

Számításos kémia alkalmazásai

A számításos kémia matematikai módszerek segítségével határozza meg a vizsgált modellrendszer tulajdonságait. Főként a molekuláris tulajdonságok kiszámítására és a molekuláris viselkedés szimulálására használjuk, de ide tartozik a szintézistervezés, a kémiai adatbázis-keresés és a kombinatív könyvtári manipuláció is. A számítási eredmények nagy pontossággal szolgáltathatnak információkat olyan esetekben, amikor ezeket a méréseket nehéz vagy lehetetlen elvégezni kísérletek során. A számítások segítségével megérthetjük a jelenségeket molekuláris szinten, és segíthetnek célzott kísérletek tervezésében, csökkentve ezzel a drága mérések számát és a kísérleti kockázatot. Ez a terület különösen fontos a gyógyszerfejlesztésben, környezetvédelemben és anyagtudományban. A számításos kémia számos területet foglal magában, bár az előadás csak néhányra fókuszál.

Az elméleti reakciókinetika egy hagyományos alkalmazási területe a számításos kémianak. Ezen a területen az elemi reakciók reakciómechanizmusát, átmeneti állapotokat és molekuláris szerkezeteket vizsgálva képesek vagyunk meghatározni a hőmérséklet- és nyomásfüggő abszolút reakciósebességi állandókat. Ezek az információk fontosak a pirolízis és égési folyamatok vizsgálatában, mivel nélkülük a reakciómechanizmus nehezen vagy egyáltalán nem értelmezhető. Az előadás bemutatja, hogy a magas pontosságú kvantumkémiai számítások elengedhetetlenek ahhoz, hogy a reakciósebességi állandók pontossága összemérhető legyen a kísérleti eredményekkel. A kvantumkémiai számításokkal meghatározhatók a termékmolekulák aránya, a reakció sebessége, valamint a reakció során keletkező melléktermékek és azok termokémiai tulajdonságai.

Az ipari-termék fejlesztés során az első lépés az adott vegyipari folyamat molekuláris hátterének és környezeti vonatkozásainak vizsgálata. Annak ellenére, hogy sok vegyipari nyersanyag előállítási technológiája régóta ismert, azok pontos reakciómechanizmusa gyakran nincs teljesen feltérképezve. Mivel ezek a folyamatok általában nagy energiasűrűségű fosszilis forrásokból indulnak ki, sok esetben fennáll a nemkívánt melléktermékek képződésének lehetősége. Az előadás bemutatja a metilén-difenil-diocianát alapú poliuretán modellépítés főbb lépéseit a kompozit modellkémia segítségével.

Egy másik fontos kutatási terület a szennyező anyagok passzív transzportjának vizsgálata biológiai membránmodelleken. A szennyező anyagoknak való kitettség és az egészségkárosító hatásaik megértése érdekében szükséges az ilyen anyagok mozgásának és kölcsönhatásainak részletes vizsgálata a sejthártyákban. Jelenlegi mérési technikák általában csak közvetett ismereteket biztosítanak a szennyező molekulák membránon belüli viselkedéséről és kölcsönhatásairól, azonban a molekuladinamikai módszerek mind szerkezeti, mind energetikai információkat képesek adni ezeknek a molekuláknak a viselkedéséről.

Some Applications of Computational Chemistry

Computational chemistry determines the properties of the investigated model system using mathematical methods encoded in computer codes. It is mainly used for calculating molecular properties and simulating molecular behavior, but it also includes designing of chemical synthesis, chemical database searching, and combinatorial library manipulation. Computational results can provide highly accurate information in cases where conducting these measurements during experiments is difficult or impossible with the current state-of-the-art. Through computational modeling, we can understand phenomena at the molecular level and aid in the design of targeted experiments, reducing the number of costly measurements and experimental risks. This field is particularly important in drug development, environmental protection, and materials science. Computational chemistry encompasses various areas, although the lecture focuses on only a few.

Theoretical reaction kinetics is a traditional application of computational chemistry. In this field, by examining elementary reactions, reaction mechanisms, transition states, and molecular structures, we can determine temperature- and pressure-dependent absolute reaction rate constants. This information is crucial for studying pyrolysis and combustion processes, as without it, the reaction mechanisms are difficult to interpret or cannot be understood at all. The lecture demonstrates the indispensability of high-precision quantum chemical calculations to achieve the accuracy of reaction rate constants comparable to experimental values. Quantum chemical calculations allow us to determine the ratio of product molecules, reaction rates, as well as the thermodynamic properties of by-products formed during the reaction.

During industrial product development, the first step is to investigate the molecular background and environmental aspects of the chemical process. Despite the long-known production technologies for many chemical raw materials, their exact reaction mechanisms are often not fully understood. Since these processes typically originate from high energy-density fossil sources, there is often the possibility of unintended by-product formation. The lecture presents the main steps of building a polyurethane model based on methylene diphenyl diisocyanate using composite model chemistry.

Another important research area is the study of passive transport of pollutants originated from chemical industry on biological membrane models. To understand the exposure and harmful effects of pollutants, it is necessary to thoroughly investigate their membrane permeation and interactions of these substances within cell membranes. Current measurement techniques typically provide only indirect knowledge about the behavior and interactions of pollutant molecules within membranes, whereas molecular dynamics methods can provide both structural and energetic information about the behavior of these molecules.