

SUPERBOHATEROWIE DLA NAUKI



ANIMACJE KOMPUTEROWE REAKCJI CHEMICZNYCH

Chemicy tradycyjnie pracowali w laboratoriach, korzystając z probówek testowych i kolb. Jednak w XXI wieku nowe "narzędzie eksperymentalne" – komputer, odgrywa ważną rolę w chemii. Chemicy teoretyczni mogą wykorzystywać prawa fizyki do obliczania właściwości atomów, cząsteczek i reakcji chemicznych. Problem polega na tym, że te prawa fizyczne dostarczają bardzo skomplikowanych równań matematycznych, których nie da się rozwiązać za pomocą papieru i długopisu. Na szczęście istnieją metody, które dają rozwiązania tych równań poprzez miliardy operacji matematycznych, takich jak dodawanie i mnożenie. Tak dużej liczby operacji nie można wykonać ręcznie, jednak komputery mogą wykonywać takie obliczenia bez problemu. Używamy komputerów do śledzenia reakcji chemicznych krok po kroku, tworząc następnie animacje komputerowe, które pomagają odkryć nowe ścieżki zdarzeń. W reakcji chemicznej atomy i cząsteczki zderzają się jak kule na stole bilaradowym. Jednak w świecie atomów, powierzch-

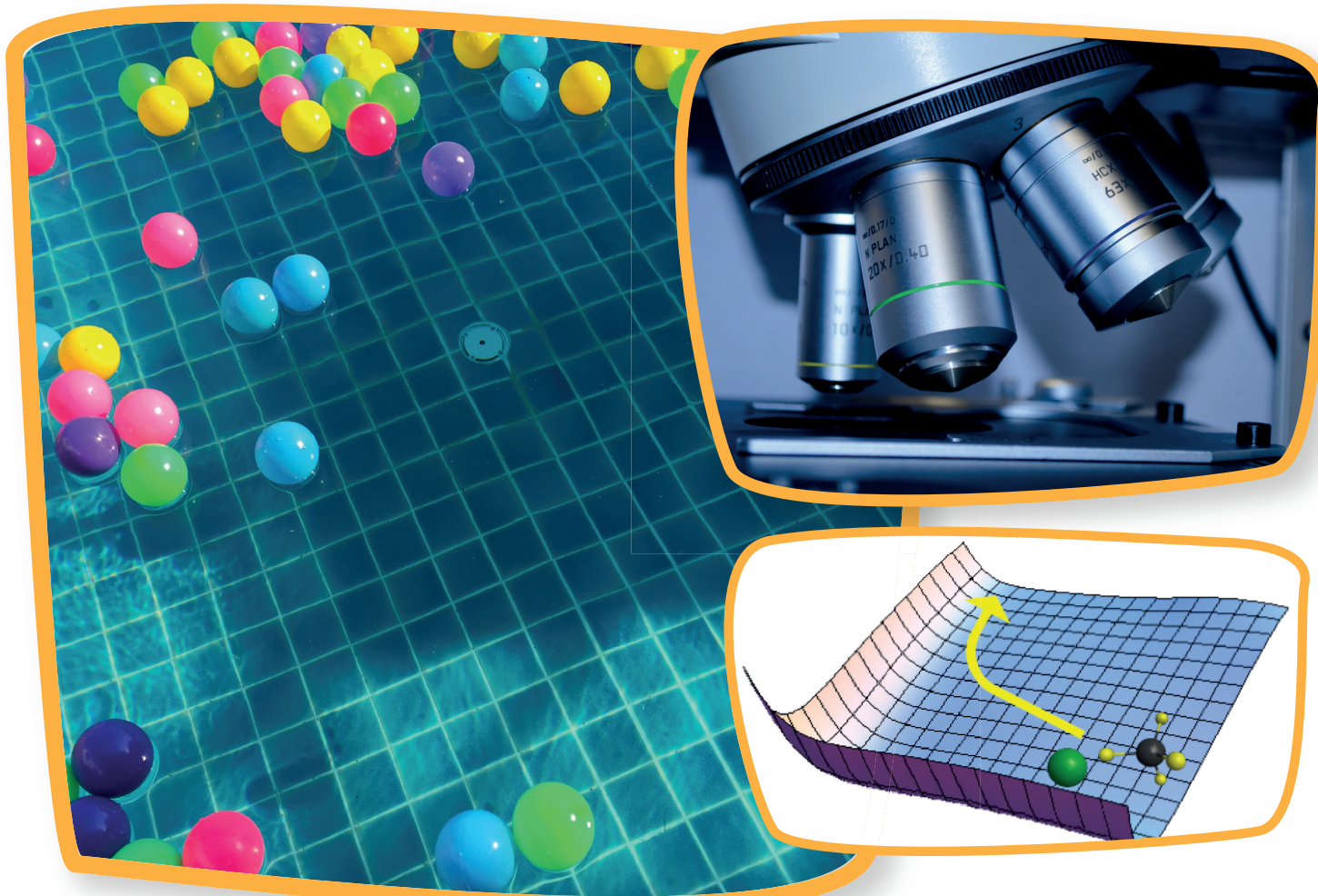
nia stołu nie jest płaska, ale ma wzniesienia i doliny. Kształt powierzchni zależy od ruchu i energii elektronów atomów i cząsteczek. Dlatego najpierw obliczamy wiele energii elektronowych przy użyciu nowoczesnego oprogramowania komputerowego, co może zająć tysiące godzin pracy procesora. Te elektronowe energie wyznaczają punkty powierzchni, które mogą być reprezentowane przez funkcję matematyczną. Jednym z kluczowych kroków w naszych badaniach jest to, że możemy opisać powierzchnie za pomocą funkcji analitycznej. Teraz możemy już "toczyć" atomy na nierównej powierzchni i możemy obserwować też, jak się poruszają. Atomy mogą długo pozostawać w dolinie, ale jeśli damy im wystarczająco dużo energii, mogą również wspinać się na wzniesienia i odwiedzać doliny. Ścieżki atomów na powierzchni nazywane są ścieżkami reakcji, wzgórza są barierami reakcyjnymi, a substancje i produkty reakcji odpowiadają różnym dolinom. Stosując tę technikę "toczenia piłki", znaleźliśmy kilka interesujących ścieżek dla podstawowych

WĘGRY

KIFÜ
Rządowa Agencja Rozwoju Technologii
Informacyjnych (GITDA)
kifu.gov.hu

reakcji chemicznych. Na przykład, istnieje ścieżka podręcznikowa dla tzw. reakcji S_N2 , która jest jednym z głównych tematów omawianych w ramach chemii organicznej na uniwersytetach, jednak w 2015 roku nasze symulacje komputerowe ujawniły nową ścieżkę, która przebiega przez inne doliny i wzniesienia niż ścieżka tradycyjna. Badaliśmy również wpływ kształtu wzniesień na reaktywność, a także rolę prędkości zderzenia kulek (atomów). W nowoczesnych laboratoriach reakcje mogą być również obserwowane doświadczalnie, jednak eksperymenty te mogą jedynie wykrywać atomy i molekuły w dolinach.

Dlatego też nasze symulacje komputerowe są niezbędne do odkrycia pełnego obrazu przebiegu reakcji chemicznych. W dzisiejszych czasach doszliśmy do etapu, w którym komputery mogą przewidzieć, a nawet kontrolować wyniki reakcji, a w niektórych przypadkach obliczenia mogą ujawnić problemy z eksperymentami. Dlatego w XXI wieku komputery nie są używane już tylko do grania w gry i śledzenia przelewów bankowych, ale programy komputerowe stały się również użytecznymi narzędziami w dziedzinie chemii.



Czakó Gábor

Grupa Badawcza Dynamiki Reakcji Obliczeniowej, Wydział Chemii Fizycznej i Materiałoznawstwa,
Instytut Chemii, Uniwersytet w Szeged, Rerrich Béla tér 1, Szeged H-6720, Węgry

Chcesz wiedzieć więcej?

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

www.visegradfund.org

Projekt Superbohaterowie dla Nauki jest
wspierany przez Fundusz Wyszehradzki.

• Visegrad Fund