

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

1. kapitola

Experiment X molekulové modelování

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kotlářská 2,
61137 Brno

Obsah přednášky

➤ Experiment versus molekulové modelování

úvod do molekulového modelování, metody s jednomolekulárním rozlišením, výhody a nedostatky

➤ Kvantová mechanika

stručný úvod, Bornova-Oppenheimerova aproximace, koncept hyperploch potenciální energie, stručný přehled metod

➤ Hyperplochy potenciální energie

definice, význam, hledání významných bodů, optimalizační metody, hledání lokálních a globálních minim a tranzitních stavů, výpočet termodynamických veličin (enthalpie, entropie, Gibbsova energie)

➤ Molekulová mechanika

silová pole, dalekodosahové interakce, modelování rozpouštědel

➤ Molekulová dynamika

vývoj systému v čase, pohybové rovnice, přehled integračních metod, vlastnosti systému, termostaty, barostaty

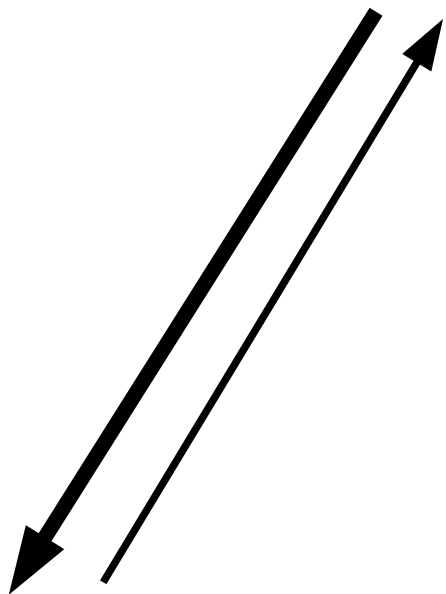
➤ Speciální metody

Monte Carlo simulace, hrubozrné modely

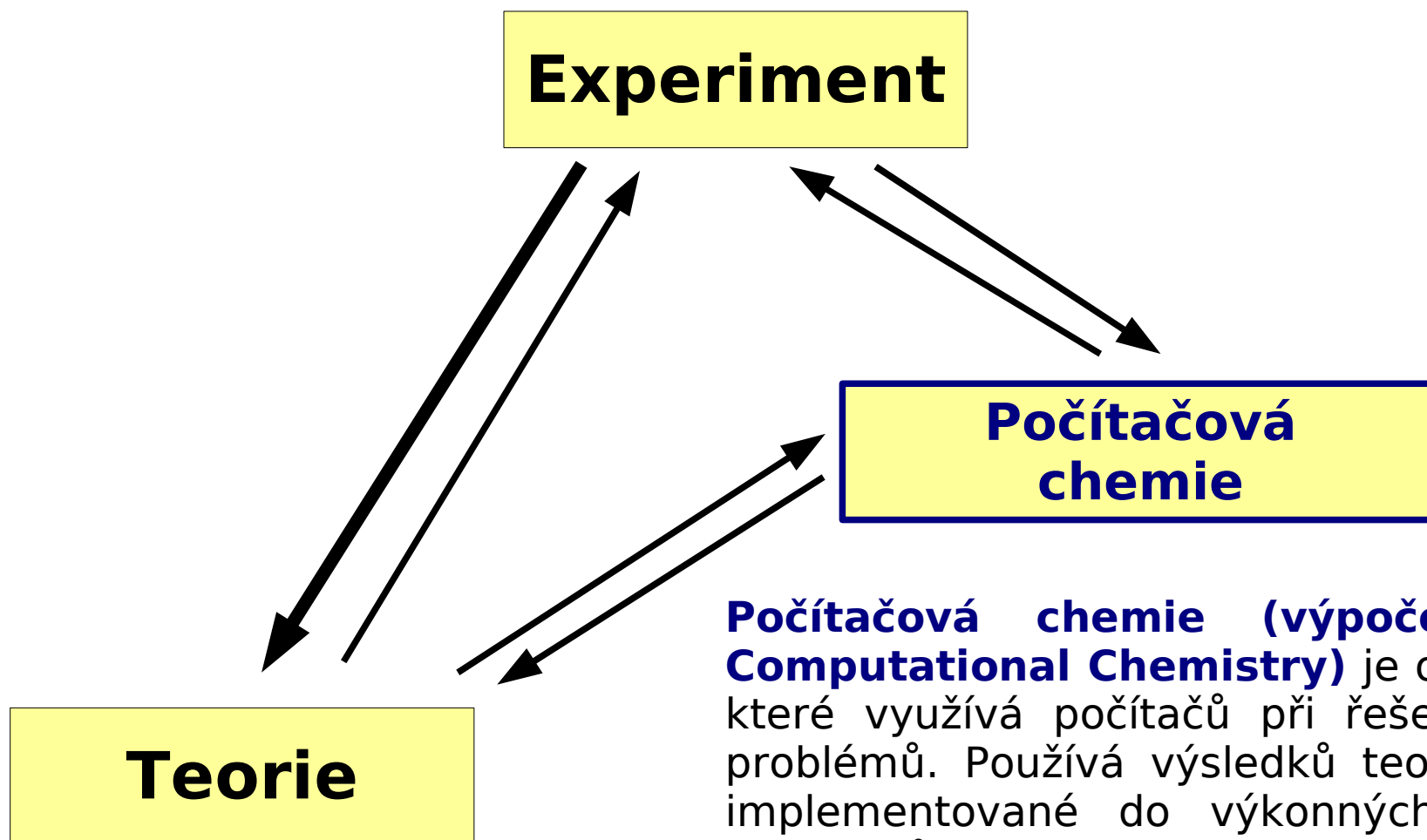
Pohled na svět

Experiment

Teorie



Počítačová chemie



Počítačová chemie (výpočetní chemie, Computational Chemistry) je odvětví chemie, které využívá počítačů při řešení chemických problémů. Používá výsledků teoretické chemie implementované do výkonných počítačových programů určených k výpočtům struktury, vlastností a reaktivity molekul a pevných látek.

<http://www.wikipedia.org>



Počítačová chemie

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?



Počítačová chemie

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

Bohužel NE :-)

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

Proč?

- neúplná teorie
- nedostatečný výkon současných i budoucích(?) počítačů

Bohužel NE :-)

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

Proč?

- neúplná teorie
- nedostatečný výkon současných i budoucích(?) počítačů

Bohužel NE :-)

Řešení ...

- použití **aproximací** umožňujících řešení problému za použití dostupné výpočetní kapacity

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

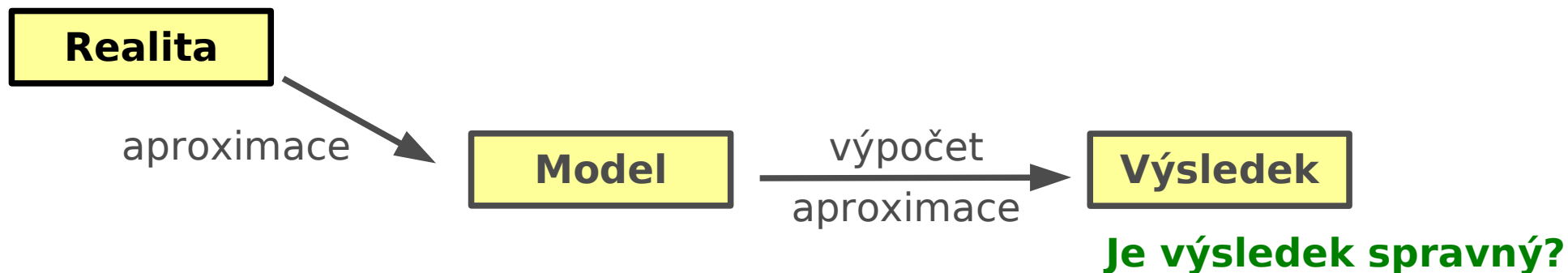
Proč?

- neúplná teorie
- nedostatečný výkon současných i budoucích(?) počítačů

Bohužel NE :-)

Řešení ...

- použití **aproximací** umožňujících řešení problému za použití dostupné výpočetní kapacity



Počítačová chemie

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

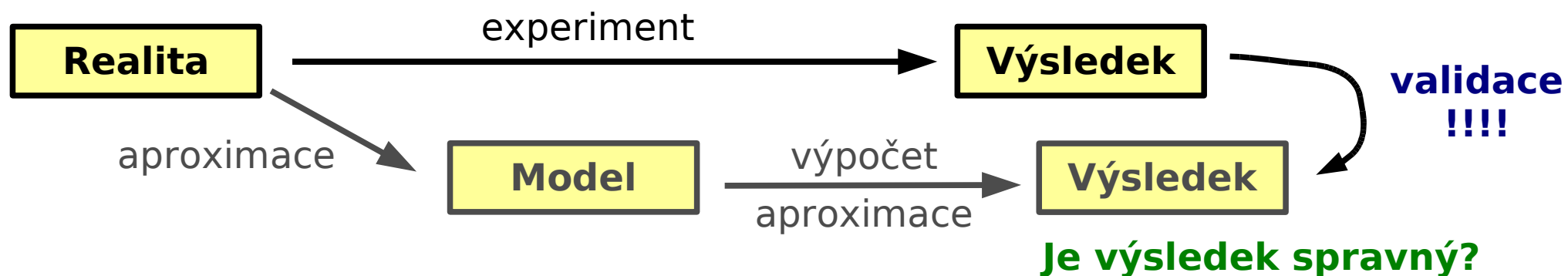
Proč?

- neúplná teorie
- nedostatečný výkon současných i budoucích(?) počítačů

Bohužel NE :-)

Řešení ...

- použití **aproximací** umožňujících řešení problému za použití dostupné výpočetní kapacity



Počítačová chemie

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

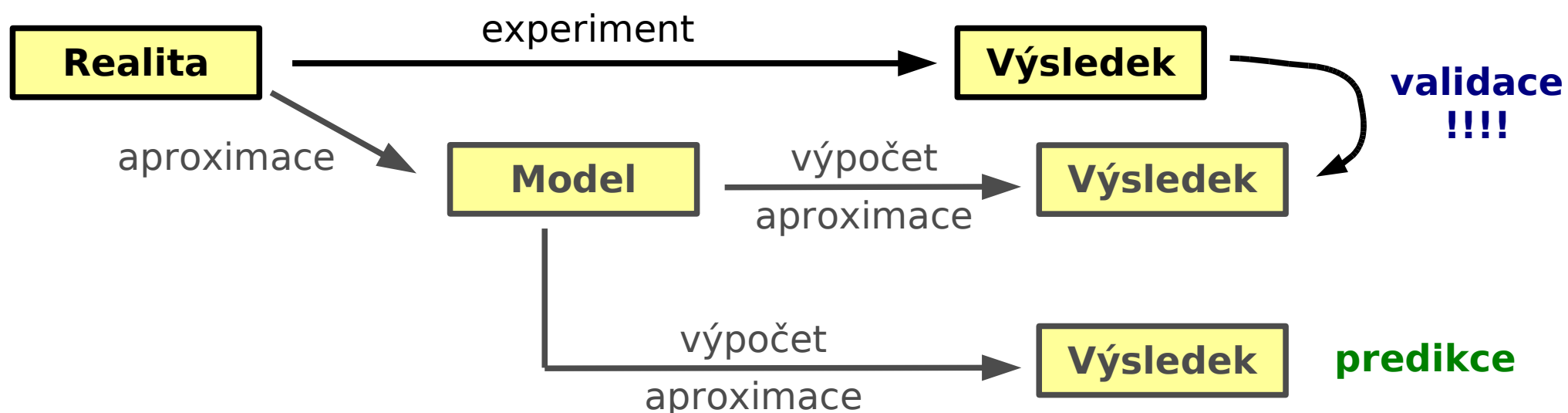
Proč?

- neúplná teorie
- nedostatečný výkon současných i budoucích(?) počítačů

Bohužel NE :-)

Řešení ...

- použití **aproximací** umožňujících řešení problému za použití dostupné výpočetní kapacity



Praktický přístup

lidé



Zdenek Kříž

Martin Prokop



Petr Kulhánek

Stano Kozmon



Honza Adam

Navnit

Jirka Wiesner

Zuzka Jiroušková



Jirka Fukal

Honza Alán

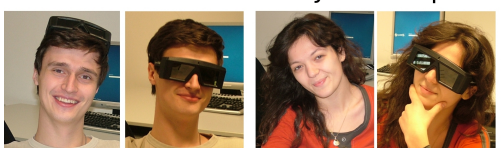
Pepa Pasulka



Zora Štřelcová

Jakub Štěpán

Monika Pěťáková



Alexej Kulaš

Crina Maria Ionescu



Jaroslav Koča
Group Leader

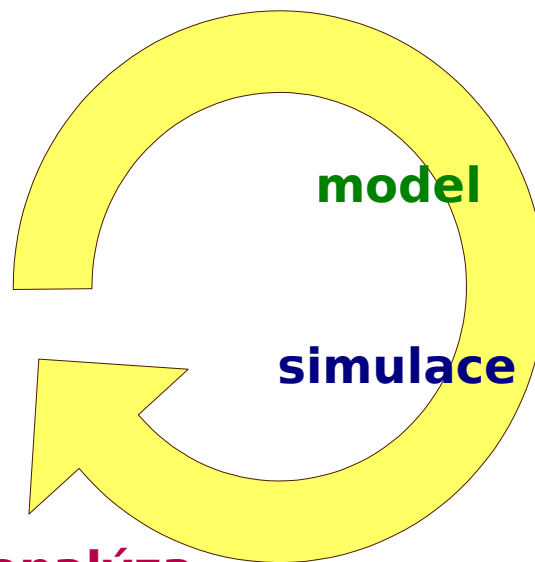
LCC

Laboratory of Computational Chemistry

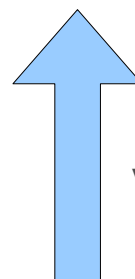
stroje



hypotéza



analýza



validace

experiment

Shrnutí

Počítačová chemie:

- je **interdisciplinární** vědní disciplína kombinující současné poznatky z fyziky, chemie, matematiky a informatiky k počítačovému studiu **struktury, vlastností a reaktivity** molekulárních systémů
- používá **aproximativních** modelů a výpočetních postupů
- vyžaduje **validaci (kalibraci)** použitých modelů a výpočetní postupů vůči experimentálním datům
- dosahuje **kvalitativních až kvantitativních** výsledků (podle použitých modelů)
- typicky pracuje s **atomovým rozlišením**

Během přednášky se seznámíme s metodami umožňující studium systémů obsahujících až **100 000 atomů** v časové škále **několika nanosekund**.



Validace výpočtů

Příklady

- Srovnání předpovězené struktury se strukturou experimentální
 - 3D struktura (X-ray, docking)
 - tvar (kryogenní elektronová mikroskopie)
 - geometrické parametry
 - vzdálenosti (NMR)
 - radiální distribuční funkce (X-ray rozptyl, rozptyl neutronů)
- Vlastnosti molekul
 - elektronové spektra (UV/VIS spektroskopie)
 - vibrační spektra (IR spektroskopie)
 - dipolový moment
 - difuzní koeficient
 - chemické posuny, spin-spinové interakční konstanty (NMR)
- Srovnání vypočtených a experimentálních termodynamických a kinetických dat
 - enthalpie (isothermální titrační kalorimetrie - ITC)
 - entropie (ITC)
 - volná energie (Gibbsova, Helmholtzova) (ITC, kinetické měření)

Atomové rozlišení

Počítačová chemie

atomové rozlišení od uvedení kvantové teorie

- zpřesňuje modely
- zpřesňuje výpočetní postupy
- dosahuje přesnějších výsledků v kratším výpočetním čase

vývoj v čase

Experiment

atomové rozlišení od zavedení X-ray krystalografie

- zpřesňuje techniky
- zpřesňuje rozlišení

Experimenty s jednomolekulárním rozlišením.

Anglicky: Single Molecule Experiments



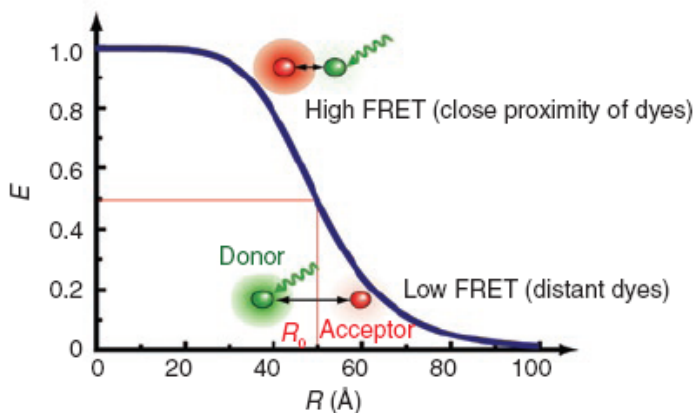
X-ray and NMR strukturní analýza

viz. standardní přednášky :-)

FRET experimenty

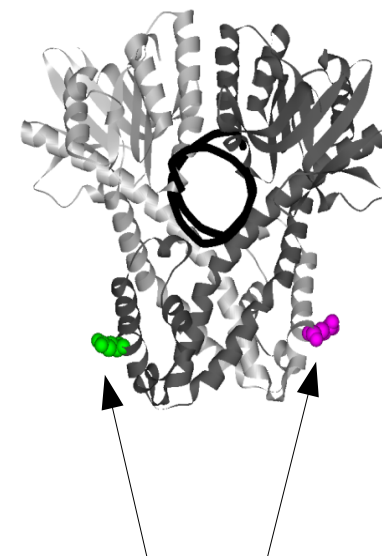
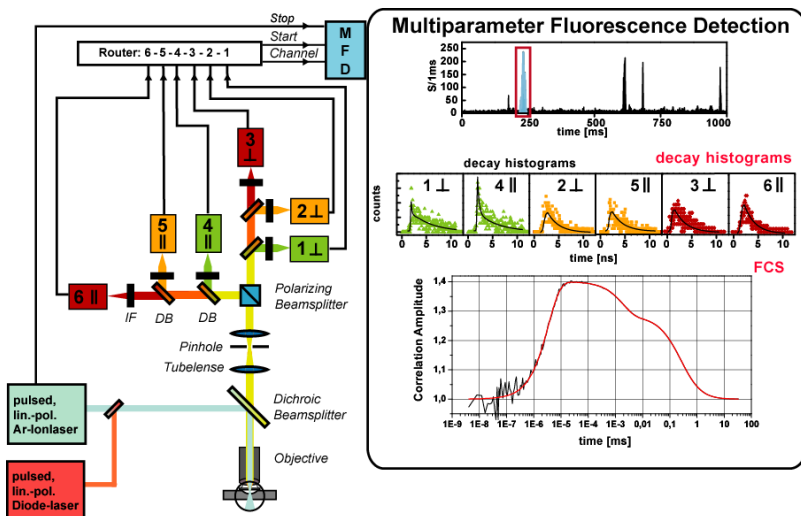
FRET: Fluorescenční rezonanční přenos energie

Princip:



Výsledek:

$$E = \frac{1}{1 + (R/R_0)^6}$$

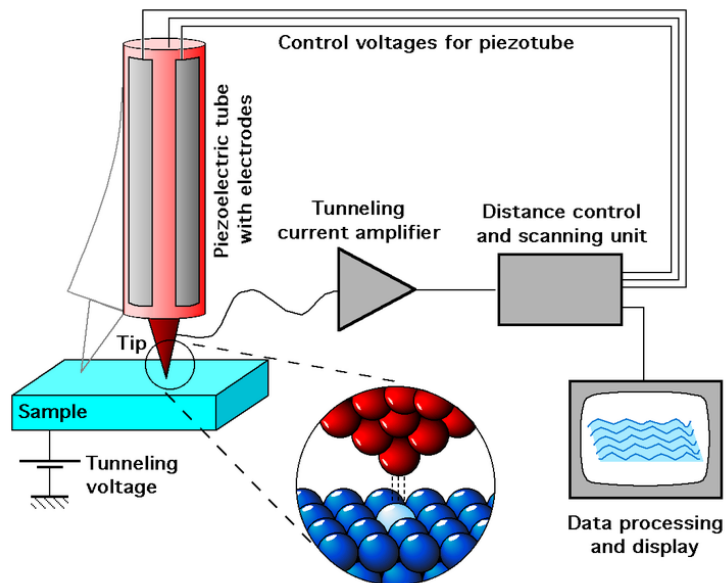


dva chromofory
můžeme určit vzdálenost

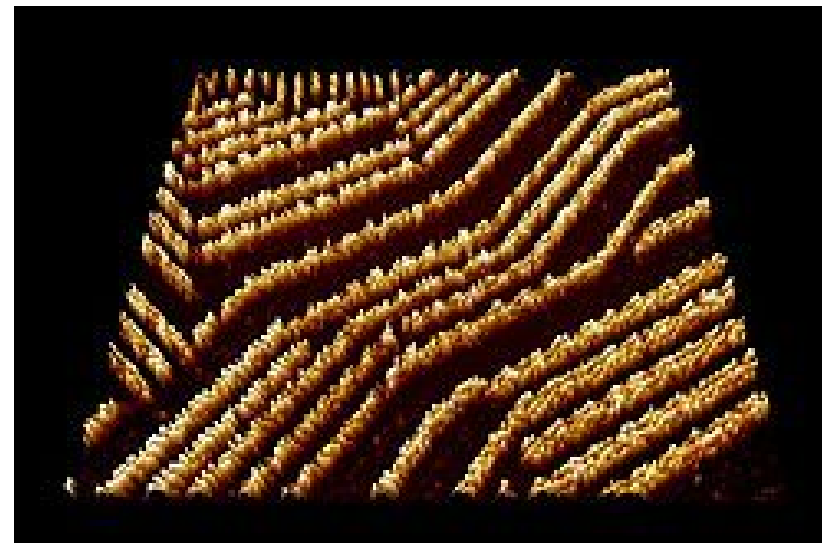
Anglicky: Fluorescence Resonance Energy Transfer

Řádkovací tunelová mikroskopie

Princip:



Výsledek:

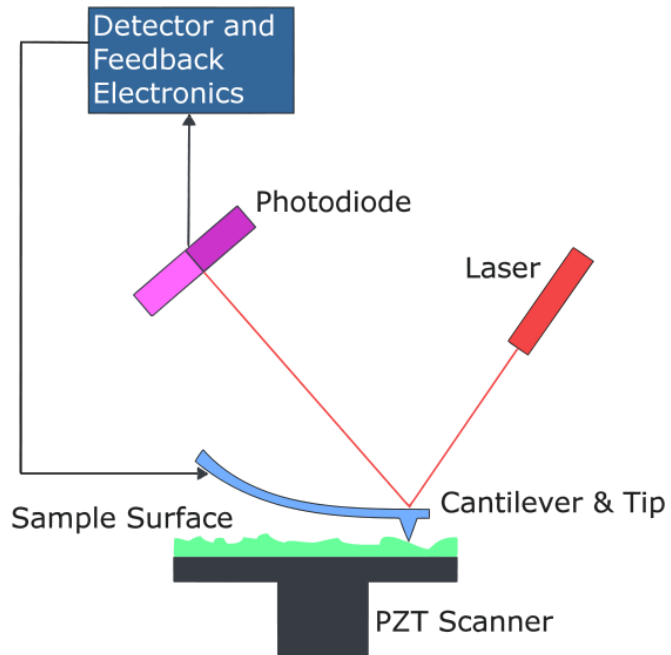


Anglicky: Scanning Tunneling Microscope

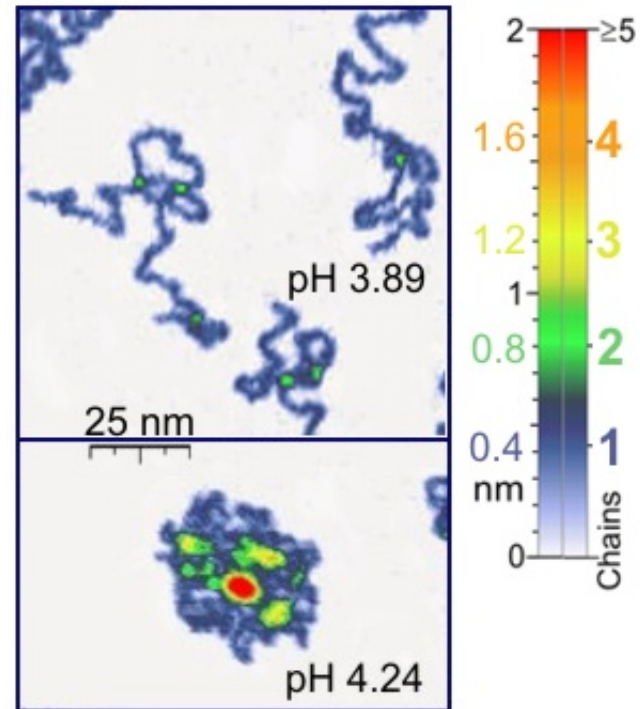
<http://www.wikipedia.org>

Mikroskopie atomárních sil

Princip:



Výsledek:

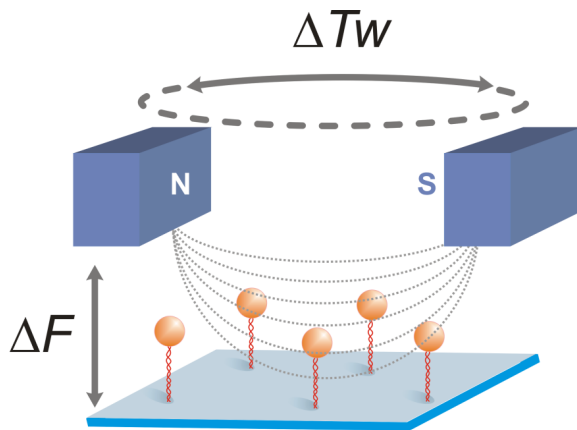
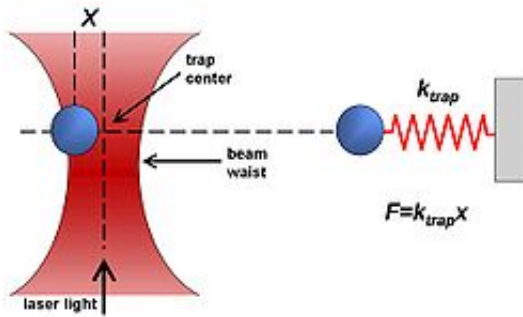


Anglicky: Atomic Force Microscopy (AFM)

<http://www.wikipedia.org>

Magnetické a optické pinzety

Princip:



Výsledek:

<http://www.nat.vu.nl/en/sec/compl/dualdna/index-en.php>

Anglicky: Optical Tweezers
Magnetic Tweezers

<http://www.wikipedia.org>

Shrnutí

Experiment a **počítačová chemie** by měly být kombinovány tak, aby byl získán ucelený a konzistentní pohled na studovaný systém.