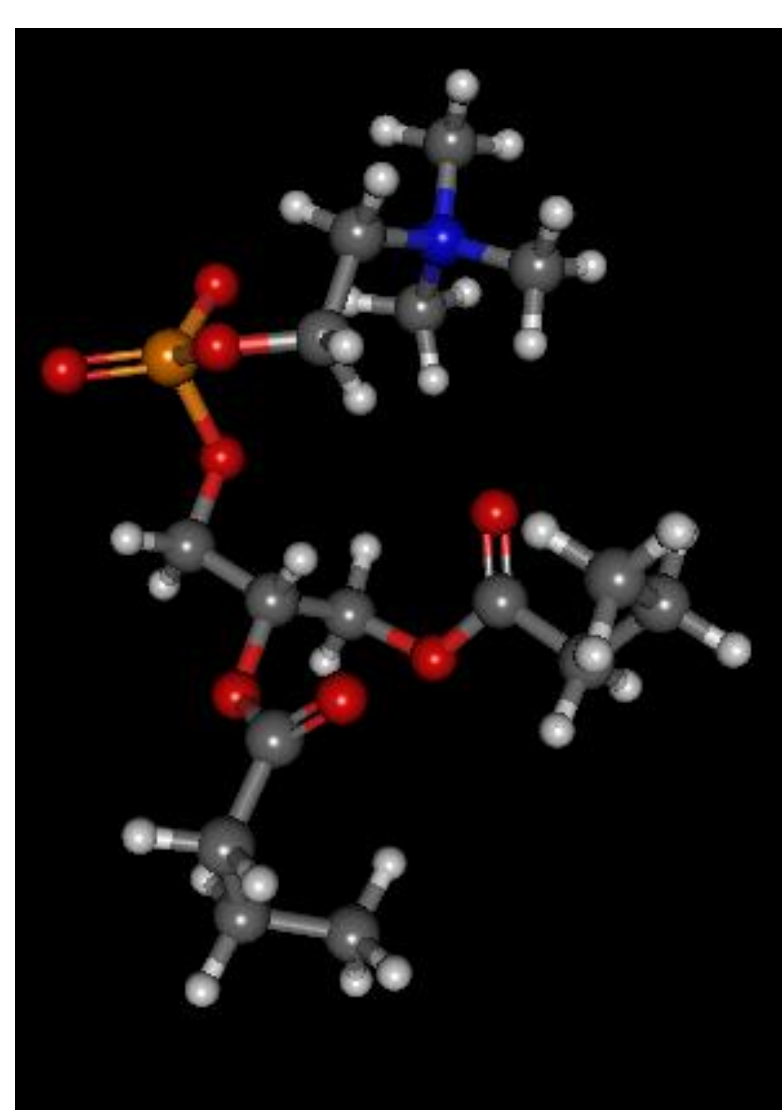
Input file generated by gabedit...

1      1
C      -1.7749290000    0.6928570000   -0.3571430000
N      -0.2859290000    0.7138570000    0.0378580000
C      0.2860710000    -0.7141430000   -0.0371430000
C      1.7740710000    -0.6931430000    0.3568570000
H      -2.3129290000    0.0578570000    0.3148570000
H      -2.1719290000    1.6858570000   -0.3051430000
H      -1.8739290000    0.3218570000   -1.3551430000
H      -0.2519290000   -1.3491430000    0.6348570000
H      0.1870710000   -1.0861430000   -1.0351420000
O      2.1710710000   -1.6851430000    0.3048570000
H      1.8740710000   -0.3211430000    1.3548570000
H      2.3130710000   -0.0581430000   -0.3151430000
H      3.1820240000   -1.4970840000    0.3166860000
C      0.2521230000    1.3489190000   -0.6352090000
H      1.2871670000    1.3647930000   -0.3622930000
H      -0.1459200000    2.3417090000   -0.5844350000
H      0.1499040000    0.9770240000   -1.6325780000
C      -0.1858660000    1.0860900000    1.0364830000
H      0.8487260000    1.1007700000    1.3111710000
H      -0.7251930000    0.4516090000    1.7096920000
H      -0.5845980000    2.0769930000    1.0877250000
```

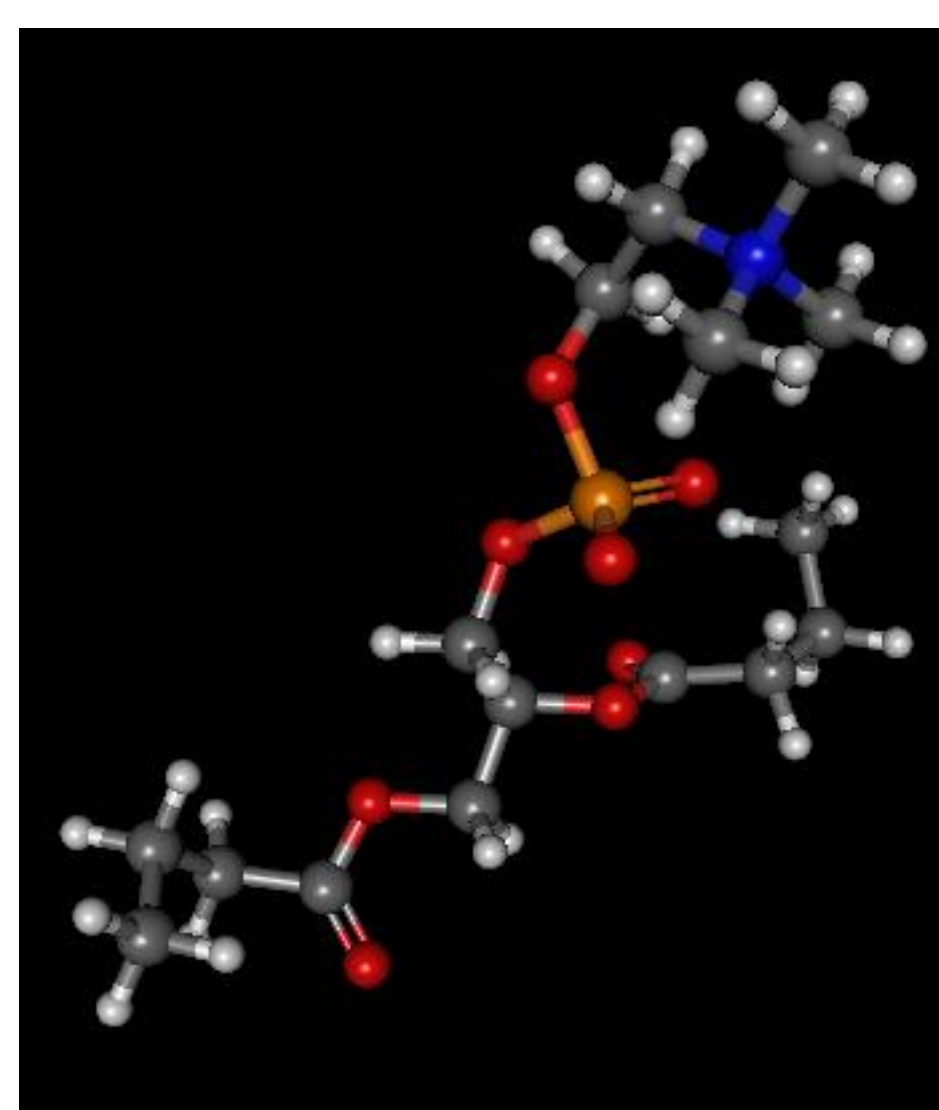
Przykładowe trzy stabilne konformacje fosfatydylochliny o najniższych energiach [a.u.] po optymalizacji DFT/6-31G(D)



E = -1626.9461168

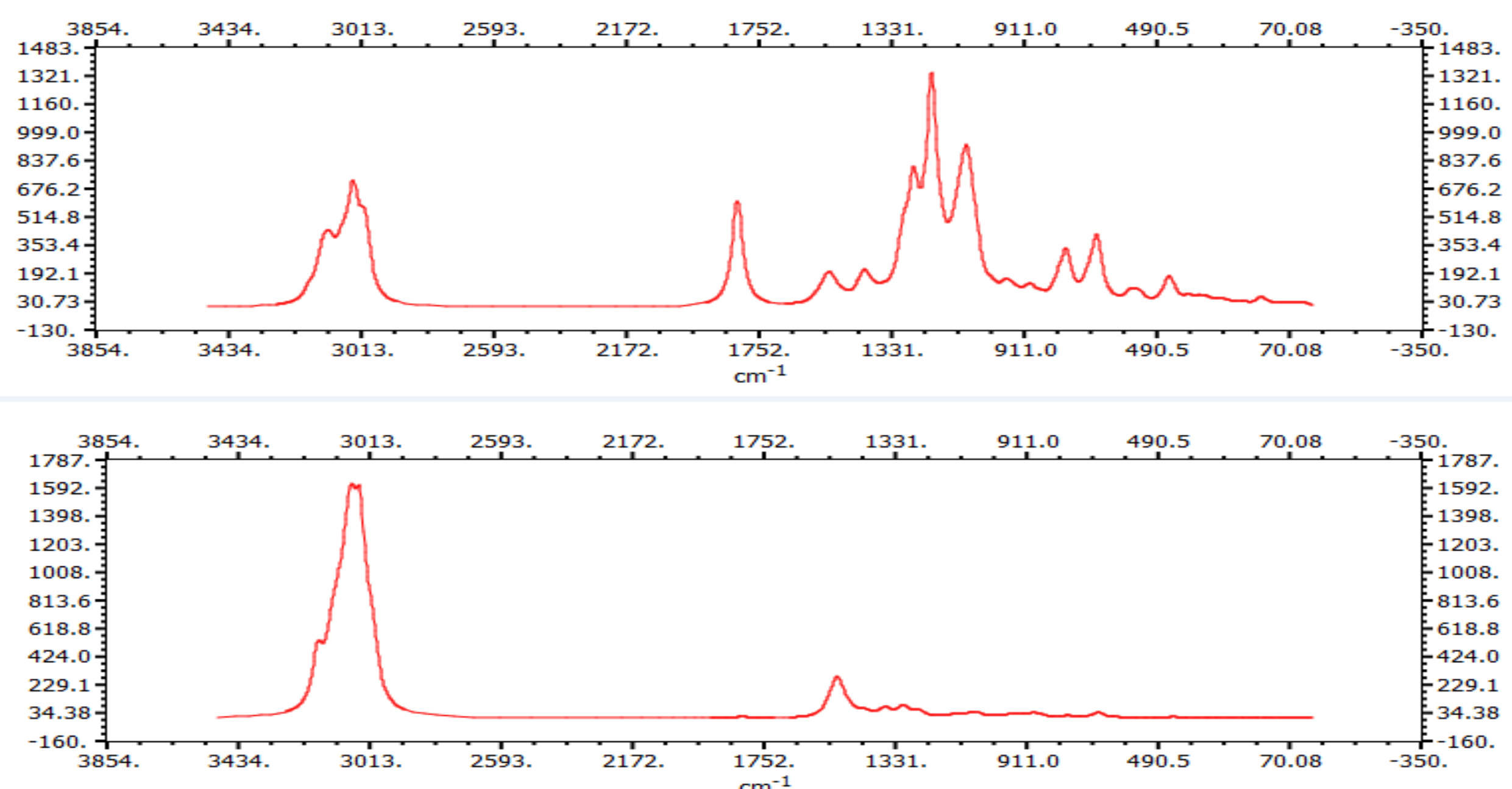


E = -1626.9478596



E = -1626.9480966

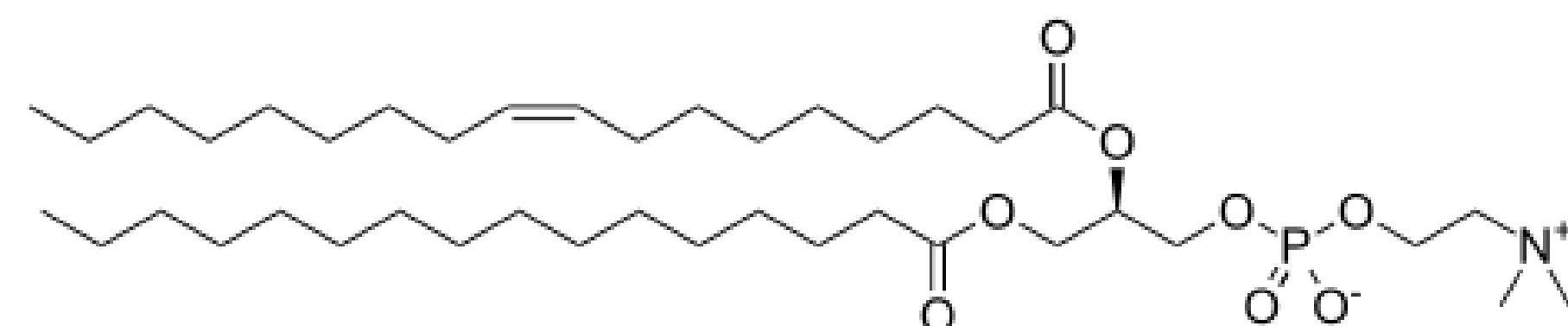
Widmo IR oraz widmo Ramanowskie dla konformacji fosfatydylochliny o najniższej energii



Przedmiot badań

W projekcie podjęto próbę analizy właściwości molekuly wchodzącej w skład niektórych fosfolipidów: choliny.

Lecytyny (fosfatydylochliny) są to organiczne związki chemiczne zaliczane do fosfolipidów, w których reszta fosforanowa zestryfikowana jest choliną [5].

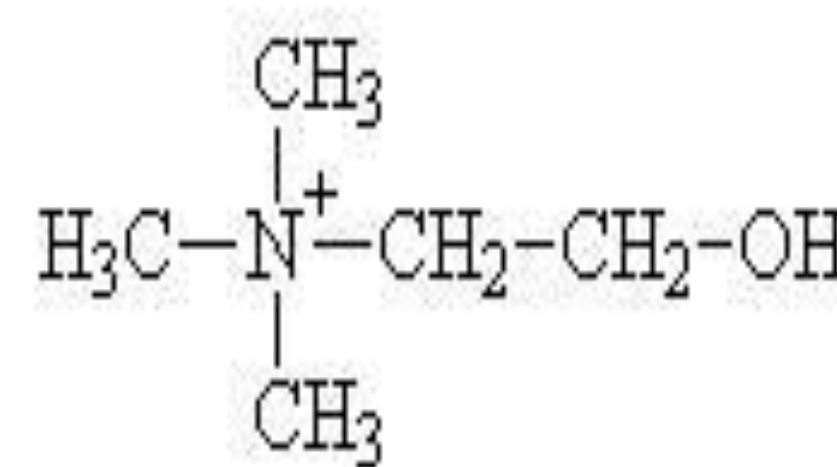


Cholina uważana jest za substancję witaminopodobną ze względu na jej istotne znaczenie biologiczne. W wątrobie cholina tworzy się z *N*-metyloetanoloaminy [3].

Cholina jest prekursorem acetylochliny - neuromediatora. Rola choliny jako prekursora acetylochliny jest szeroko badana, bowiem egzogenna cholina może być stosowana w leczeniu zaburzeń w układzie nerwowym.

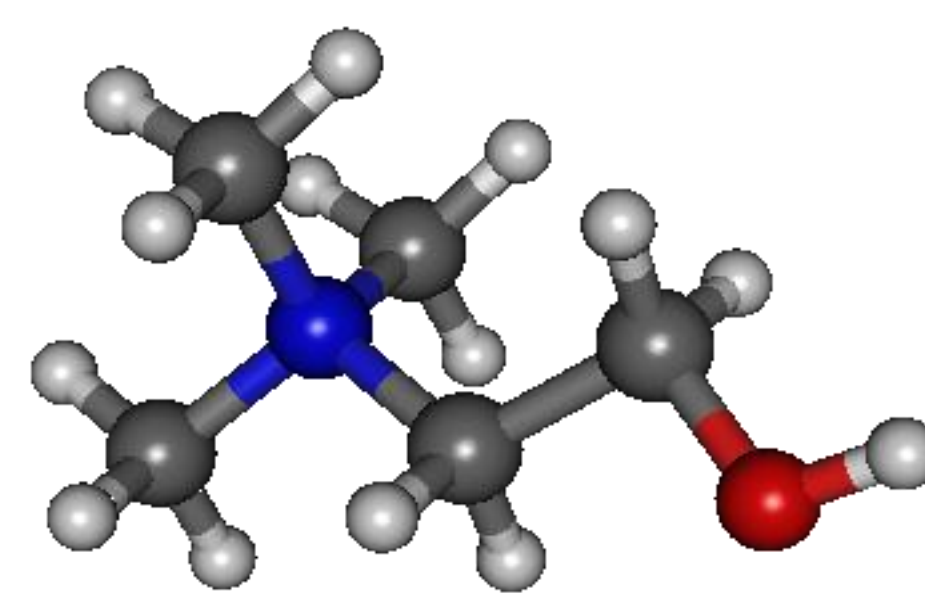
Ważna funkcja biologiczna choliny to m.in. bycie donorem labilnych grup metylowych. Cholina służy jako dawca tych grup w biosyntezie różnych metylowanych związków.

Wzór strukturalny:

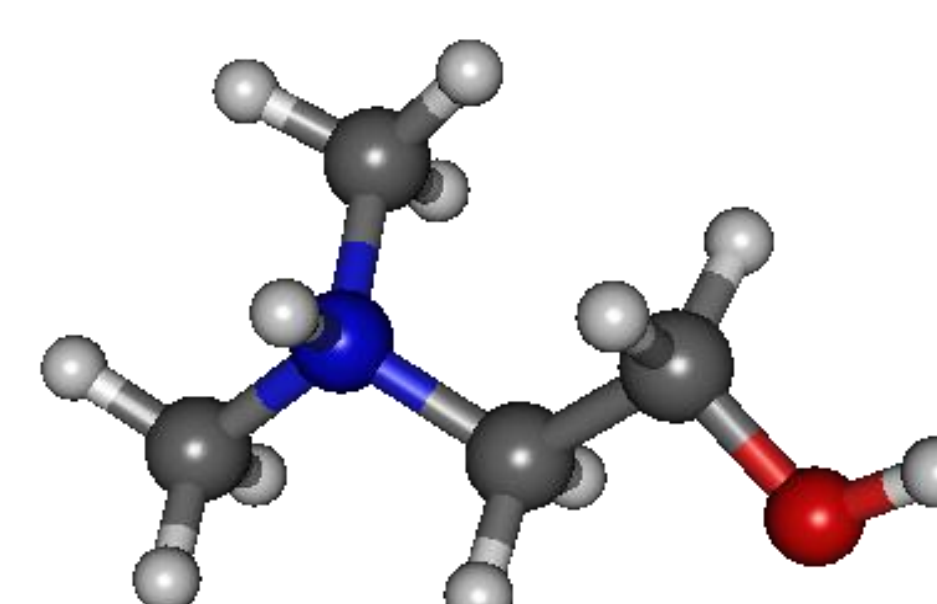


Aby zbadać wpływ grup metylowych na właściwości cząsteczki przeprowadzono obliczenia dla choliny (Rys.2), choliny z 1 grupą metylową zastąpioną przez wodór (Rys.3) oraz 2 grupami zastąpionymi przez wodór (Rys.4).

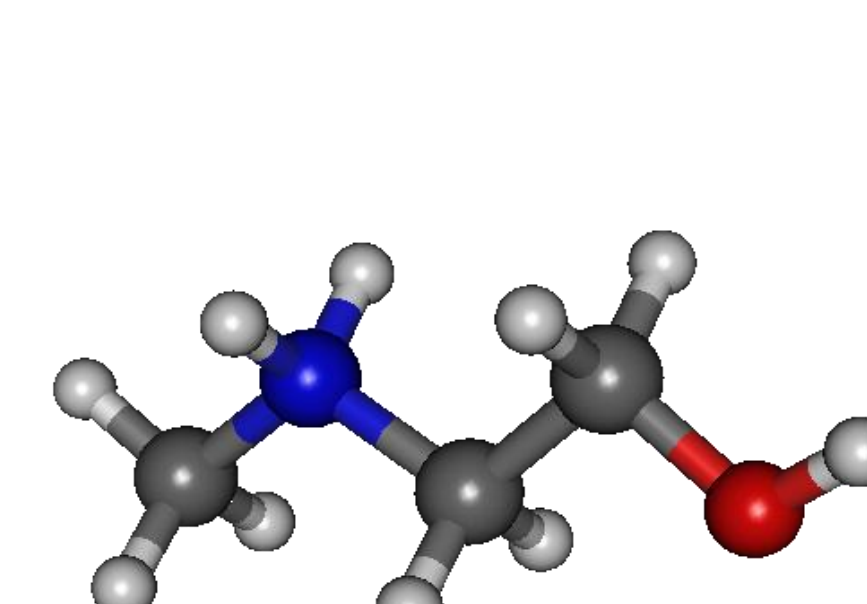
Zoptymalizowane geometrie wygenerowane w programie Gabedit [4]:



Rys.2 C₅H₁₄NO⁺



Rys.3 C₄H₁₂NO⁺



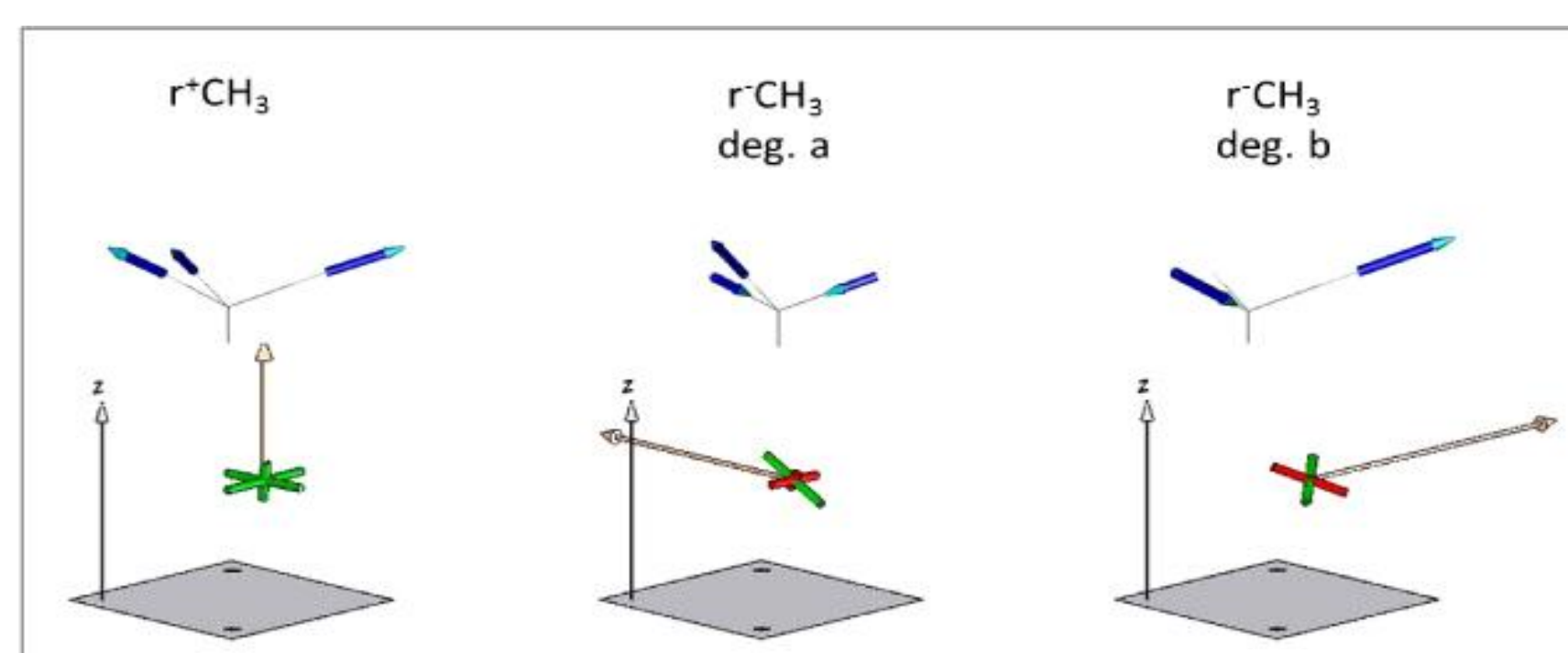
Rys.4 C₃H₁₀NO⁺

Energie po optymalizacji DFT(B3LYP)/6-311G(D) [a.u.]

C ₅ H ₁₄ NO ⁺	C ₄ H ₁₂ NO ⁺	C ₃ H ₁₀ NO ⁺
-328,75220045	-289,3663397	-250,1135699

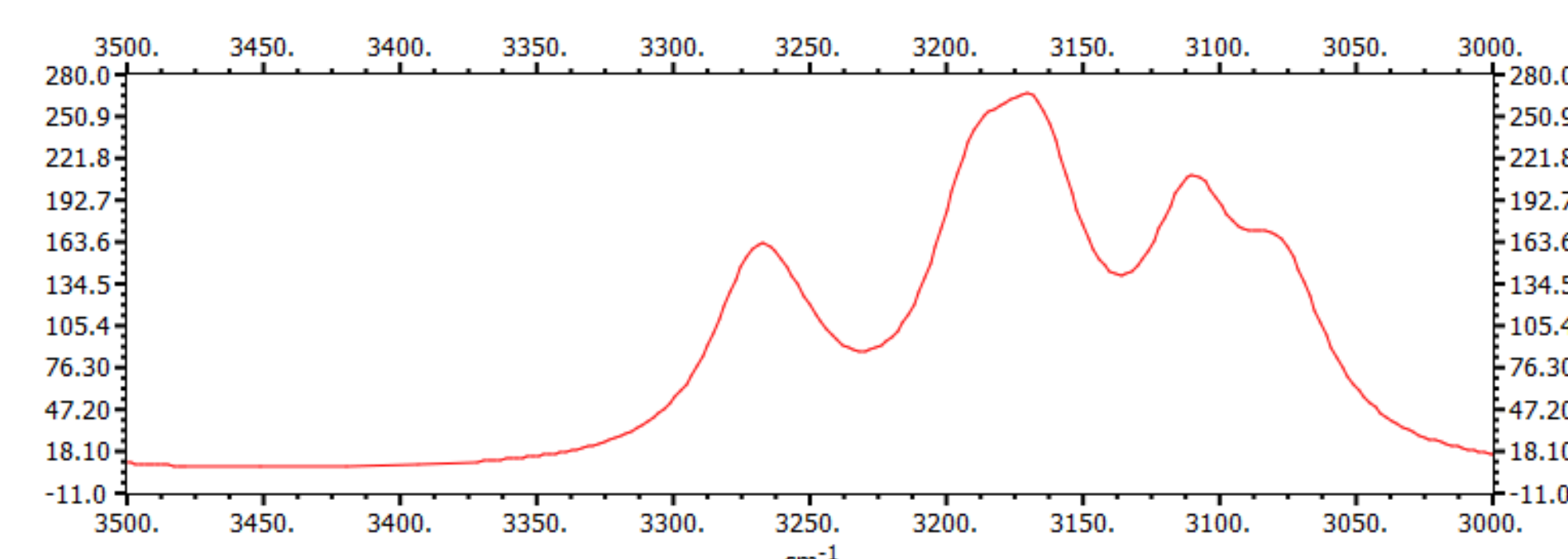
Charakterystyczne drgania normalne grupy metylowej (cholina Rys. 4) występują dla trzech częstotliwości:

- mod symetryczny dla 3166,7593 cm⁻¹
- pierwszy mod antysymetryczny dla 3271,7224 cm⁻¹
- drugi mod antysymetryczny dla 3267,4392 cm⁻¹



Rys. 5 Drgania normalne grupy metylowej [5]

Rys. 6 Fragment widma Ramana dla C₃H₁₀NO⁺



Literatura

- Idee chemii kwantowej, Lucjan Piela, PWN, 2003.
- Modelowanie struktury molekularnej układów C-H oraz C2+ - Uracyl. Obliczenia krzywych energii potencjalnej. Praca inżynierska, Ewa Erdmann, Politechnika Gdańska, (2012)
- The Chemical Database. The Department of Chemistry, University of Akron. [dostęp 27-06-2013]. <http://ull.chemistry.uakron.edu/erd/Chemicals/8000/6284.html>
- Gabedit - A graphical user interface for computational chemistry softwares. Allouche, A.-R., Journal of Computational Chemistry, 32 (2011) 174–182
- Wang H-F, Gan W, Lu R, Rao Y and Wu B-H 2005 Int. Rev. Phys. Chem. 24 191
- Mały słownik chemiczny. Wyd. V. Warszawa: Wiedza Powszechna, 1976