W. Andrzej Sokalski

Chemia kwantowa, obliczeniowa oraz modelowanie molekularne na Politechnice Wrocławskiej

Badania w zakresie chemii kwantowej zainicjował prof. Henryk Chojnacki (1934–2012), który po ukończeniu studiów chemicznych na Wydziale Mat.-Fiz.-Chem. Uniwersytetu Jagiellońskiego 1 grudnia 1955 roku podjął pracę w Katedrze Chemii Fizycznej Wydziału Chemicznego, prowadząc początkowo badania doświadczalne dotyczące przewodnictwa elektrycznego w organicznych kryształach molekularnych. Był pierwszym doktorem w tej dziedzinie wypromowanym przez prof. Krzysztofa Pigonia (1964). Po habilitacji (1969) rozpoczął pracę badawczą w chemii kwantowej – nowej, rodzącej się dopiero w Polsce, teoretycznej dyscyplinie naukowej.

Pierwsze jego prace z tej dziedziny (symulacje widm elektronowych agregatów imidazolu) ukazały się w 1968 roku. Zostały wykonane za pomocą opracowanego przez Profesora oprogramowania na pierwszej we Wrocławiu maszynie obliczeniowej ELLIOTT 803b na Uniwersytecie Wrocławskim. Po roku 1971 obliczenia prowadzono w Przemysłowym Instytucie Automatyki i Pomiarów, Centrum Obliczeniowym PWr oraz Zakładzie Elektronicznej Techniki Obliczeniowej wyposażonymi w komputery ODRA 1204, 1305 oraz RIAD 32. Od 1996 roku wykorzystywano komputery zainstalowane we Wrocławskim Centrum Sieciowo-Superkomputerowym. Pierwsze programy zostały opracowane w autokodzie MOST, a następne w językach Algol i Fortran.

Pierwsza grupa chemii kwantowej w polskich uczelniach technicznych powstała w Instytucie Chemii Organicznej i Fizycznej Politechniki Wrocławskiej w roku 1971, kiedy u prof. Henryka Chojnackiego rozpoczął staż asystencki piszący te słowa, a Józef Lipiński (1948–2016) i Andrzej Nowek podjęli prace dyplomowe. W roku 1972 wszyscy wyżej wymienieni rozpoczęli studia doktoranckie. Do grupy dołączali kolejni doktoranci profesora: Jerzy T. Jodkowski (1950–2013), Szczepan Roszak, Tomasz Wójcik, Stanisław Styrcz, Robert Toboła, Krzysztof Strasburger i Lech Schulz. Zakład Chemii Kwantowej wyodrębnił się z Zakładu Chemii Fizycznej w roku 1984 i funkcjonował do roku 2015 jako Zakład Modelowania Molekularnego i Chemii Kwantowej. W roku 2005 dołączył do grupy kwantowo-chemicznej absolwent Uniwersytetu Jagiellońskiego dr Tadeusz Andruniów, prowadzący badania właściwości spektralnych białek fluorescencyjnych, po odbyciu staży naukowych we Włoszech,

USA i Francji. W 2008 roku wyodrębnił się w funkcjonującym od 1995 roku Instytucie Chemii Fizycznej i Teoretycznej Zakład Chemii Teoretycznej, kierowany przez prof. Wojciecha Bartkowiaka. W roku 2015 Zakład Modelowania Molekularnego i Chemii Kwantowej włączono do Katedry Inżynierii i Modelowania Materiałów Zaawansowanych i jednocześnie powstał odrębny wydziałowy Zakład Chemii Fizycznej i Kwantowej.

Zróżnicowana tematyka prac doktorskich w zakresie chemii kwantowej była niejednokrotnie inspirowana pracami doświadczalnymi prowadzonymi na wysokim poziomie najpierw w Instytucie Chemii Fizycznej i Organicznej, a później w Instytucie Chemii Fizycznej i Teoretycznej w takich dziedzinach, jak spektroskopia UV/Vis, elektronika molekularna, chemia związków fosforoorganicznych, biochemia i biologia molekularna – prace w tym zakresie są kontynuowane. 34 osoby w trzech pokoleniach uczniów prof. Chojnackiego uzyskały stopień doktora, 7 – doktora habilitowanego oraz 3 – tytuł profesora. Rozwinięte zostały nowe kierunki badań w zakresie chemii pozytonów, teorii oddziaływań międzycząsteczkowych, molekularnej optyki nieliniowej, teorii widm jedno- i dwufotonowych, teorii transportu nośników ładunku w materiałach molekularnych, teorii reaktywności, obliczeniowej fotochemii, modelowania inhibicji i katalizy enzymatycznej, wykraczające poza klasyczną chemię kwantową i mieszczące się obecnie w szerzej zdefiniowanych obszarach chemii obliczeniowej i modelowania molekularnego. Uczeń prof. Chojnackiego, dr hab. Jerzy Jodkowski, stworzył na Wydziale Farmaceutycznym z Oddziałem Analityki Medycznej Uniwersytetu Medycznego im. Piastów Śląskich we Wrocławiu zespół prowadzący teoretyczne i doświadczalne badania kinetyki reakcji w fazie gazowej.

Od początku istnienia grupy prof. Chojnackiego prowadzone prace oparte były na rozwijanych w zespole oryginalnych metodach obliczeniowych i oprogramowaniu. Powstałe prace poświęcone rozwojowi nowych metod obliczeniowych na trwałe weszły do literatury przedmiotu, o czym świadczą ich liczne cytowania. Od końca lat siedemdziesiątych XX wieku dr Sokalski i dr Roszak rozwinęli współpracę z ośrodkami w USA, m.in. z The Johns Hopkins University w Baltimore, w wyniku czego powstały 52 wspólne publikacje, Arizona State University (33 publikacje) oraz Jackson State University (131 publikacji). Prowadzono współpracę z National Institute of Standards and Technology (Gaithersburg, USA), Lawrence Livermore National Laboratory (Berkeley, USA), Roswell Park Cancer Institute (Buffalo, USA), Pacific Northwest National Laboratory (USA), University of Bristol (Wielka Brytania), Memorial University of Newfoundland (St. Johns, Kanada), Kyoto University (Japonia). Realizowano kontrakty badawcze na zlecenie National Institute of Standards and Technology (Gaithersburg, USA), firmy Air Products and Chemicals (Allentown, USA), Jackson State University (USA) oraz Wrocławskiego Centrum Technologii.

Warto podkreślić, że we współpracy z zespołem prof. Jerzego Leszczyńskiego w Jackson uczestniczyło ponad 20 pracowników, doktorantów i studentów PWr. Na-

wiązano tam owocne naukowo kontakty z zespołem prof. Andrzeja Sadleja z Uniwersytetu Mikołaja Kopernika oraz prof. Sławomira Grabowskiego z Uniwersytetu Łódzkiego. W późniejszych latach rozwinięto współpracę z takimi ośrodkami, jak Royal Institute of Technology w Sztokholmie, Institute of Macromolecular Chemistry of Academy of Sciences of the Czech Republic (IMC) w Pradze, Czech Academy of Sciences w Brnie, Institute of Organic and Pharmaceutical Chemistry National Hellenic Research Foundations w Atenach, Uniwersytet Mateja Bela w Bańskiej Bystrzycy (Słowacja), University of Girona w Hiszpanii i wielu innych.

W okresie 1969–2018 powstało ponad 430 publikacji trzech pokoleń wychowanków prof. Chojnackiego, które były cytowane już ponad 5600 razy. Wśród nich znajduje się najczęściej cytowana (1836 razy!) w siedemdziesięcioletniej historii Politechniki Wrocławskiej oraz miasta Wrocławia praca dr. inż. Karola M. Langnera *cclib: A library for package-independent computational chemistry algorithms* opublikowana w Journal of Computational Chemistry (2008), **29**, 839. Jedenaście innych prac było cytowanych ponad 100 razy.

Najnowsza praca *A prebiotically plausible synthesis of pyrimidine beta-ribonucleosides and their phosphate derivatives involving photoanomerization*, której współautorem jest dr hab. Robert Góra, ukazała się w renomowanym czasopiśmie Nature Chemistry (2017), **9**, 303.

Organizowane przez zespół krajowe sympozja „Komputery w Chemii" (1994, 1996, 1999) oraz od roku 2004 organizowana co dwa lata konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials" uzyskała status czołowej cyklicznej serii konferencji w dziedzinie chemii obliczeniowej i modelowania molekularnego w Polsce. Uczestniczyło w nich dotąd 790 naukowców z ponad 30 krajów z całego świata i część prezentowanych prac ukazuje się regularnie co dwa lata w specjalnym pokonferencyjnych numerach czasopisma Journal of Molecular Modeling (Springer). Członkowie Zakładu Chemii Fizycznej i Kwantowej zorganizowali w 2015 roku, cieszące się powodzeniem, kilkudniowe warsztaty naukowe zatytułowane „Cząsteczka w otoczeniu chemicznym" w WCSS.

W zakresie działalności dydaktycznej warto podkreślić pionierski wysiłek prof. Chojnackiego, który napisał 4 skrypty poświęcone budowie atomu i cząsteczki oraz chemii kwantowej. W roku 1997 otwarto specjalność *Informatyka chemiczna*, która w 2009 roku została przekształcona w pierwszą w Polsce anglojęzyczną specjalność *Bioinformatics* na uczelni technicznej. Doktoranci Krzysztof Strasburger oraz Maciej Pyka uruchomili pierwszą na PWr studencką pracownię komputerową pracującą w systemie Linux, z pierwszym w kraju kompletem oprogramowania obsługującego krystalograficzną bazę danych CSD. W późniejszym okresie dr Paweł Kędzierski wspólnie z doktorantką Edytą Dygudą opracowali autorski kurs laboratoryjny modelowania molekularnego, prowadząc w 2006 i 2007 w Jackson, USA, finansowane przez NSF szkolenie 30 amerykańskich profesorów biochemii. Obecnie analogiczne zajęcia prowadzone są dla anglojęzycznych specjalności na studiach magisterskich: *Bioinforma-*

tics i *Medicinal chemistry* oraz *Biotechnologii farmaceutycznej*. W 1998 roku Tomasz Cierpicki (obecnie profesor na University of Michigan w Ann Arbour, USA) w swojej pracy dyplomowej, stosując technikę dwuwymiarowego NMR i korzystając z dostępnego oprogramowania, samodzielnie rozwiązał strukturę inhibitora polipeptydowego składającego się z 56 aminokwasów. Była to jedna z pierwszych prac tego typu w skali krajowej i została nagrodzona w ogólnopolskim konkursie PTCh na najlepszą pracę magisterską. Ostatnio prof. Cierpicki wspólnie z prof. Grembecką (absolwentką PWr współpracującą z zespołem od czasu studiów doktoranckich) odkryli lek przeciw nieuleczalnej dotąd białaczce dziecięcej oraz nowotworom prostaty. Doktor Ireneusz Bulik, najlepszy absolwent Politechniki Wrocławskiej w 2010 roku zrealizował swoją pracę doktorską z zakresu chemii kwantowej pod kierunkiem prof. Gustavo Scuserii (Rice University, Houston) i pracuje obecnie na Yale University; jest laureatem amerykańskiej nagrody Harry'ego B. Weisera w dziedzinie chemii.

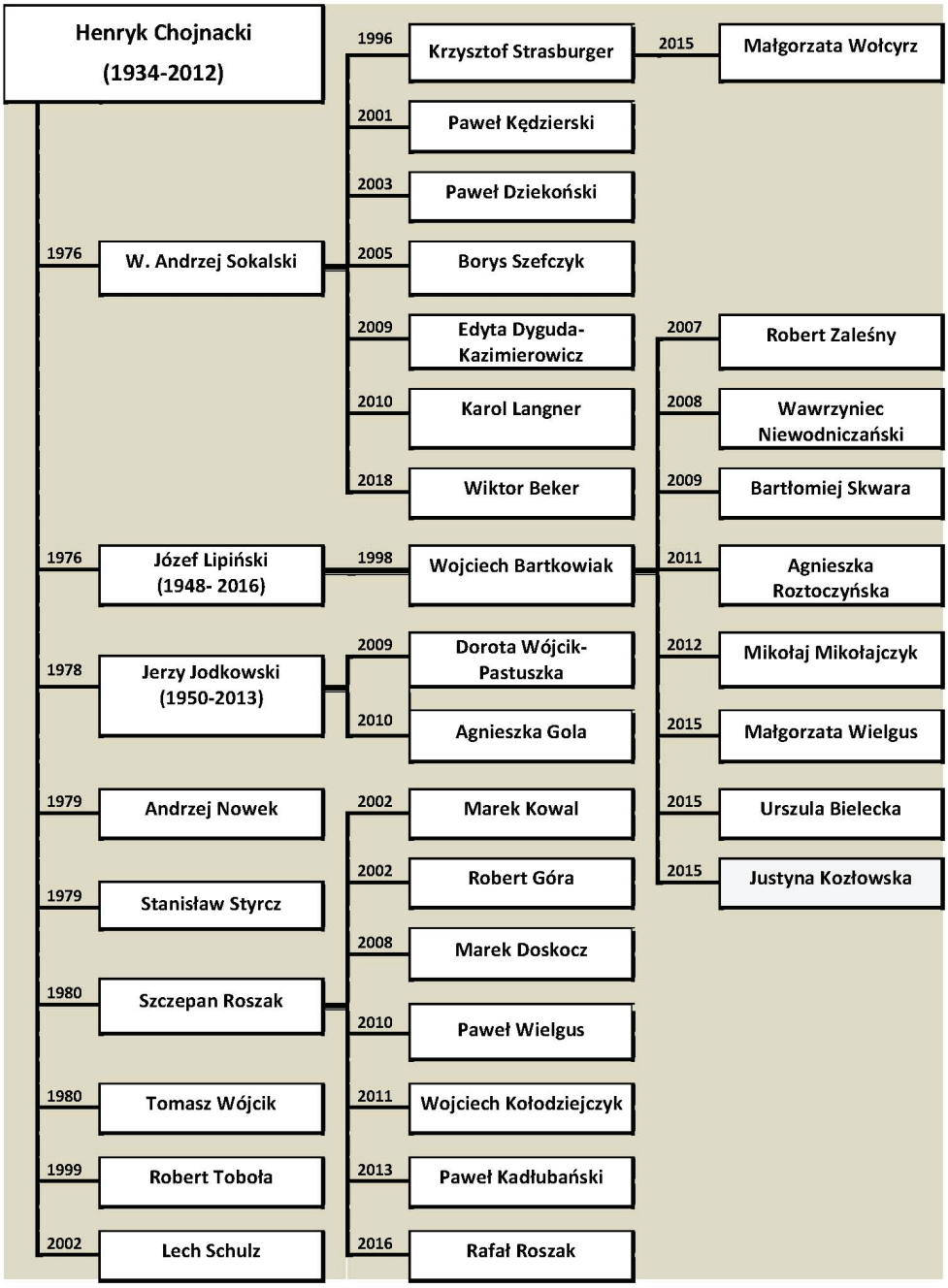
Absolwenci zainicjowanych przez zespół specjalności *Bioinformatics* i *Informatyka chemiczna* pracują obecnie w firmach: Vertex Pharmaceuticals, Boston, USA,

Rys. 4. Grupa chemii kwantowej (2007).
Stoją od lewej: Paweł Lipkowski, Tadeusz Andruniów, Szczepan Roszak, Wojciech Bartkowiak, Krzysztof Strasburger, Borys Szefczyk, Robert Góra, Paweł Kędzierski, Wojciech Kołodziejczyk, Jakub Kamiński, Edyta Dyguda-Kazimierowicz, Małgorzata Wołcyrz, Krzysztof Tajchert, Henryk Chojnacki, Andrzej Sokalski

Stratified Medical, Centrum Nowych Technologii w Warszawie, Selvita SA, Biocentrum, FQS Fujitsu Poland oraz Nietsch Instruments w Krakowie, Celther-Poland w Cieszanowie, Techland, Micro Solutions, Startfund we Wrocławiu. Prawie połowa absolwentów tej elitarnej specjalności obroniła doktoraty lub jest w trakcie studiów doktoranckich, względnie pracuje w instytucjach akademickich, takich jak: Nestle Institute of Health, Friburg w Szwajcarii; Korea University w Seulu; Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu; Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe; Institut de Biologie Structurale w Grenoble, Francja; Instytut Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie; University of Edinbourgh w Wielkiej Brytanii; University of Southern California; University of California w Los Angeles, USA; Wageningen University oraz University of Groningen w Holandii; Jackson State University w USA; Czech Academy of Sciences, Brno w Republice Czeskiej; Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego w Warszawie; Münster University w Niemczech; University of Basel w Szwajcarii oraz University of Helsinki w Finlandii; Yale University w USA.

Konferencje naukowe i warsztaty organizowane w zakresie chemii kwantowej i obliczeniowej oraz modelowania molekularnego na Wydziale Chemicznym

1. Ogólnopolska Konferencja „Chemia Kwantowa ’86”, 4–6 XII 1986, Wrocław.
2. Polish-American Workshop „Computational methods for large molecular systems” afiliowany przy III konferencji „Computers in Chemistry”, 23–26 VI 1994, Wrocław. [160 uczestników z 15 krajów, 45 wykładów plenarnych i 70 posterów, 25 artykułów w specjalnym zeszycie czasopisma Computers in Chemistry, **19** (3), 1995].
3. IV konferencja Computers in Chemistry, 17–21 X 1996, Polanica-Zdrój. [21 artykułów w specjalnym zeszycie Computers in Chemistry, **22** (1), 1998].
4. Polish-American Workshop „New trends in computational methods for large molecular systems” afiliowany przy V konferencji „Computers in Chemistry”, 1–6 VII 1999, Szklarska Poręba. [170 uczestników z 20 krajów, 35 wykładów, 100 posterów, 30 artykułów w specjalnym zeszycie Computers in Chemistry, **24** (3–4), 2000].
5. Polish-American Workshop „Introduction to molecular modeling”, 15–31 V 2004, Wrocław [37 uczestników, 15 wykładów].
6. I konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials”, 16–20 IX 2004, Wrocław. [87 uczestników z 14 krajów, 29 wykładów, 40 posterów, 21 artykułów w specjalnym zeszycie Journal of Molecular Modeling, **11** (4–5), 2005].



Rys. 5. Genealogia naukowych następców prof. Henryka Chojnackiego
(Por. pokolenia wcześniejsze w rozdziale *Kazimierz Gumiński. Życie i twórczość* w niniejszym tomie)

7. II konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials", 10–15 IX 2006, Wrocław. [124 uczestników z 15 krajów, 31 wykładów i 59 posterów; 25 artykułów w specjalnym zeszycie Journal of Molecular Modeling, **13** (6–7), 2007 oraz 16 rozdziałów w książce *Molecular Materials with Specific Interactions: Modeling and Design*, Springer, 2007].
8. III konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials", 23–28 VI 2008, Piechowice [107 uczestników z 20 krajów, 45 wykładów, 52 postery, 25 artykułów w specjalnym zeszycie Journal of Molecular Modeling, **15** (6), 2009].
9. IV konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials", 4–8 VII 2010, Wrocław. [110 uczestników z 16 krajów, 40 wykładów, 66 posterów, 29 artykułów w specjalnym zeszycie Journal of Molecular Modeling, **17** (9), 2011].
10. V konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials", 10–14 IX 2012, Wrocław. [136 uczestników z 21 krajów, 39 wykładów, 91 posterów, 19 artykułów w specjalnym zeszycie Journal of Molecular Modeling, **19** (10), 2013].
11. VI konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials", 29 VI–3VII 2014 Kudowa-Zdrój. [114 uczestników z 22 krajów, 45 wykładów, 77 posterów, 12 artykułów w Journal of Molecular Modeling, **21**, 2015].
12. VII konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials", 26–30 VI 2016, Trzebnica. [108 uczestników z 15 krajów, 34 wykłady, 72 postery, 13 artykułów w Journal of Molecular Modeling, **23**, 2017].
13. VIII konferencja „Modeling & Design of Molecular Materials", 24–28 VI 2018, Polanica Zdrój. [96 uczestników z 11 krajów, 36 wykładów, 50 posterów].