

SUPERHRDINOVÉ VĚDY



CHEMICKÉ REAKCE HRDINY ANIMOVANÝCH FILMŮ

Tradičně chemici pracují v laboratořích se zkumavkami a dalším laboratorním sklem. Ve 21. století však hraje v chemii důležitou roli nový experimentální nástroj – počítač. Teoretičtí chemici mohou používat zákony fyziky pro výpočet vlastností atomů a molekul i samotného průběhu chemických reakcí. Problém je v tom, že fyzikální zákony jsou popsány velmi složitými matematickými rovnicemi, které nelze vyřešit pomocí pera a papíru. Naštěstí existují techniky, které poskytují řešení i pro tyto rovnice zahrnující miliardy matematických operací, jako jsou součty a násobení. Takto velký počet operací nelze provést ručně, nicméně počítače dané výpočty zvládají. Používáme je proto k postupnému sledování chemických reakcí, čímž vytváříme filmy o reakcích, které pomáhají odhalit nové reakční cesty.

V chemické reakci se atomy a molekuly srazí jako koule na kulečnicku. Avšak v atomovém

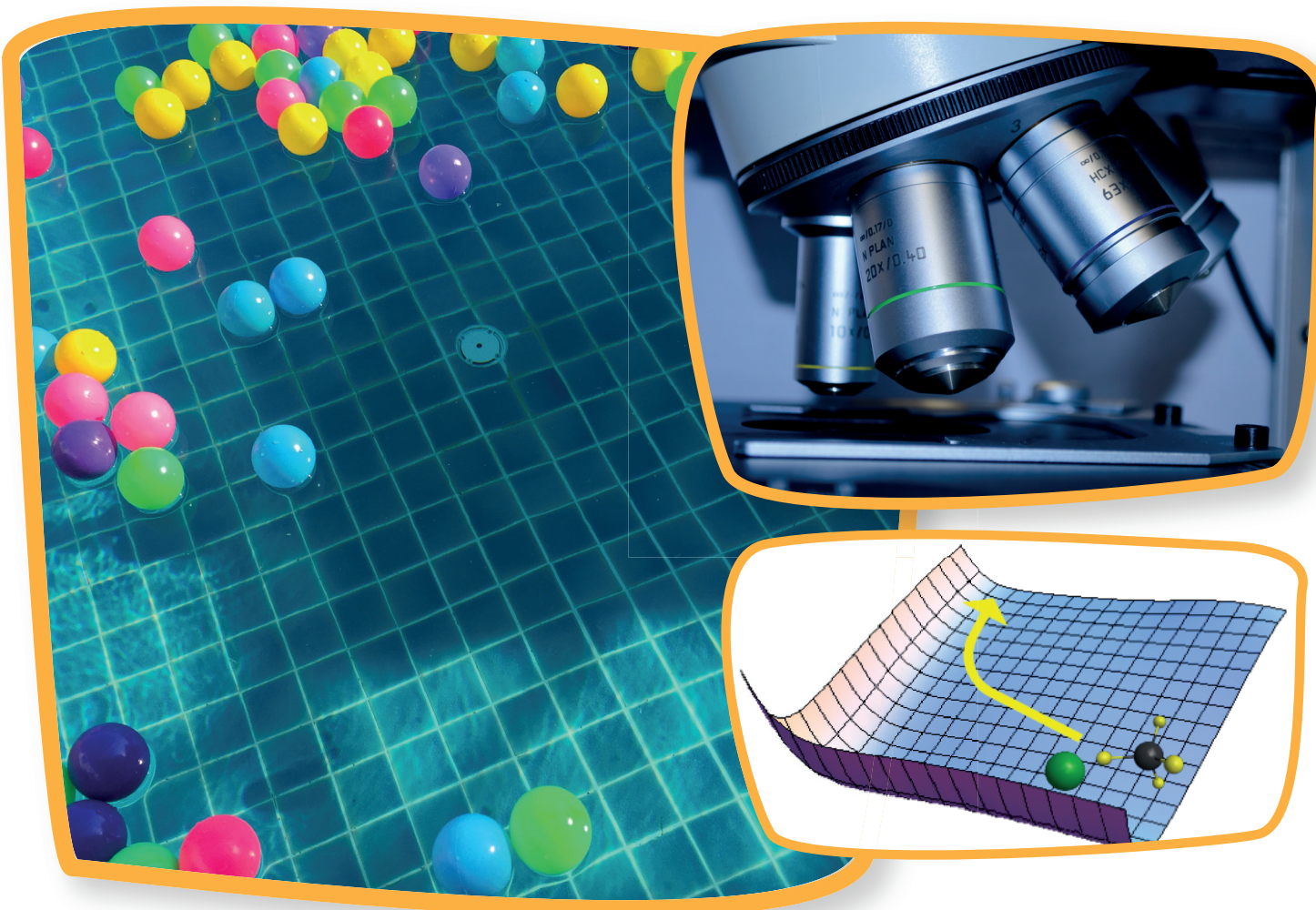
světě není deska stolu plochá, ale má kopce a údolí. Tvar povrchu je určen pohybem a energií elektronů, atomů a molekul. Proto nejprve pomocí moderních počítačových kódů vypočítáme mnoho elektronových energií – takové výpočty mohou trvat tisíce jádroidin. Elektronové energie nám určí různé body povrchu, které jsou reprezentovány matematickou funkcí. Jedním z klíčových kroků našeho výzkumu je, že tyto body můžeme popsat analytickou funkcí. Nyní můžeme na drsném povrchu atomy otáčet a sledovat, jak se pohybují. Atomy mohou zůstat v údolí po dlouhou dobu, ale pokud jim dodáme dostatek energie, mohou také vylézt kopce a navštívit i několik údolí. Cesty atomů na povrchu se nazývají reakční cesty, kopce jsou reakčními bariérami a reaktanty a produkty odpovídají různým údolím. Použitím této metody „koulení kuličkami“ jsme našli několik zajímavých cest pro základní chemické reakce.

MAĎARSKO

KIFÜ
Vládní agentura pro rozvoj
informačních technologií (GITDA)
kifu.gov.hu

Existuje například učebnicová cesta pro tzv. S_N2 reakci, která je důležitým tématem každé třídy organické chemie na univerzitách, avšak v roce 2015 naše počítačová simulace odhalila novou cestu, která prochází jinými údolími a kopci než ta tradiční. Také jsme studovali, jak tvar kopců ovlivňuje reaktivitu, a zkoumali úlohu rychlosti srážky koulí neboli atomů. V moderních laboratořích mohou být reakce sledovány rovněž experimentálně, nicméně tyto experimenty mohou jen detekovat atomy a molekuly v údo-

lich. Proto jsou naše počítačové simulace nezbytné k odhalení úplného obrazu cest chemických reakcí. V současné době jsme dospěli do fáze, kdy mohou počítače předpovědět, a dokonce i kontrolovat výsledek reakcí. V některých případech výpočty odhalují problémy s experimenty. Proto ve 21. století nejsou počítače používány pouze ke hraní her a sledování bankovních převodů. Počítačové programy se v chemii staly užitečným nástrojem.



Czakó Gábor

Výzkumná skupina pro výpočty reakcí, Katedra fyzikální chemie a materiálů, Ústav chemie, Univerzita Szeged, Rerrich Béla tér 1, Szeged H-6720, Maďarsko

Chceš vědět více?

superheroes4science.eu
facebook.com/superheroes4science
instagram.com/superheroes4science

Projekt Superheroes 4 Science byl podpořen
Mezinárodním visegrádským fondem.

www.visegradfund.org

• Visegrad Fund