

T-exkurze podzim 2013
Počítačová chemie aneb reakce zblízka

T-report

Jan Horáček (jan.horacek@seznam.cz)

17. prosince 2013

Sešli jsme se čtyři. V krásných prostorách kampusu MUNI a místo páteční školy. O chemii toho moc nevím, snad jen to, že tam probíhají nějaké reakce (nedejbože organické), které dle slov středoškolských učitelů "prostě probíhají". Smícháte to a to, přihodíte trochu katalyzátoru, hezky se na směs podíváte a ona zreaguje. Snad. Mě zajímalo, jak to vlastně funguje, proč to tak funguje a proč to nefunguje jinak. Doufajíce v nalezení odpovědí na tyto otázky bez podrobných znalostí o chemii jsem vcházel do učebny, kterou vytápěly převážně počítače. Byla to téměř klasická učební místnost, která byla po dobu dalších 4 hodin centrem našeho bádání.

Během první hodiny jsme se dozvěděli, na čem vlastně naši lektori v Kampusu pracují a co to vlastně je počítačová chemie. Jak už název asi napovídá, jedná se o chemii, která má něco společného s informatikou. Konkrétně využívá vysoký výkon dnešních počítačů například k analýze chemických reakcí. Jedná se tedy vlastně o experimentální chemii přenesenou na monitor, popřípadě na servery. Příslušné algoritmy modelující jednotlivé chemické pochody pak můžeme využít např. k predikci produktů reakcí, jejichž reaktanty jsou rozsáhlé, například i biologické sloučeniny.

My jsme si vyzkoušeli modelovat reakci furanu, resp. cyklopentadienu s akrylonitrilem.

Nejprve jsme si vymodelovali oba reaktanty a produkt v programu Avogadro. Pak jsme provedli optimalizaci jejich prostorové geometrie v programu Gaussian. Pro tento krok bylo nutné seznámit se s počítačovým vybavením učebny, která sice obsahovala klasické PC, ale tyto PC byly spojeny do clusteru a byl na nich nainstalován Linux. Jelikož Gaussian je inteligentní vědecký software, který má sloužit hlavně pro výkonově náročné výpočty, tak samozřejmě nemá grafické rozhraní. Pro některé tak byla práce s konzolí novinkou. Nutno podotknout, že poměrně velkou část času nám zabralo seznámení se se softwarem a obecně prostředím UNIX, na což naštěstí lektori pamatovali a tak připravili podklady i pro tuto činnost.

Celá práce se tak vlastně skládala z naklikání molekuly v 3D editoru, jejím exportu do souboru a zpracování tohoto souboru programem pro optimalizaci geometrie. Takto pro oba dva produkty a pro reaktant, celkem tedy 3 molekuly.

Dalším krokem bylo roztržení příslušných vazeb produktu, tzv. driving. Reakci jsme tedy vlastně modelovali opačným směrem. Připravili jsme si soubor, ve kterém jsme definovali všechny náležitosti potřebné pro to, aby program Gaussian byl schopen simulovat roztržení molekuly (zejména jsme definovali, které vazby mají být roztrženy). Výsledkem byla molekula v tzv. tranzitním stavu, což je stav, ze kterého může molekula vytvořit jak

reaktanty, tak i produkt. Z tranzitního stavu energie molekuly vždy klesá (ať už směrem k reaktantům, nebo k produktu), proto je molekula v tranzitním stavu značně nestabilní. Jedná se o jakýsi "přechodový" stav mezi reaktanty a produkty.

Molekulu v tranzitním stavu jsme nechali opět geometricky zoptimalizovat. Výstupem byla energie molekuly v tomto stavu. Z drivingu jsme dále získali tzv. předreakční komplex, což je molekula (resp. molekuly) ve stavu před reakcí. Odečtením energie této sloučeniny od energie tranzitního stavu získáme aktivační energii reakce, kterou je potřeba reakci dodat, aby probíhala. Konkrétně je potřeba dodat cca 36.03 kcal pro uvedení produktů do tranzitního stavu. Při přechodu z tranzitního stavu do stavu směrem k produktům je tato energie samozřejmě opět vyzářena, až na 2.57 kcal, které si produkty nechají navíc oproti reaktantům.

Jelikož máme energii produktu a energie reaktantů, lze snadno vypočítat reakční energii, která v mém případě vyšla cca -2.57 kcal. Z toho lze vyvodit, že se jedná o endotermickou reakci, kde energie reaktantů je o 2.57 kcal větší, než energie produktů.

Jak lektori zdůrazňovali, celá počítačová chemie je založena na semiempirických metodách, což vnáší do výsledků poměrně velkou chybu. Výsledná energie tak může nabývat chyby až ± 2 kcal.

Během modelování reakce jsme měli možnost si všechny molekuly vizualizovat, pozorovat, jaké jsou rozdíly před a po optimalizaci jejich geometrie, pozorovat optimalizaci geometrie v reálném čase a pozorovat reakci v reálném čase. To vše mi přijde neskutečně hezké. Jsem velice rád, že jsem měl možnost vidět vizualizaci chemických pochodů.

Na závěr exkurze jsme se dostali do serverovny výpočetní chemie, kde jsme viděli několik RACKů, na kterých probíhá opravdová věda. Výpočetní chemie totiž zpracovává obrovské množství dat a tak i při vysoce optimalizovaných algoritmech a vysokém výpočetním výkonu mohou výpočty trvat třeba i několik dní.

Na exkurzi se mi líbilo, že ukázala, jak hezky lze spojit chemii a informatiku do celku, jehož výstupem je například predikce reakcí, modelování molekul, které ještě nespátřily světlo světa a následné určování jejich vlastností, jako třeba jejich využitelnost v medicíně.

Děkuji našim lektorům, Jakubu Štěpánovi a Tomáši Trnkovi, za ochotu, čas strávený s námi a za odbornou asistenci při řešení problémů. Bylo to super ☺.