

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

2. Výpočetní chemie

Petr Kulhánek

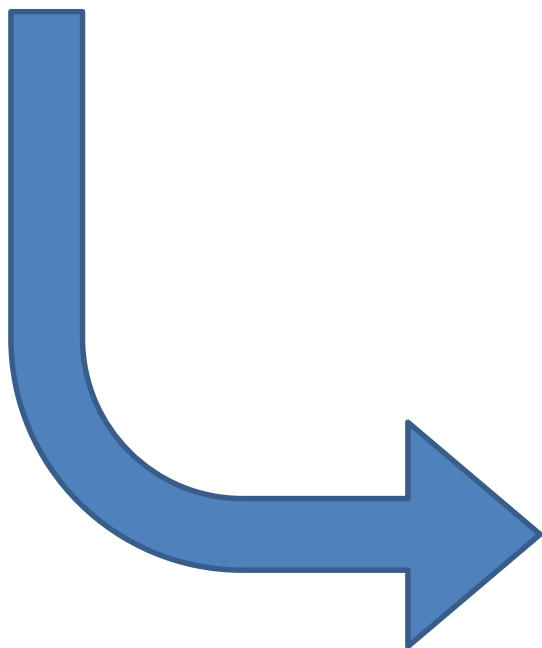
kulhanek@chemi.muni.cz

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

Výpočetní chemie

reálný problém
(chování chemického systému na
makroskopické úrovni)

experiment



molekulární podstata
(chování chemického systému na
mikroskopické úrovni)

Výpočetní chemie

reálný problém
(chování chemického systému na
makroskopické úrovni)

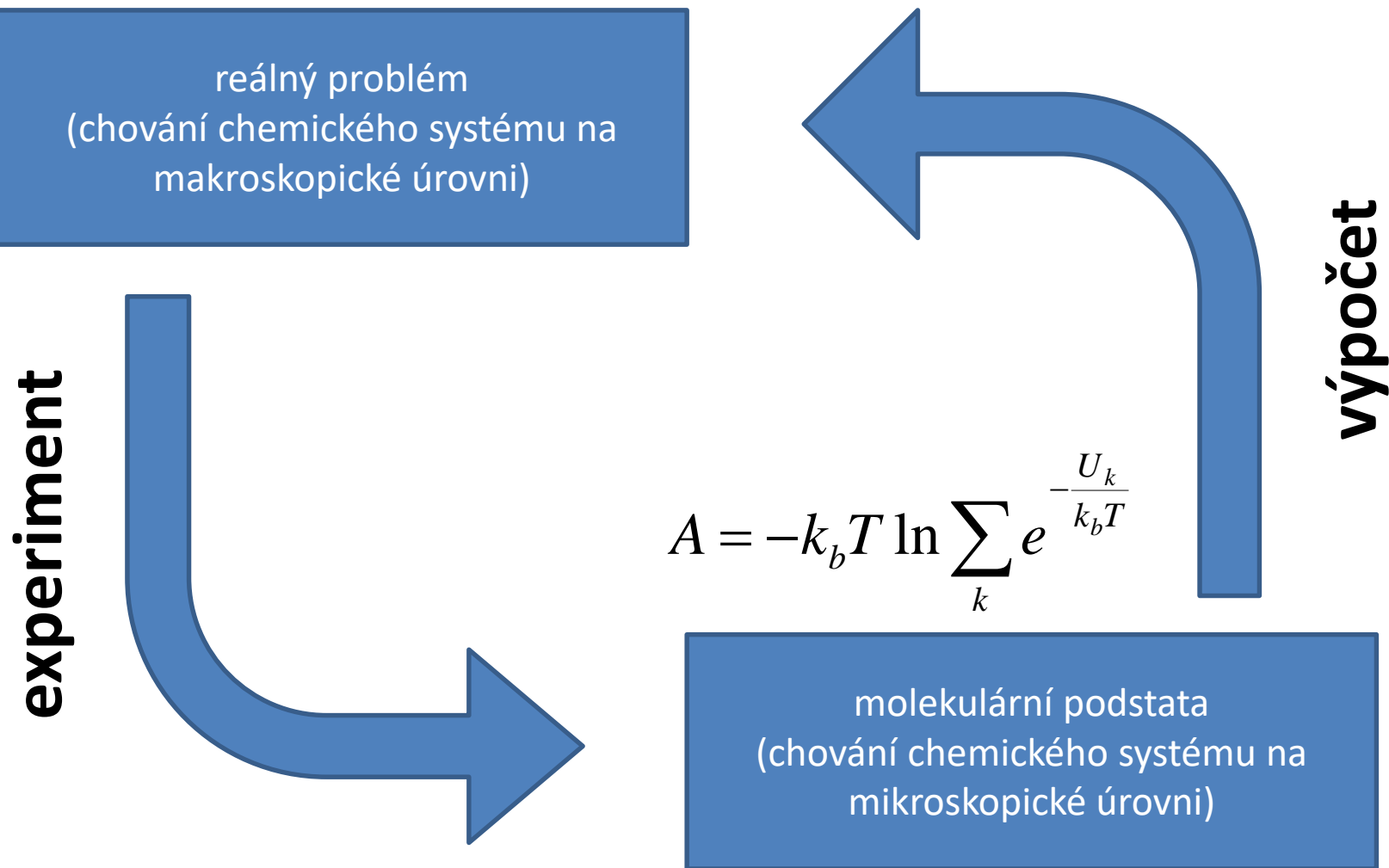
experiment

$$A = -k_b T \ln \sum_k e^{-\frac{U_k}{k_b T}} \quad \text{a další}$$

molekulární podstata
(chování chemického systému na
mikroskopické úrovni)

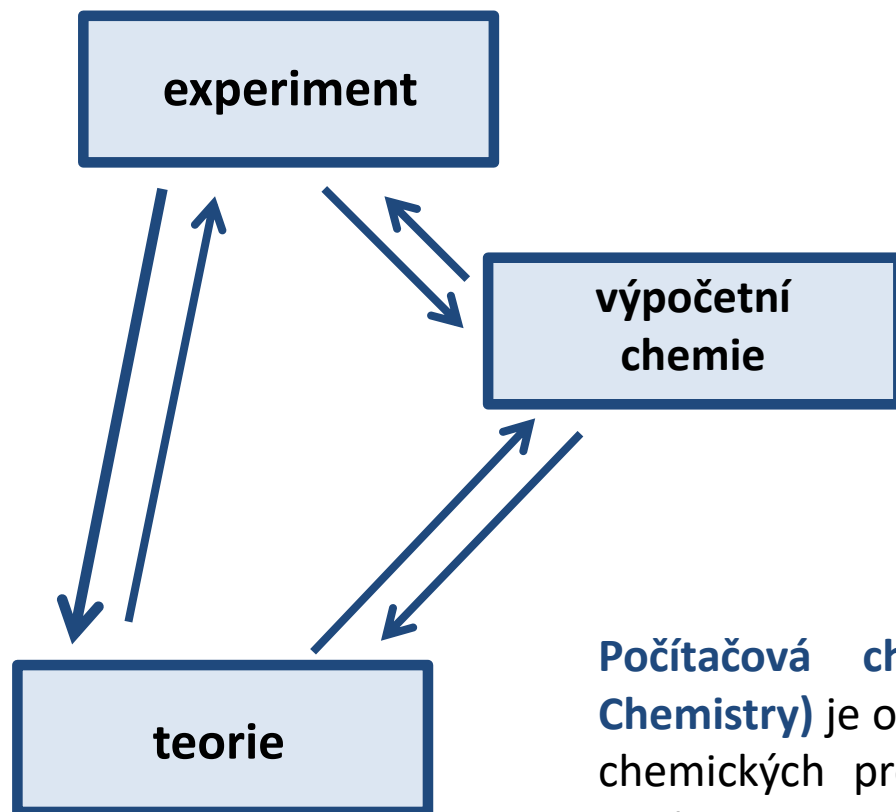
$$\hat{H}\psi_k(\mathbf{r}) = E_k\psi_k(\mathbf{r}) \quad m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\frac{\partial V(\mathbf{R})}{\partial r_i}$$

Výpočetní chemie



$$\hat{H}\psi_k(\mathbf{r}) = E_k\psi_k(\mathbf{r}) \quad m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\frac{\partial V(\mathbf{R})}{\partial r_i}$$

Výpočetní chemie

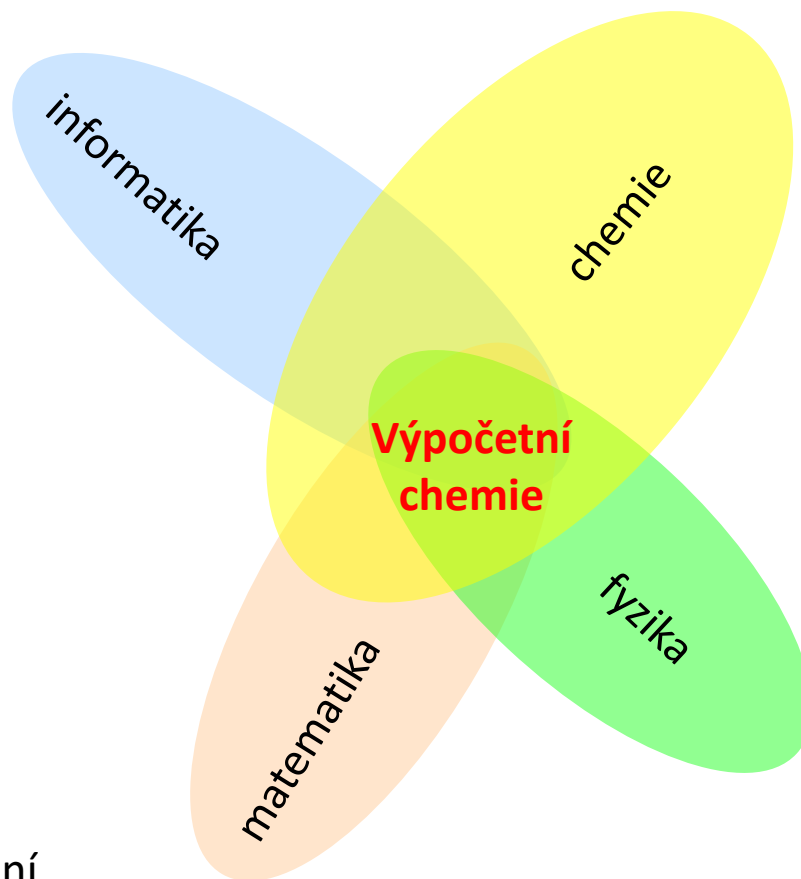


Počítačová chemie (výpočetní chemie, Computational Chemistry) je odvětví chemie, které využívá počítačů při řešení chemických problémů. Používá výsledků teoretické chemie implementované do výkonných počítačových programů určených k výpočtům struktury, vlastností a reaktivity molekul a pevných látek.

<http://www.wikipedia.org>

Multidisciplinární obor

algoritmy, CPU/GPU,
cluster/grid,
symbolické výpočty



(bio)chemické problémy,
experimenty,
ověřování

analytické řešení,
numerická řešení,
aproximace

teorie, aproximace

Realita vs Simulace

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

Úkol I

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

Kolik molekul obsahuje 180 ml
vody při pokojové teplotě?

Kolik počítačové paměti bude zapotřebí pro uložení informací o poloze všech atomů včetně jejich rychlostí za použití reálných čísel s jednoduchou přesností?



Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

Kolik strojového času zabere simulace 1 s vývoje molekulárního systému?

Nejrychlejším molekulárním pohybem je vibrace O-H vazeb s přibližnou periodou 10 fs, která se bude vzorkovat 10 snímky. Výpočet jednoho snímku trvá přibližně 1 ms strojového času.

Realita vs Simulace

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

Bohužel NE :-)

Proč?

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

Řešení ...

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



Realita vs Simulace

Je možné přesně simulovat realitu kolem nás?

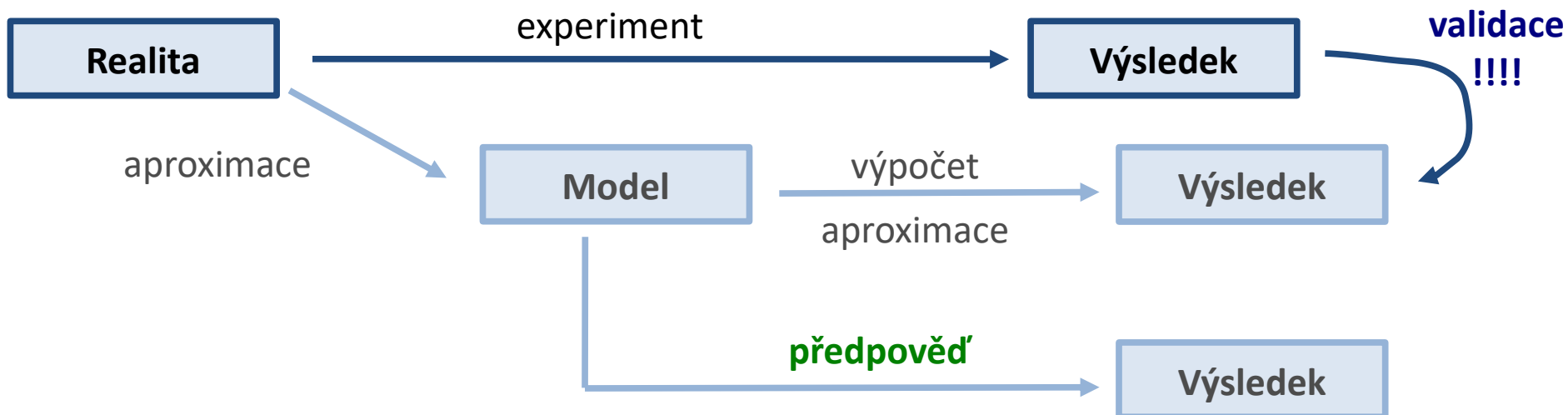
Bohužel NE :-)

Proč?

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

Řešení ...

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



Validace výsledků výpočtů

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)

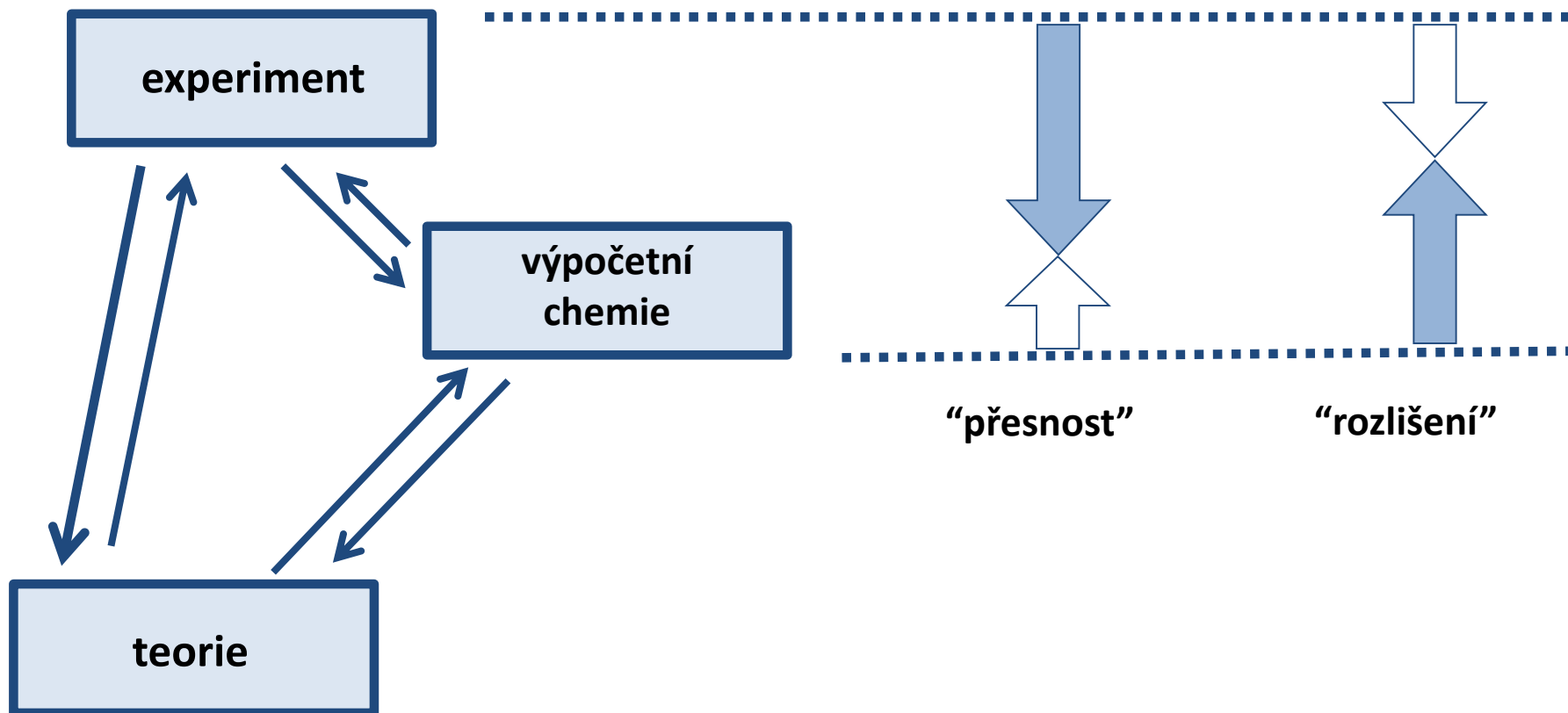
Vlastnosti molekul

- elektronové spektra (UV/VIS spektroskopie)
- vibrační spektra (IR spektroskopie)
- dipolový moment
- difuzní koeficient
- chemické posuny, spin-spinové interakční konstanty (NMR)

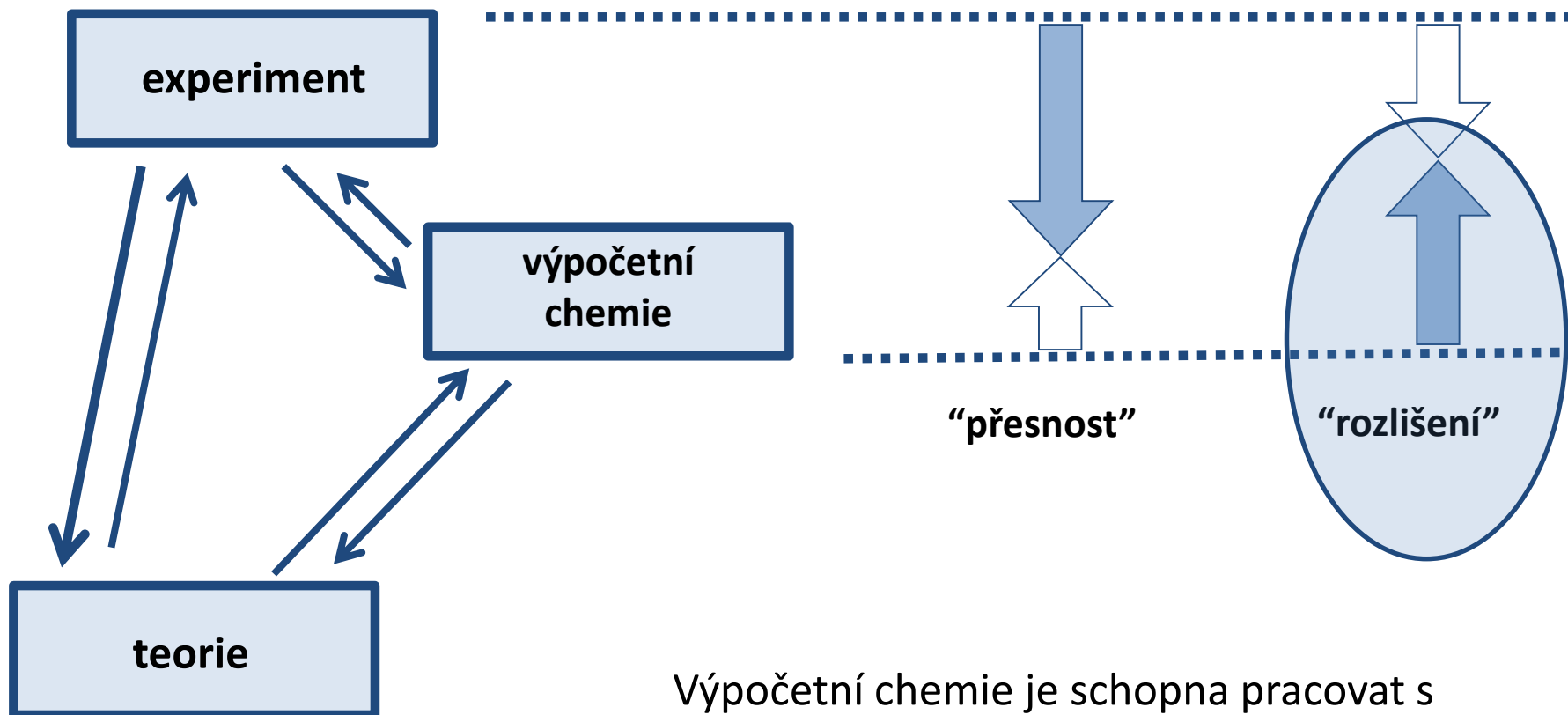
Srovnání vypočtených a experimentálních termodynamických a kinetických dat

- enthalpie (isothermální titrační kalorimetrie - ITC)
- entropie (ITC)
- volná energie (Gibbsova, Helmholtzova) (ITC, kinetické měření)

Přínos výpočetní chemie



Přínos výpočetní chemie



Výpočetní chemie je schopna pracovat s
jednoatomovým rozlišením.

Experiment vs simulace

problém



hypotéza

experimenty

simulace

výsledek

znalost

- realita kolem nás
- rozlišení
- drahé, nebezpečné, příliš složité realizovat

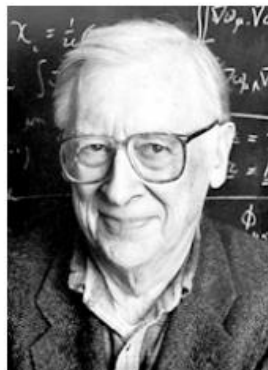


- rozlišení (většinou atomové rozlišení)
- jakékoliv myslitelné uspořádání
- model

Nobelova cena za chemii 1998/2013



Walter Kohn



John A. Pople



© Harvard University
Martin Karplus



Photo: © S. Fisch
Michael Levitt



Photo: Wikimedia
Commons
Arieh Warshel

The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between

Walter Kohn "for his development of the **density-functional theory**" and
John A. Pople "for his development of **computational methods in quantum chemistry**"

Development of Multiscale Models for Complex Chemical Systems

http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/
http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/

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 **ověření (validace/kalibraci)** použitých modelů a výpočetních 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**.