

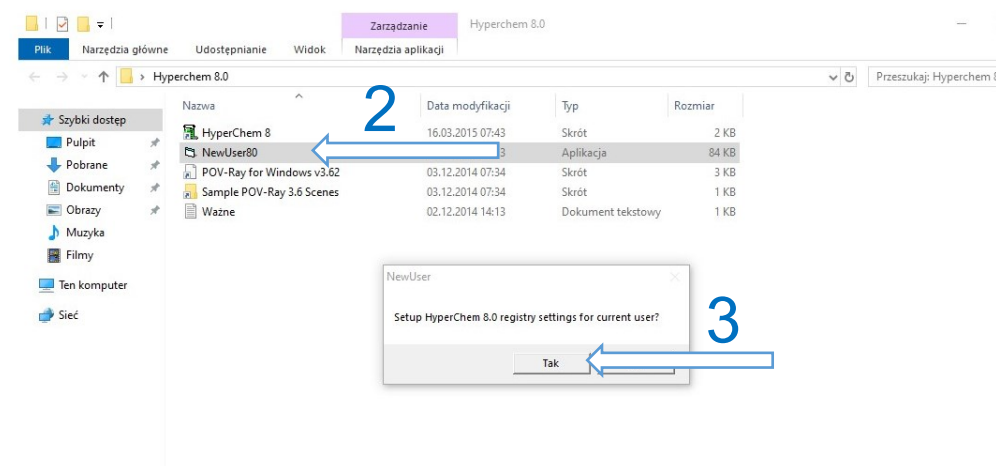
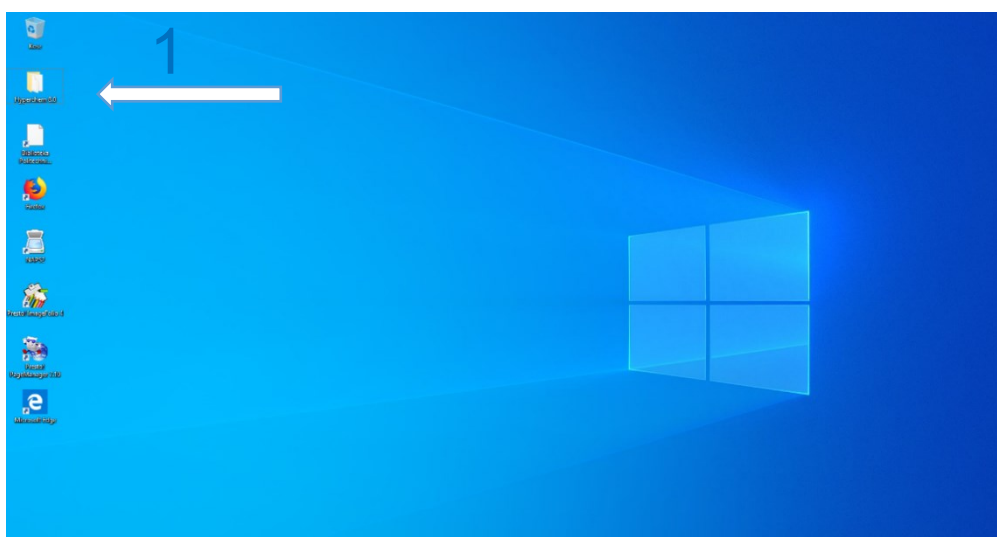
## Charakterystyka oprogramowania – Hyperchem

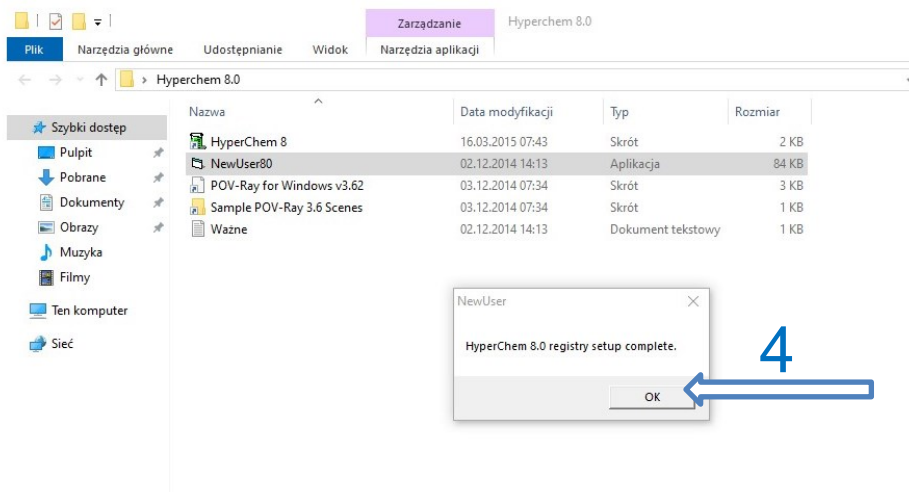
### Zawartość

**HyperChem** jest programem do modelowania molekularnego. Pozwala on na przygotowanie i przeprowadzenie obliczeń oraz wizualizację wyników. Programem tym można: przewidywać właściwości chemiczne i fizyczne cząsteczek, modelować duże układy takie jak białka w polach siłowych, badać mechanizmy oddziaływań oraz mechanizmy reakcji chemicznych, a także symulować widma spektroskopowe (UV, IR, NMR). Program pozwala na prowadzenie obliczeń przy pomocy popularnych metod stosowanych w obliczeniach teoretycznych: od prostych do mechaniki molekularnej, poprzez półempiryczne, obliczeniowe chemii kwantowej (ab initio), a także oparte na funkcjonatach gęstości DFT, jak również metody dynamiki molekularnej.

### Uruchomienie oprogramowania

Przed uruchomieniem programu **Hyperchem 8** należy uruchomić **aplikację New User 80** zlokalizowaną w katalogu HyperChem na pulpicie.





## Dostęp

Istnieje możliwość korzystania z oprogramowania na komputerach bibliotecznych w **CZYTELNI BPP (I. piętro)** i na **Wydziale Technologii Chemicznej** (na komputerach w zakresie IP Politechniki Poznańskiej).

16 stycznia 2024 r.

