

Opracowanie potencjału typu ReaxFF z ładunkami niejawnymi do opisu oddziaływań w układach organicznych

Symulacje komputerowe pozwalają na naśladowanie i wyjaśnianie zjawisk, które nie mogą być badane eksperymentalnie. Na przykład, niektóre procesy są tak szybkie, że nie można ich zarejestrować doświadczalnie. Dynamika molekularna jest jednym z najlepszych narzędzi, które mogą być wykorzystane do analizy takich zdarzeń. Jednakże, w celu odtworzenia rzeczywistości w symulacjach komputerowych wymagana jest znajomość oddziaływań występujących między atomami. Im lepszy opis tych oddziaływań (zwany polem siłowym lub potencjałem), tym lepszy jest model komputerowy w odtwarzaniu rzeczywistości.

Jednym z najważniejszych zagadnień współczesnej chemii jest modelowanie reakcji chemicznych. Jednym z najlepszych potencjałów służących do tego celu jest ReaxFF. Potencjał ten ma wiele zalet, jednak niepozbawiony jest również i wad. Największą wadą tego potencjału jest bardzo niewielka szybkość obliczeń, co drastycznie ogranicza rozmiary układów, które można badać w rozsądnym czasie. Naszym celem jest utworzenie nowej wersji tego potencjału, która będzie znacznie szybsza. Przy okazji postaramy się naprawić i inne jego problemy. Na przykład, w obecnym potencjale ReaxFF atomy mogą przenikać przez siebie, jeśli ich energia kinetyczna jest wystarczająco duża. Jest to zjawisko niewystępujące w przyrodzie i ogranicza stosowalność potencjału ReaxFF do opisu niskoenergetycznych zderzeń. Jednak w naszym świecie ogromna liczba zjawisk zachodzi z dużymi energiami. Zjawisk tych nie można opisać przy użyciu obecnego potencjału ReaxFF.

Aby przyspieszyć szybkość obliczeń zmienimy sposób obliczania oddziaływań elektrostatycznych. Zamiast wykonywania żmudnej procedury ustalania ładunków na wszystkich atomach w układzie oraz bezpośrednich obliczeń oddziaływań elektrostatycznych, włączymy niejawnie oddziaływania elektrostatyczne do innych członów liczących siły i energie. Będzie to prowadzić do znacznego przyspieszenia obliczeń, ponieważ algorytmy związane z ładunkami są najbardziej czasochłonną częścią obliczeń. W celu eliminacji zjawiska przenikania atomów podczas zderzeń przy wysokich energiach włączymy do potencjału barierę opisującą poprawnie oddziaływania przy niewielkich odległościach międzyatomowych.

Chcielibyśmy utworzyć potencjał, który będzie poprawnie opisywał interakcje między sześcioma pierwiastkami, mianowicie węglem (C), wodorem (H), tlenem (O), azotem (N), siarką (S) i fosforem (P), co pozwoli na modelowanie struktur i reakcji chemicznych zachodzących w układach złożonych z biomolekuł. Aby to zrobić, połączymy wyniki oddziaływań międzyatomowych uzyskane przez nas z obliczeń kwantowo-mechanicznych z opisem pseudo-empirycznym, w którym formuły analityczne dopasowane do wyników kwantowo-mechanicznych wykorzystane zostaną do szybkiego przewidywania sił i energii występujących w układach wieloatomowych..

Nowy potencjał pozwoli np. na badanie oddziaływań pomiędzy wysokoenergetycznymi pociskami i próbkami organicznymi, a także biologicznymi. Takie zjawisko nazywane jest rozpylaniem i jest podstawą techniki analitycznej, zwanej spektroskopią masową jonów wtórnych (SIMS). Metoda SIMS pozwala na trójwymiarowe obrazowanie chemiczne próbek. Na przykład, przy jej pomocy można wykrywać, w których częściach komórek wchłaniany jest lek, co może być wykorzystane do szybszego opracowania nowych lekarstw. Jednakże, ze względu na brak odpowiedniego pola siłowego, które pozwoliłoby na opis oddziaływań w takich układach, wciąż nie jest zrozumiałe, w jaki sposób działa SIMS, zwłaszcza, gdy jest stosowany do badania próbek biologicznych i organicznych. Nasze badania umożliwią modelowanie procesów zachodzących w takich układach. Może to prowadzić do opracowania bardziej skutecznych instrumentów analitycznych o lepszej rozdzielczości, co pozwoli na obrazowanie mniejszych systemów z większą precyzją.