

Визуализация механизмов химических реакций на основе квантовохимических расчётов

Е. Ю. Панкратьев

Для максимально полного управления химическими процессами и упрощения работы над получением новых соединений с заданными свойствами требуется насколько это возможно детально знать механизмы соответствующих химических реакций. Механизм химической реакции представляет собой сложную совокупность протекающих в системе элементарных химических и физико-химических стадий с участием молекул, атомов, ионов, свободных радикалов и возбуждённых частиц. Молекулярные структуры, участвующие в исследуемых превращениях, могут иметь достаточно сложное пространственное строение, поэтому для исследователя ключевую роль достаточно часто играет визуальное представление исследуемых объектов.

Таким образом, объектами визуализации химических процессов являются молекулярные структуры и непосредственно сами механизмы химических реакций. И если для визуализации молекулярной структуры существуют различные методы, как например, рентгеноструктурное исследование с последующим применением соответствующего программного обеспечения для вывода пространственного расположения атомов, или решение квантовохимической задачи оптимизации строения молекулярной системы с целью получения равновесной структуры молекулы с последующим отображением получаемых координат в программе-визуализаторе, то методы получения визуальной информации о механизмах реакций на текущий момент скудны.

Наиболее доступным средством визуализации является квантовохимическое исследование поверхности потенциальной энергии (ППЭ) реакции [1-2], которое заключается в поиске и оптимизации структуры переходного состояния (ПС) элементарной реакции и сканировании ППЭ из ПС по координате реакции. Результатом сканирования по координате реакции является два набора координат молекулярной системы: путь от реагентов к ПС и от ПС к продуктам. Количество программ-визуализаторов результатов квантовохимических расчётов, способных анимировать элементарные стадии, невелико, например, к ним относятся Molden 4.6 и ChemCraft 1.6. Программы, способные визуализировать механизмы реакций и вовсе отсутствуют. В связи с этим целью нашего исследования является разработка методики и соответствующего программного обеспечения для визуализации механизмов химических реакций, полученных на основе квантовохимических расчётов.

Разработана методика визуализации механизмов химических реакций, состоящая из четырёх этапов. На первом этапе из файлов квантовохимических расчётов (задачи оптимизации, релаксированного сканирования, сканирования по координате реакции) происходит извлечение координат, соответствующих точкам на ППЭ отдельных элементарных стадий химического превращения и агрегацию данных различных стадий в единый набор. На втором этапе происходит поворот системы координат для каждого элемента из набора координат в соответствии с эллипсоидом инерции, с целью стыковки отдельных элементарных стадий. На третьем этапе производится сглаживание движения атомов посредством создания промежуточных усреднённых наборов координат. На последнем этапе подготовленные данные посредством визуализатора ChemCraft 1.6 переводят в набор рисунков в формате JPEG, которые объединяют в анимационный ролик с помощью видео редактора VirtualDub. Разработана межплатформенная программа подготовки данных для визуализации посредством ChemCraft 1.6 химических превращений на основе результатов расчётов квантовохимического пакета «ПРИРОДА».

1. Миняев Р. М. Градиентные линии на многомерных поверхностях потенциальной энергии и механизмы химических реакций. // Успехи химии, 1994, Т. 63, № 11, С. 939 – 961.
2. Панкратьев Е. Ю., Тюмкина Т. В., Хурсан С. Л., Губайдуллин И. М. Применение суперкомпьютеров в исследовании механизмов реакций металлокомплексного катализа. // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2009): Труды международной научной конференции (Нижний Новгород, 30 марта - 3 апреля 2009 г.), Челябинск: Изд. ЮУрГУ, 2009, стр. 631 – 638.