

SZUPERHŐSÖK A TUDOMÁNY SZOLGÁLATÁBAN



SZÁMÍTÓGÉPES ANIMÁCIÓS FILMEK KÉMIAI REAKCIÓKRÓL

A kémikusok hagyományosan kémcsövekkel és lombikokkal dolgoznak a laboratóriumokban. A 21. században azonban a számítógép egy új „kísérleti eszköz”, amely fontos szerepet játszik a kémiában. Az elméleti kémikusok a fizika törvényeinek felhasználásával kiszámíthatják az atomok, molekulák és kémiai reakciók tulajdonságait. A probléma az, hogy ezek a fizikai törvények olyan bonyolult matematikai egyenleteket eredményeznek, amelyek papíron ceruzával nem megoldhatók. Szerencsére vannak olyan módszerek, amelyek milliárdnyi matematikai műveleten, például összeadáson és szorzáson keresztül megoldásokat adnak ezekre az egyenletekre. Ilyen nagyszámú művelet kézzel nem végrehajtható, de a számítógépek el tudják végezni ezeket a számításokat. Mi is számítógépekkel követjük a reakciókat lépésről lépésre, ezáltal mozifilmeket készítünk róluk, amik segítenek új reakcióutak felfedezésében. Egy kémiai reakció során atomok és molekulák ütköznek, mint a golyók egy biliárdasztalon. Az

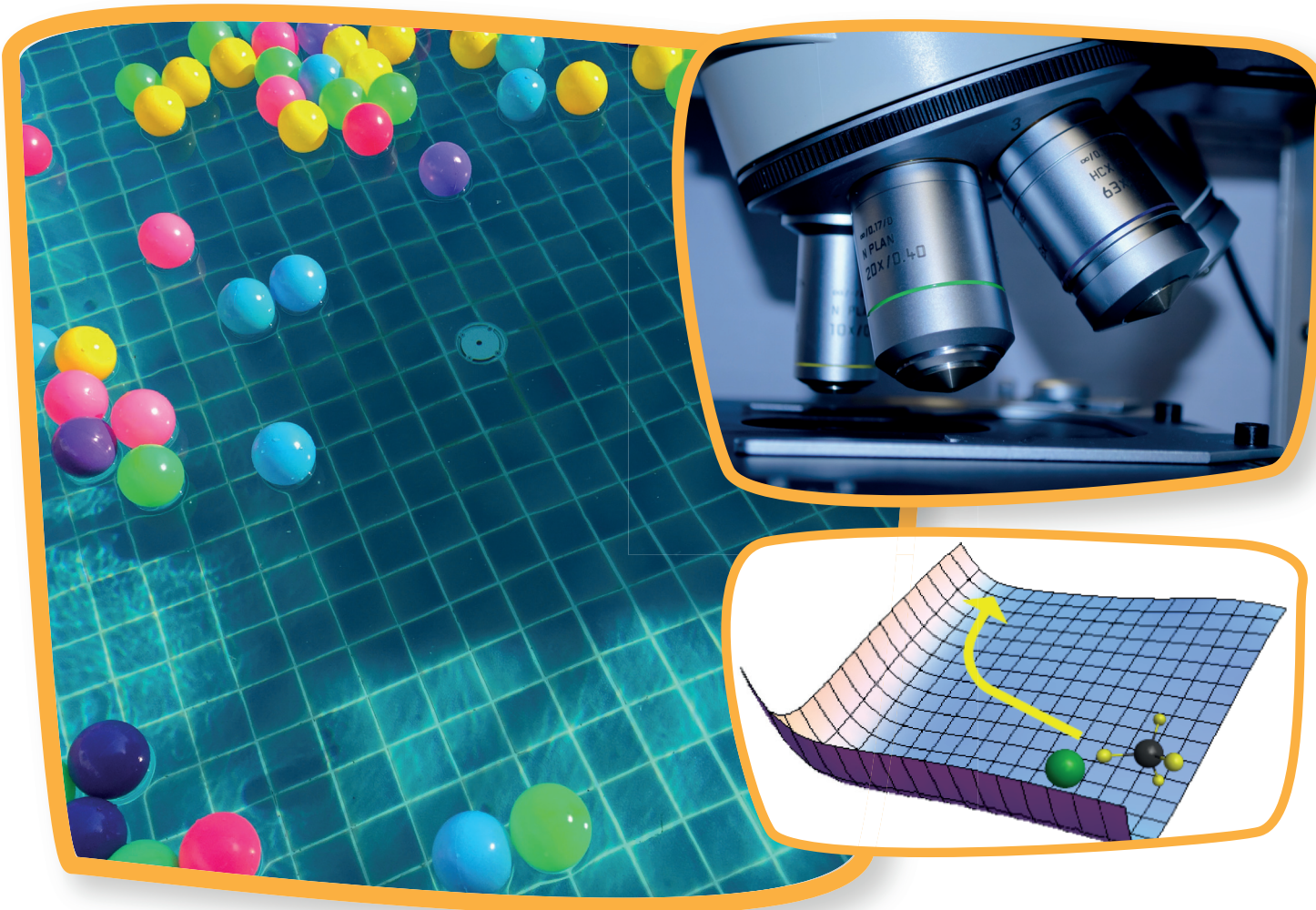
atomi világban azonban az asztal felülete nem síma, hanem hegyes völgyes. A felület alakját az atomok és molekulák elektronjainak mozgása és energiája határozza meg. Ezért először modern számítógépes programokkal és több ezer CPU óra felhasználásával az atomok sok lehetséges elrendeződésénél kiszámítjuk az elektronok energiáját. Ezek az elektronenergiák adják a felület pontjait, amit egy matematikai függvénnyel közelíthetünk. A kutatómunkánk egyik kulcsa, hogy ezeket a felületeket egy analitikus függvénnyel tudjuk leírni. Most már guríthatjuk az atomokat ezen a göröngyös felületen, és figyelhetjük, hogyan mozognak. Lehet, hogy az atomok hosszú ideig egy völgyben tartózkodnak, de ha elég energiát adunk nekik, akkor megmászhatják a hegyeket is, és több völgyet is meglátogathatnak. Az atomok útját a felületen reakcióútnak hívjuk, a hegyek a reakciógátak, a reaktánsok és a termékek pedig különböző völgyeknek felelnek meg. Ezzel a „golyógurításos” technikával alapvető kémiai

MAGYARORSZÁG

KIFÜ
Kormányzati Informatikai
Fejlesztési Ügynökség
kifu.gov.hu

reakciók számos érdekes útját találtuk meg. Például, az úgynevezett S_N2 reakcióknak létezik egy tankönyvi reakcióútja, ami minden egyetemi szerves kémia órán fontos szerepet kap. Mégis 2015-ben a számítógépes szimulációink egy új reakcióutat tártak fel, ami más hegyeken és völgyekben megy keresztül, mint a tradicionális reakcióút. Szintén tanulmányoztuk a hegyek alakjának hatását a reaktivításra, illetve vizsgáltuk a golyók (atomok) ütközési sebességének szerepét is. A modern laboratóriumokban a reakciókat kísérletileg is követik, azonban ezek a

mérések csak a völgyekben tudják detektálni az atomokat és molekulákat. Ezért a számítógépes szimulációink elengedhetetlenek, hogy teljes képet kapjunk a kémiai reakciók tényleges útvonalairól. Mostanra elértünk oda, hogy a számítógépek meg tudják jósolni, sőt irányíthatják a reakciók kimenetelét, illetve néhány esetben a számítógépek rávilágíthatnak a kísérletek hibáira is. Ezért a 21. században a számítógépek nem csak játékokra és banki tranzakciók követésére használhatóak, hanem a kémiában is hasznos eszközökké váltak.



Czakó Gábor

Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék,
Kémiai Intézet, Szegedi Tudományegyetem, Rerrich Béla tér 1, H-6720 Szeged, Magyarország

A Szuperhősök a tudomány szolgálatában
projektet a Visegrádi Alap támogatja.

www.visegradfund.org

Több információra van szüksége?

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

• Visegrad Fund