

SUPERHRDINOVIA VEDY



POČÍTAČOVÉ ANIMOVANIE FILMOV CHEMICKÝCH REAKCIÍ

Chemici tradične pracovali v laboratóriách so skúmvkami a pokusnými bankami. Od 21. storočia začal dôležitú rolu v chémii hrať počítač ako experimentálny nástroj. Teoretický chemici používajú fyzikálne zákony na výpočet vlastností atómov, molekúl a chemických reakcií. Problémom je, že tieto fyzikálne zákony vedú ku veľmi zložitým matematickým rovniciam, ktoré sa nedajú vyriešiť s perom a papierom. Našťastie existujú techniky, ktoré nájdu riešenia týchto rovníc pomocou miliárd matematických operácií ako sčítanie a násobenie. Také veľké množstvo operácií sa nedá vypočítať rukou, ale môžu byť spočítané počítačmi.

My používame počítače, aby sme chemickú reakciu sledovali krok po kroku. Tým pádom vyrábame filmy o reakciách, ktoré nám umožňujú odhaliť nové reakčné dráhy. V chemických reakciách sa atómy a molekuly zrážajú ako gule na biliardovom stole. Povrch stola vo svete atómov navyše nie je plochý, ale má

kopce a doliny. Tvar povrchu je určený pohybom a energiou elektrónov atómov a molekúl. Preto musíme najprv pomocou moderných počítačových programov vypočítať mnoho elektrónových energií, čo môže trvať aj tisíce CPU hodín. Tieto elektrónové energie určujú body na povrchu, ktoré môžu byť popísané matematickou funkciou. To, že tieto povrchy vieme popísať analytickou funkciou, je jedným z kľúčových krokov nášho výskumu. Potom môžeme guľať atómy po tomto drsnom povrchu a sledovať ako sa pohybujú. Atómy niekedy zostanú dlho v jednej doline, ale ak majú dostatok energie, môžu sa dostať aj na kopec a navštíviť niekoľko dolín.

Dráhy atómov po povrchu sa volajú reakčné dráhy, kopce sú reakčné bariéry, reaktanty a produkty sú rôznymi dolinami. Pomocou tejto techniky "gúľania guli" sme našli niekoľko zaujímavých dráh pre fundamentálne chemické reakcie. Napríklad existuje učebnicová dráha

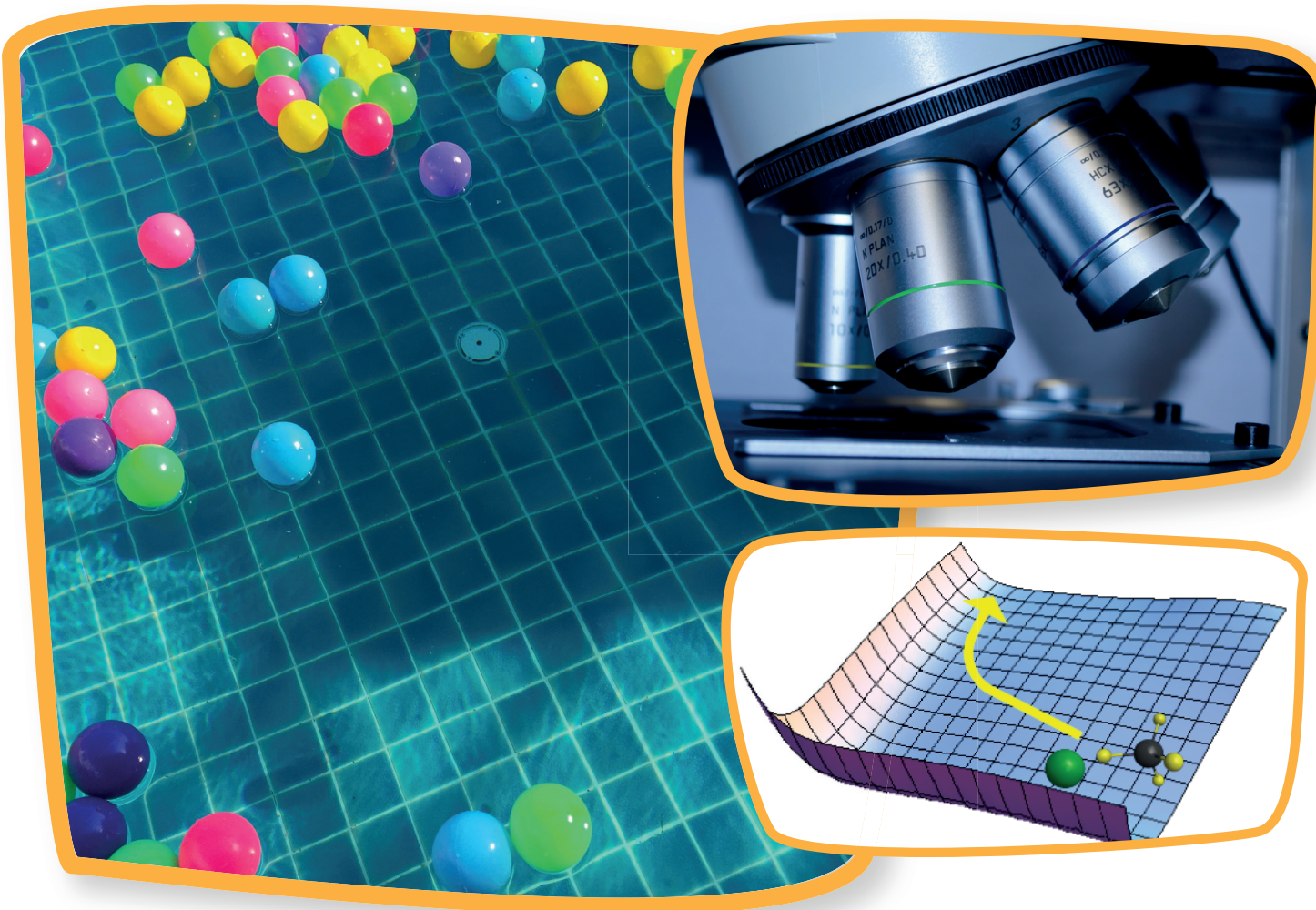
MAĎARSKO

KIFÜ
Vládna Agentúra pre rozvoj
informačných technológií (GITA)
kifu.gov.hu

pre takzvanú SN2 reakciu, ktorá je významnou témou v každom ročníku organickej chémie na univerzitách, ale v roku 2015 naše počítačové simulácie objavili novú dráhu, ktorá prechádza inými vrchmi a dolinami ako tradičná dráha. Skúmali sme aj, ako tvar vrchov vplyva na reaktivitu a tiež sme prešetrovali rolu kolíznej rýchlosti gúľ (atómov). V moderných laboratóriách sa reakcie dajú sledovať aj experimentálne, ale tieto experimenty môžu zdetegovať len atómy a molekuly v dolinách. Preto sú počítačové

simulácie také užitočné na odokrytie celého obrazu dráh chemických reakcií.

V dnešnej dobe sme dorazili do štádia, keď počítače vedia predpovedať a kontrolovať výsledky reakcií, a v niektorých prípadoch výpočty odhaľujú aj problémy s experimentmi. V 21. storočí sa preto počítače nepoužívajú len na hranie hier a sledovanie bankových prevodov, ale počítačové programy sa stali aj užitočným nástrojom v chémii.



Czakó Gábor

Výskumná skupina výpočtových reakčných dynamík, Oddelenie fyzikálnej chémie a materiálovej vedy, Ústav chémie, Szegedská univerzita, Rerrich Béla tér 1, Szeged H-6720, Maďarsko

Projekt Superheroes 4 Science je podporovaný
Medzinárodným vyšehradským fondom.

www.visegradfund.org

Chceš vedieť viac?

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

Visegrad Fund