

# C7790

# Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

## 1. Výpočetní chemie

Petr Kulhánek

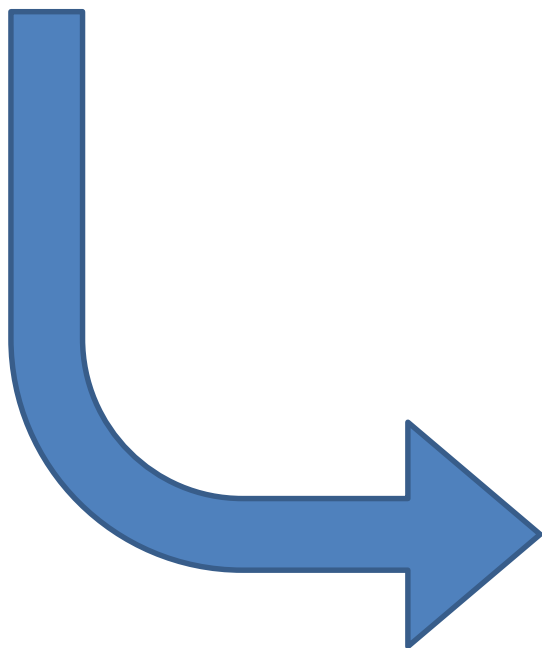
[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto:kulhanek@chemi.muni.cz)

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)

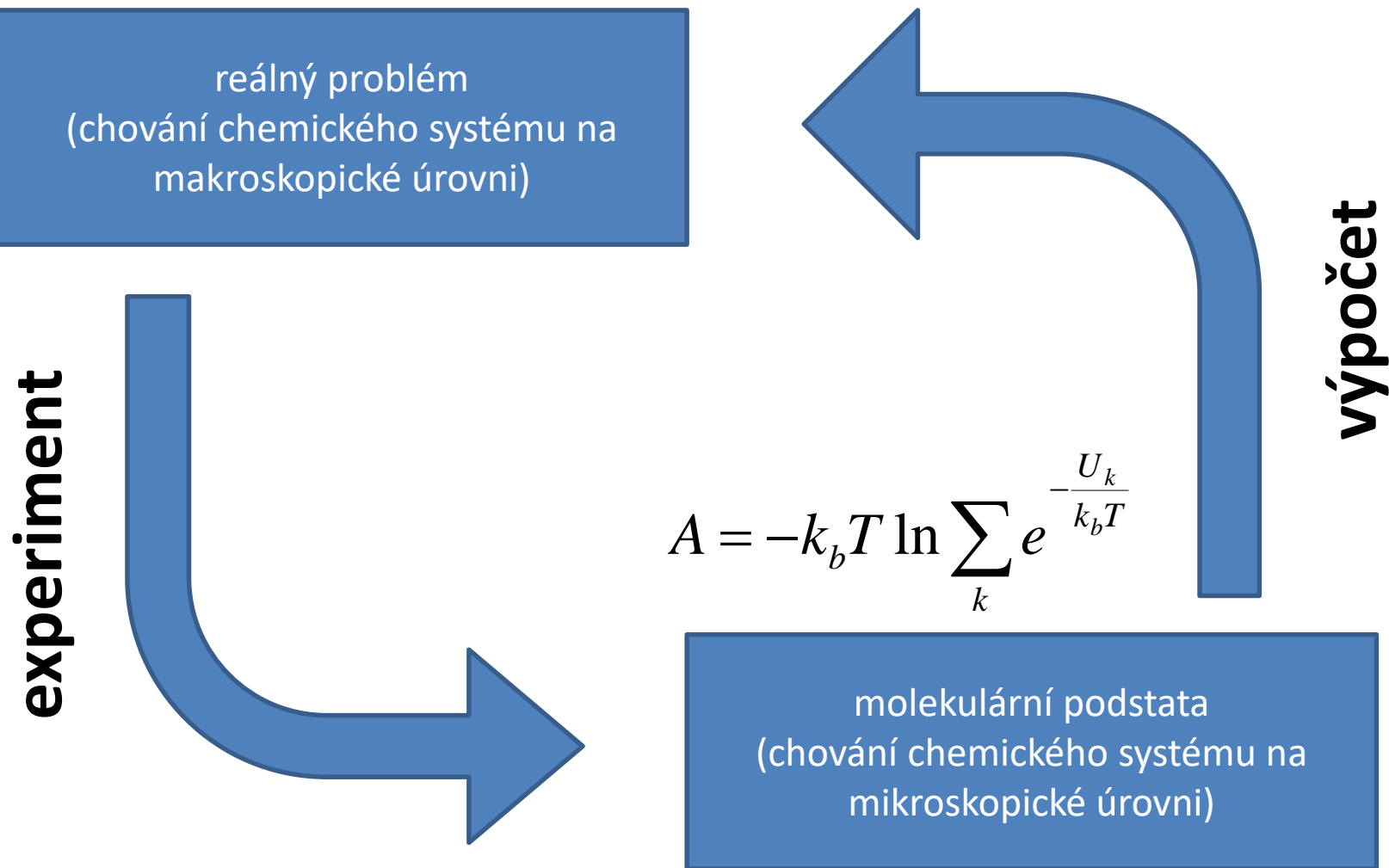
experiment

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

molekulární podstata  
(chování chemického systému na  
mikroskopické úrovni)

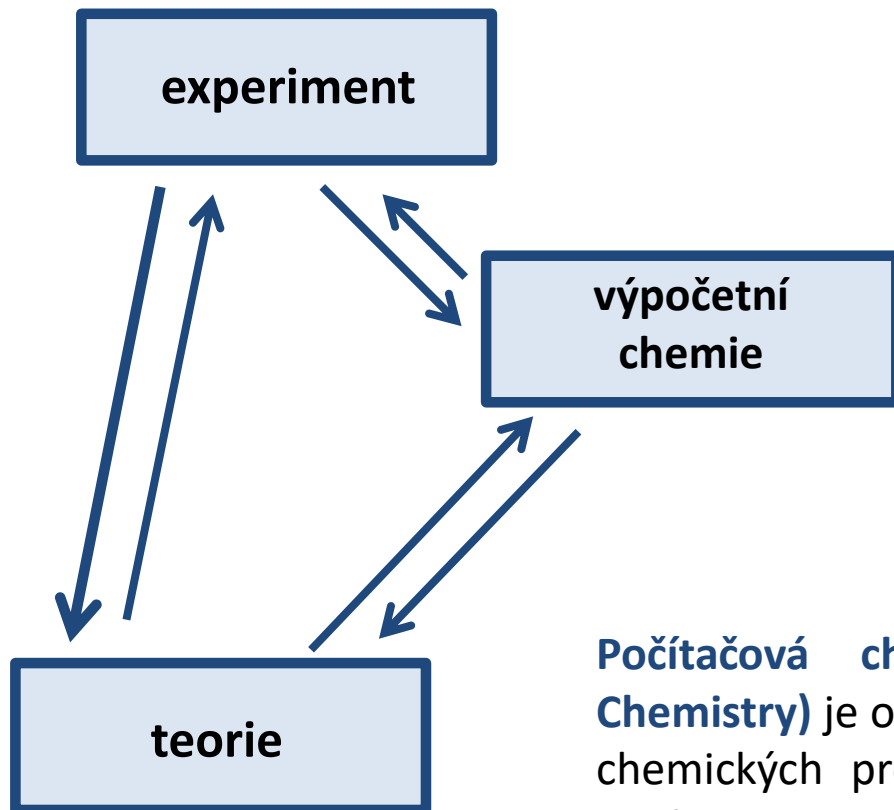
$$\hat{H}\psi_k(\mathbf{r}) = E_k\psi_k(\mathbf{r}) \quad m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\frac{\partial V(\mathbf{R})}{\partial r_i}$$

# 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

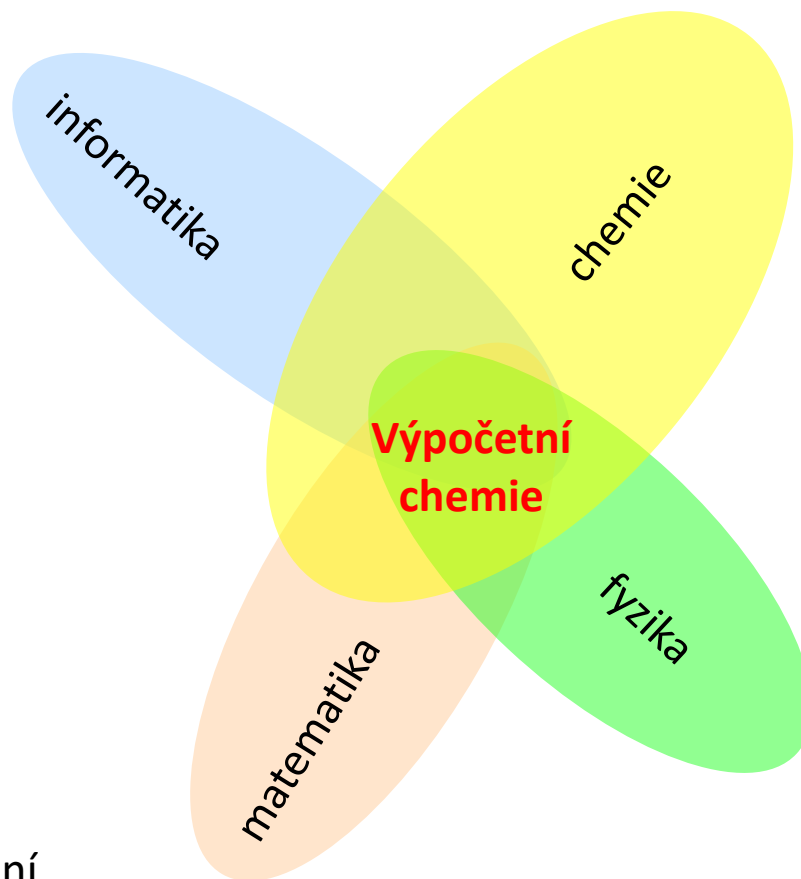


**Počítačová chemie (výpočetní chemie, Computational Chemistry)** je odvětví chemie, které využívá počítačů při řešení chemických problémů. Používá výsledků teoretické chemie implementované do výkonných počítačových programů určených k výpočtům struktury, vlastností a reaktivity molekul a pevných látek.

<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?

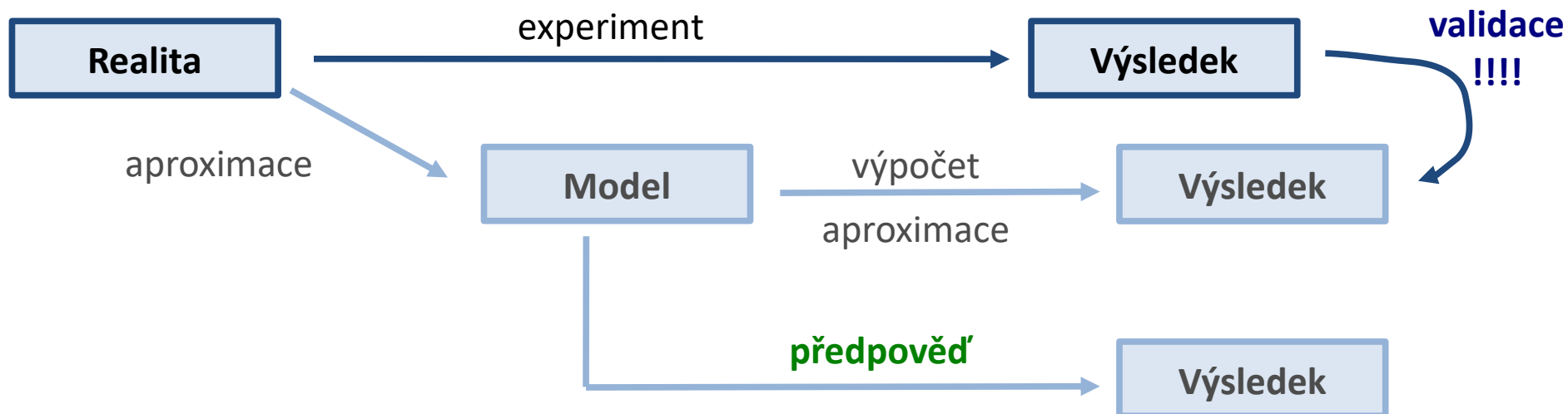
**Bohužel NE :-)**

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)

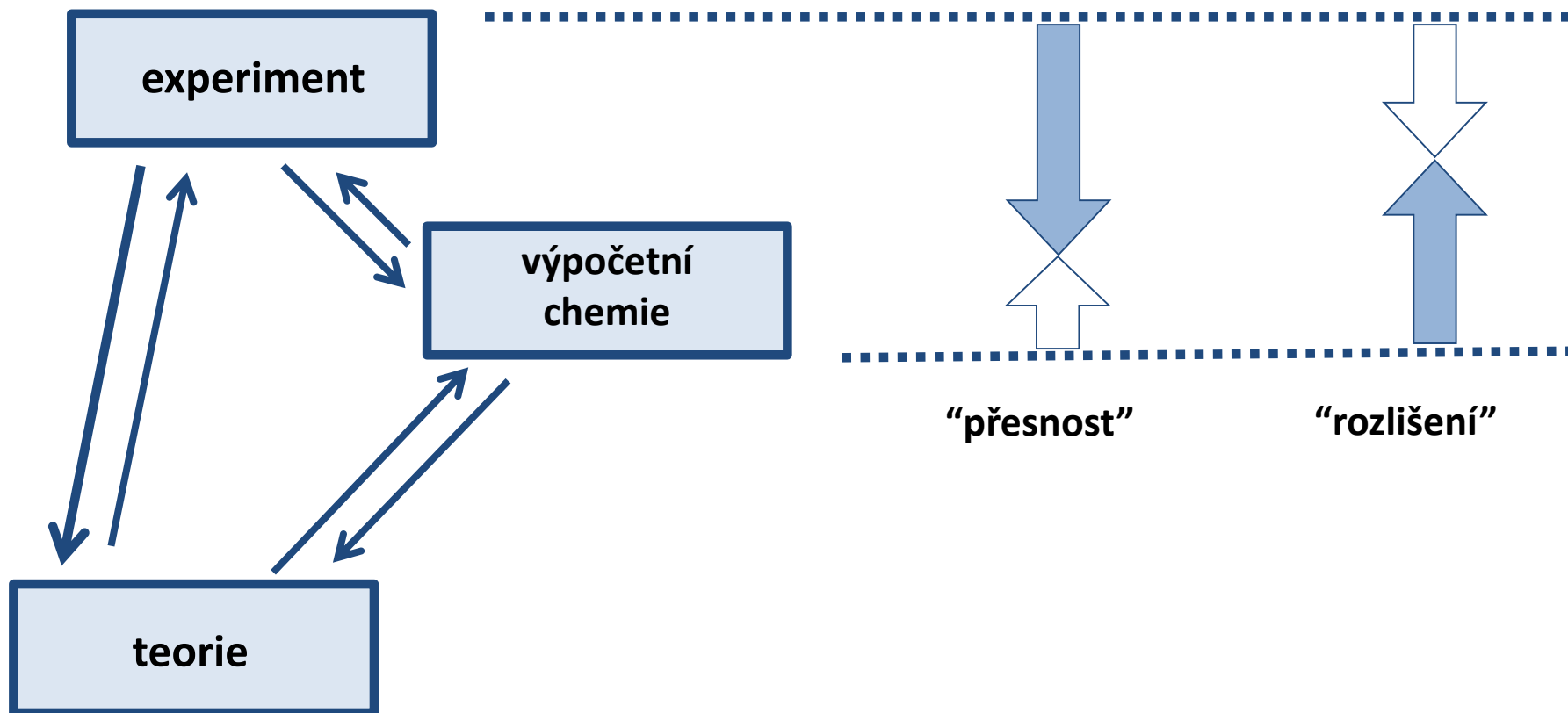
## Vlastnosti molekul

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

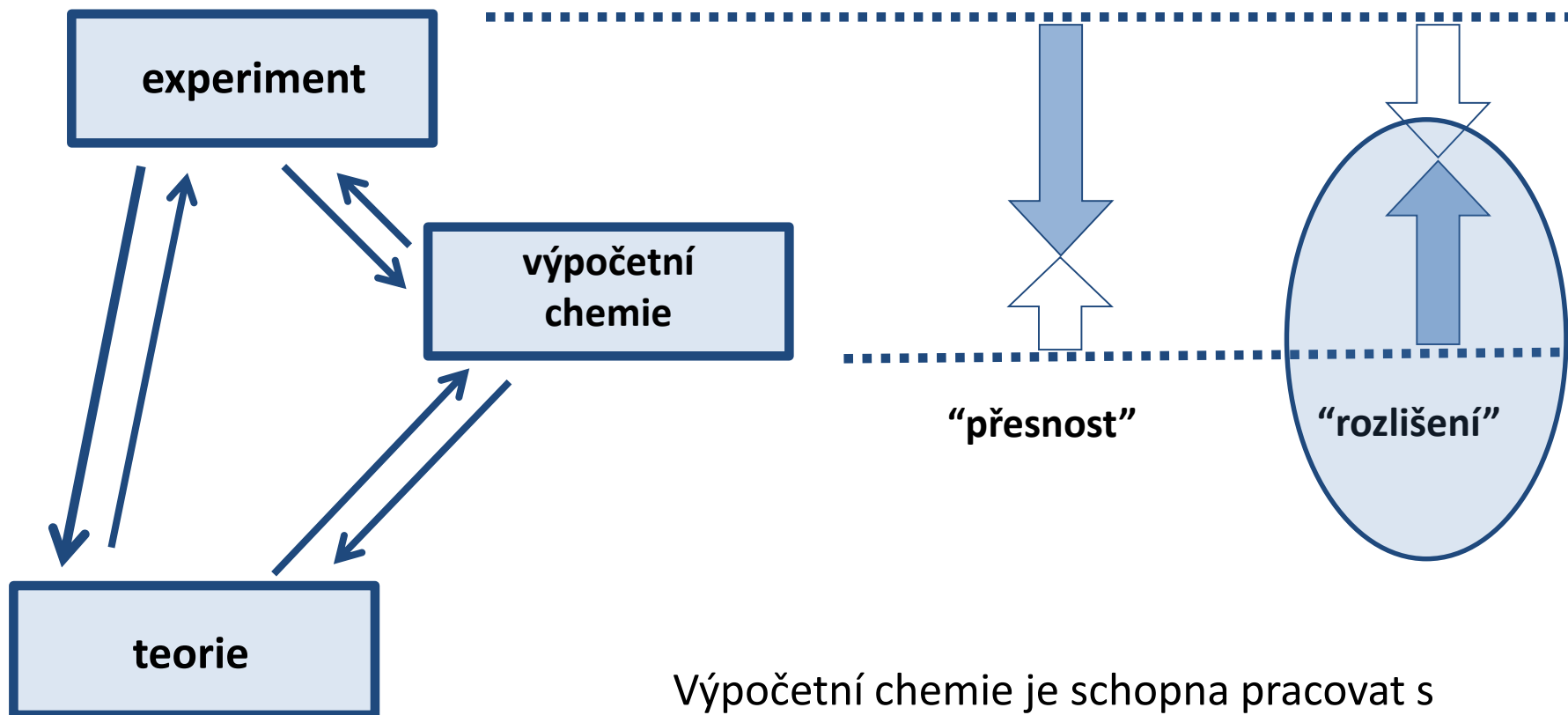
## Srovnání vypočtených a experimentálních termodynamických a kinetických dat

- 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**

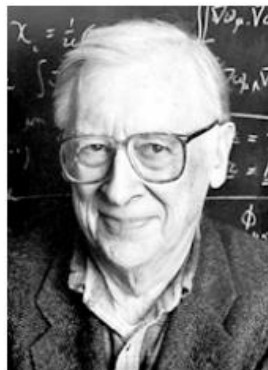


- **rozlišení (většinou atomové rozlišení)**
- **jakékoliv myslitelné uspořádání**
- **model**

# 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/1998/)  
[http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/2013/](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**.