



# KVANTOVĚ CHEMICKÉ VÝPOČTY MOLEKUL

prezentace miniprojektu

Jan Zrůst, Tomáš Urban, Matěj Višňák

# O čem je kvantová chemie

- řešení vlnových funkcí
- $\hat{H}\psi = E\psi$
- z řešení této rovnice → energie a vlnová funkce
- z vlnové funkce → oblast výskytu elektronu
  - orbital
- příklad hamiltoniánu:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{n\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2)$$

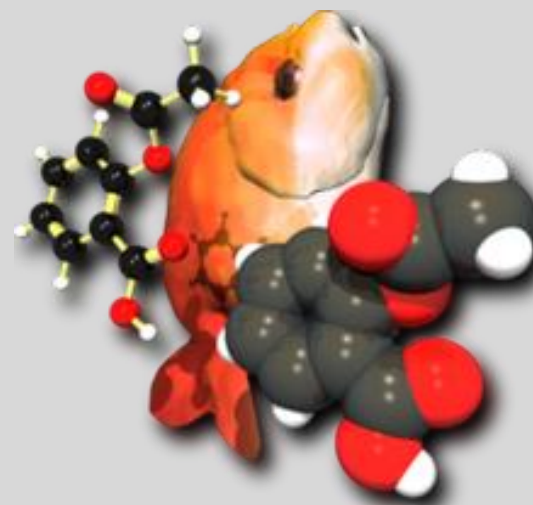
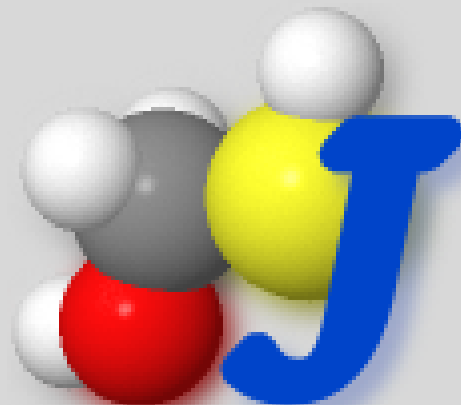
# Software

- počítání vlnových funkcí pro složitější molekuly na papír nemožné
  - používá se počítač
- Hlavní program, který jsme používali, je **Psi4**.
- bere si koordináty (souřadnice) molekul
- optimalizuje geometrii molekuly
- vyhodí vlnové funkce a energie molekul
- pracuje na bázi Pythonu
- pracuje v souborech txt. a příkazovém řádku



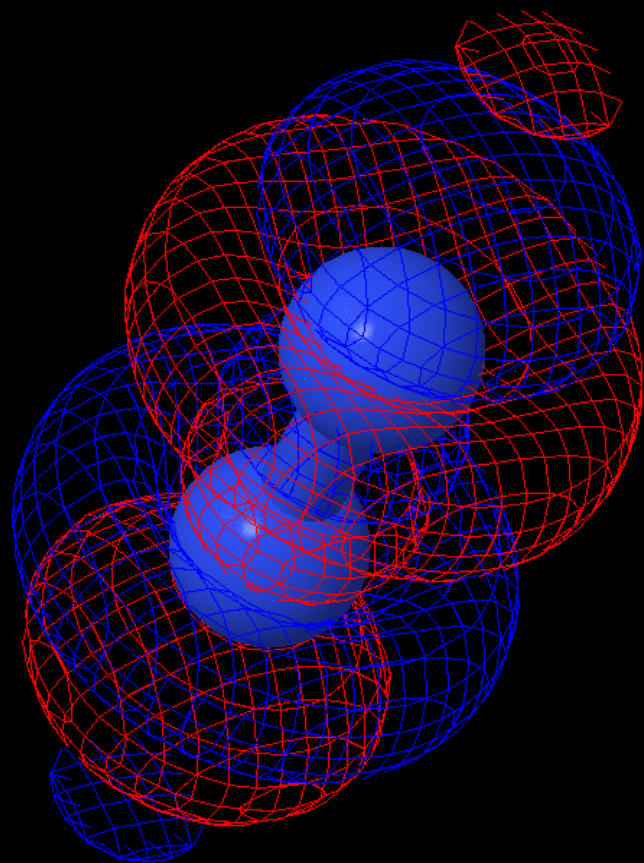
# Další programy

- na modelování molekul → **Avogadro** a **Avogadro2**
- na modelování molekulových orbitalů → **Jmol**
- na předoptimalizování geometrie → **Open babel**



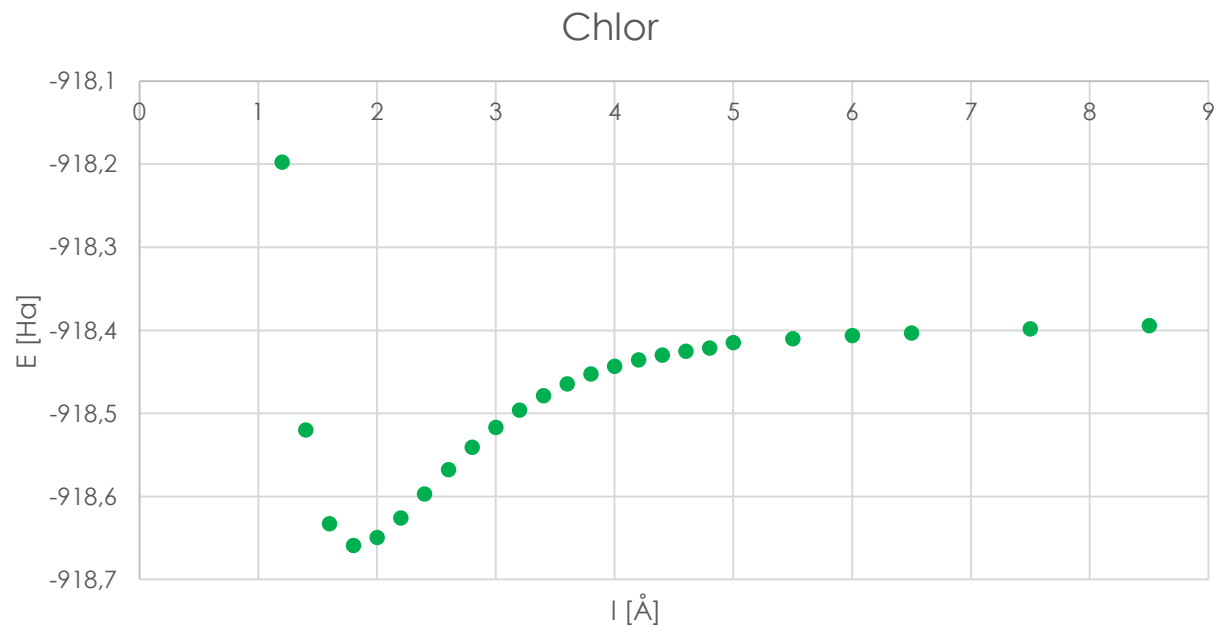
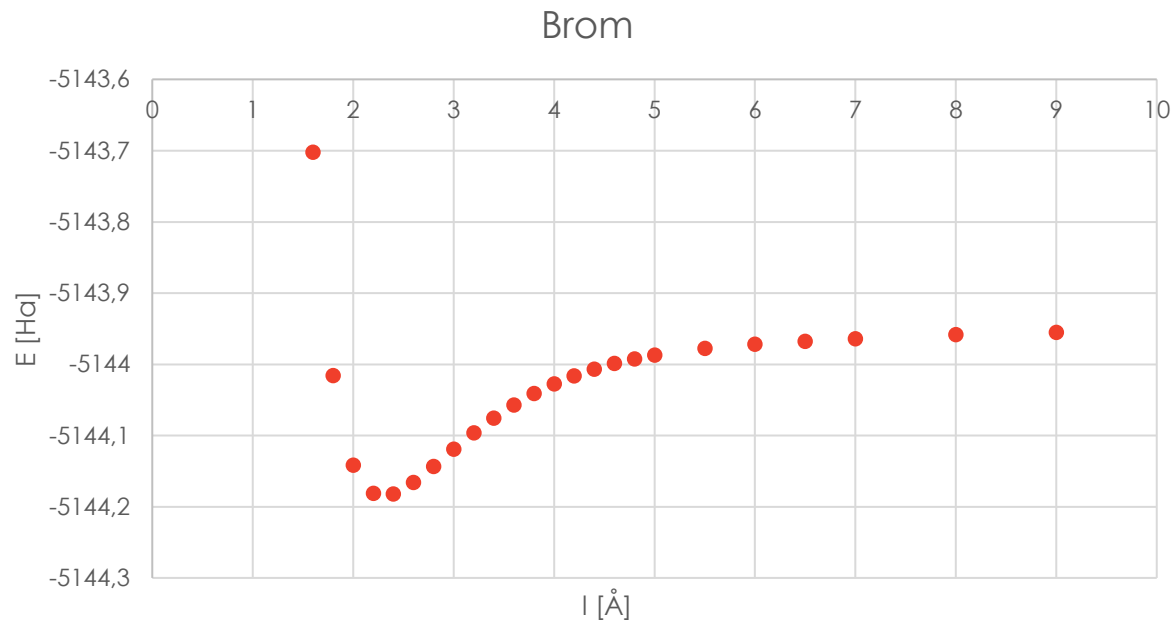
# Naše práce

- Dělali jsme, co jsme uznali za vhodné.
- cíl: pobavit se, zatím co se učíme kvantovkou
- 😊



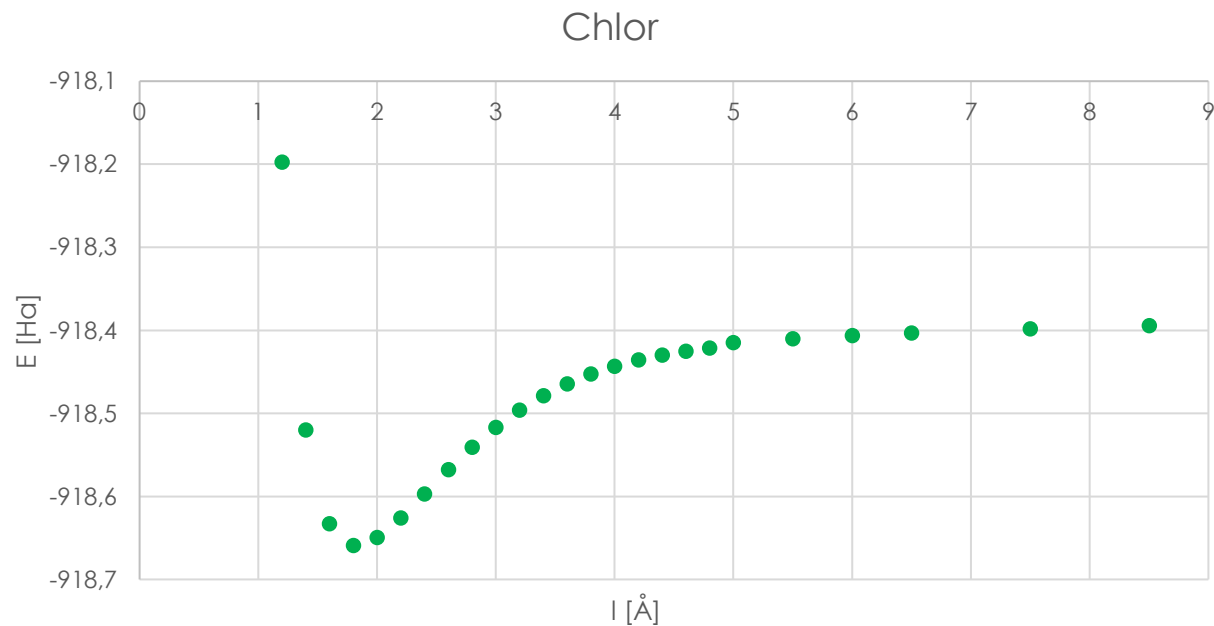
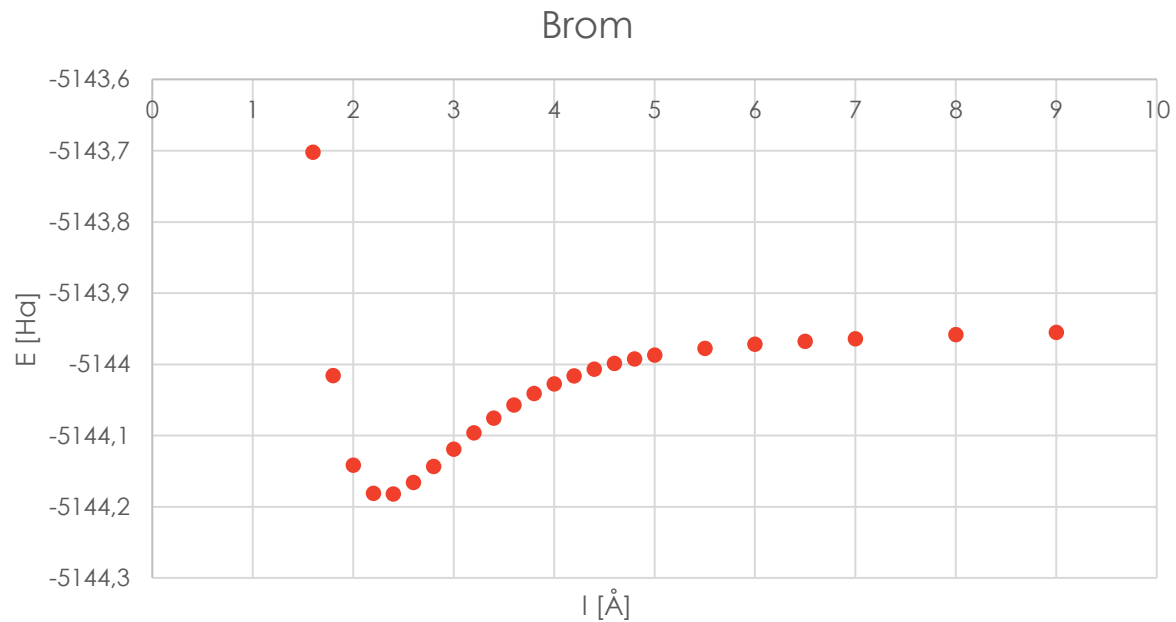
# Zobrazování MO

- molekula  $N_2$
- program Jmol



# Energie vazeb

- nepřímé napočítání vlnové délky
- odpuzování jader



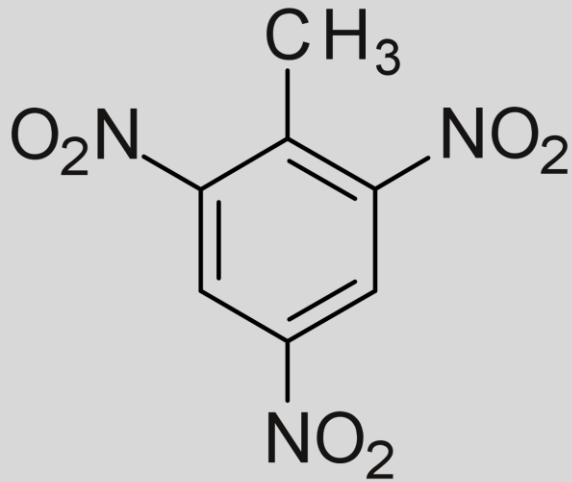
# Počítání energie vazeb

- nepřímé napočítání vlnové délky
- odpuzování jader

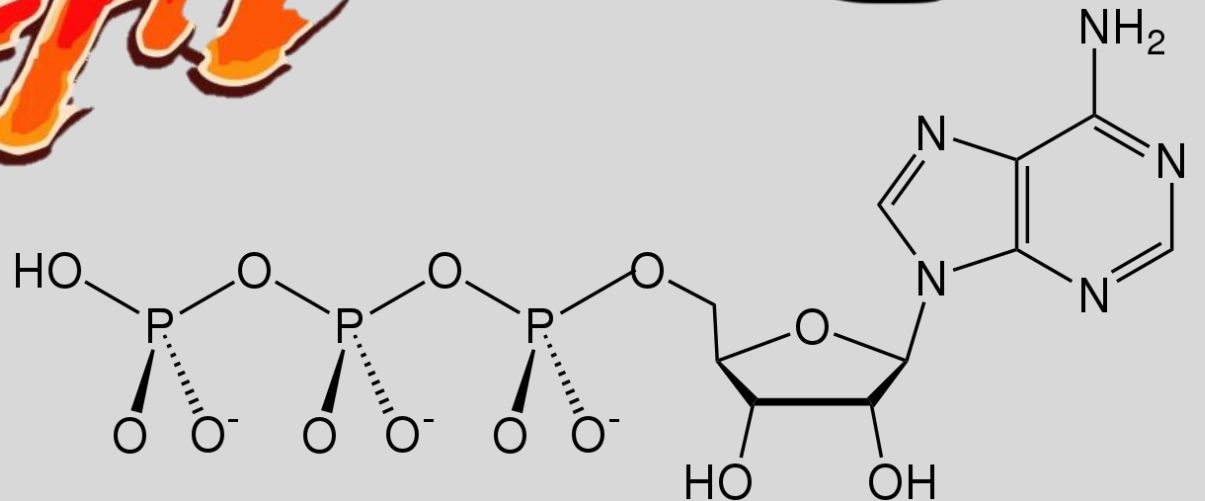




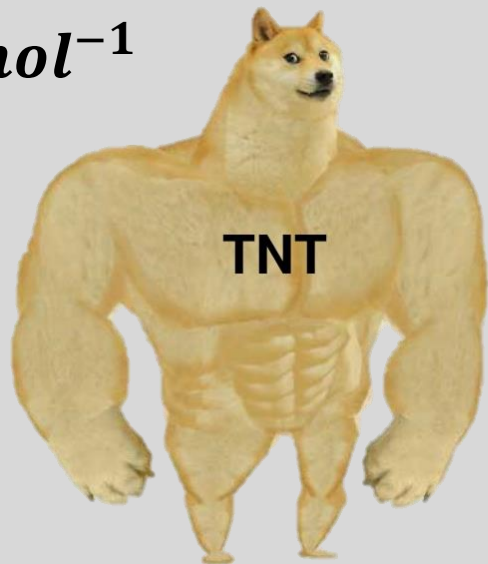
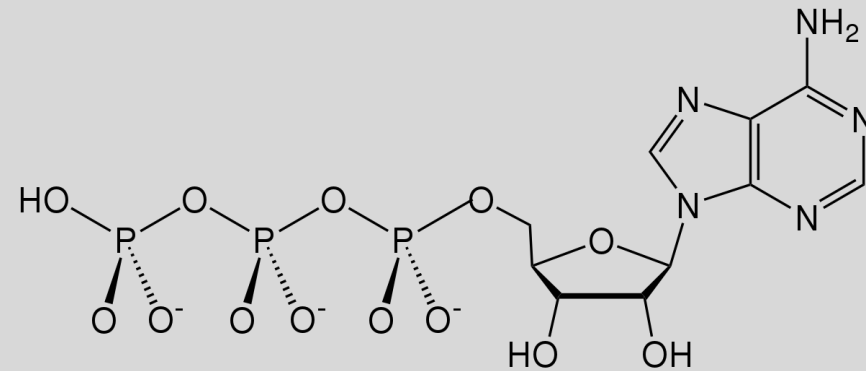
# ATP vs TNT aka. problém biologie?



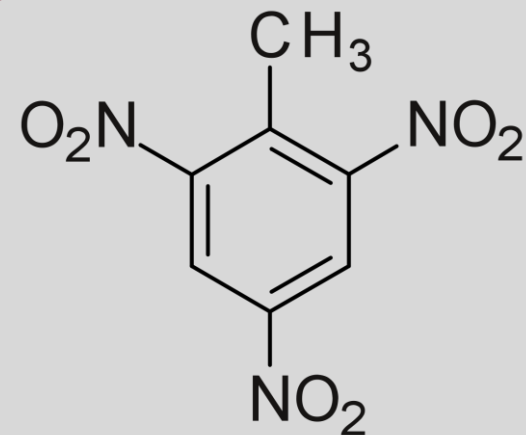
**FIGHT**

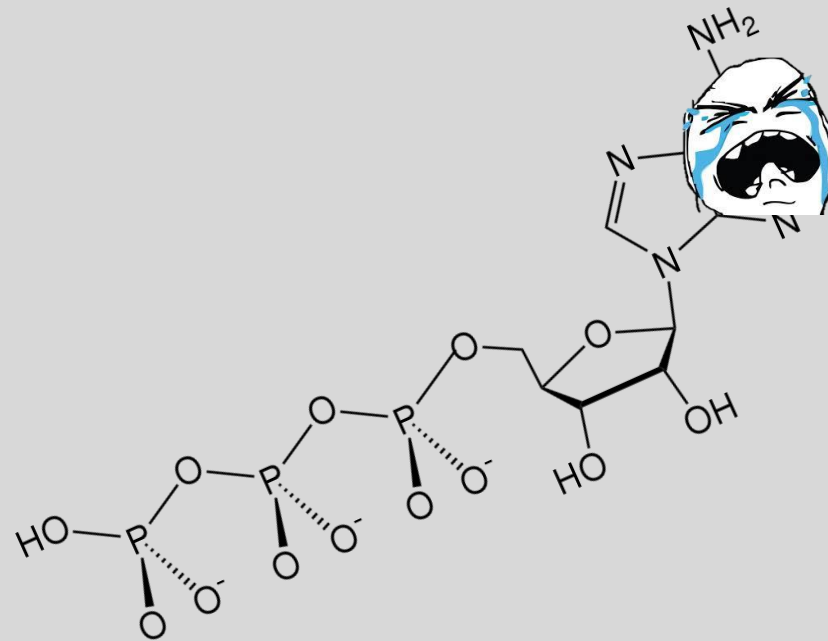
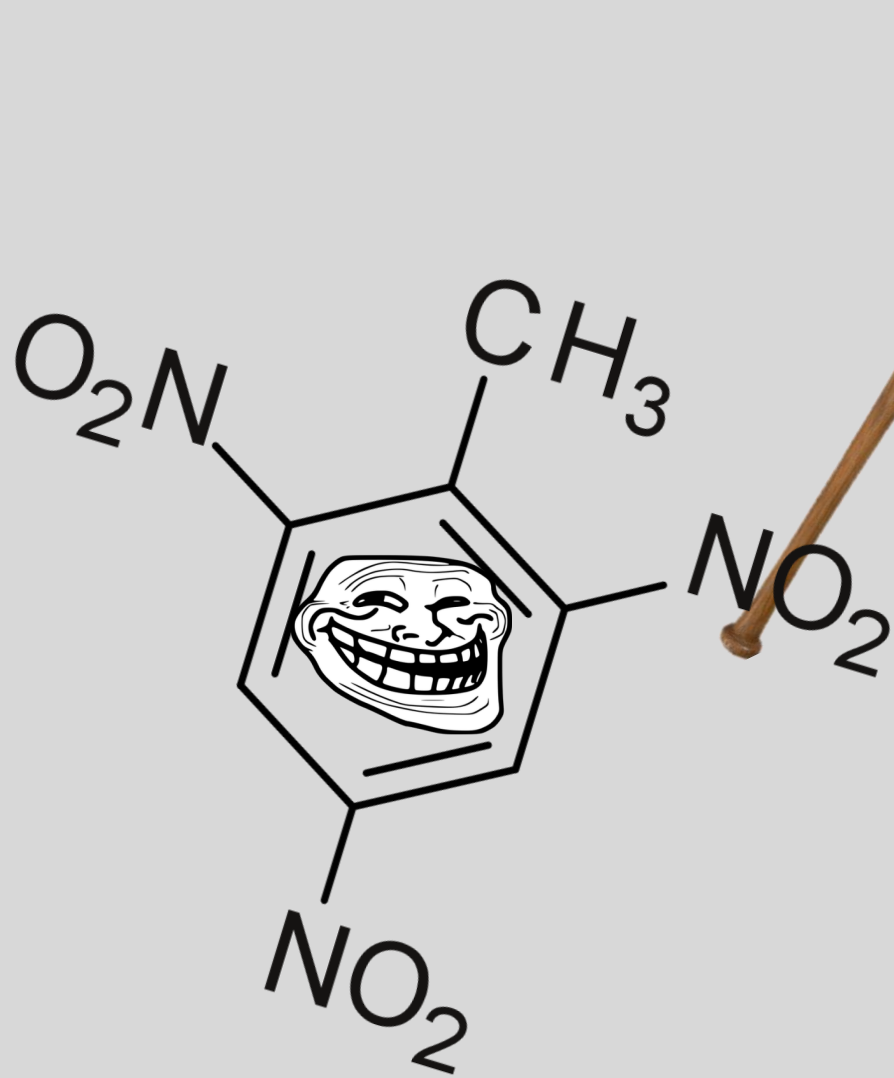


- $4 \text{ TNT} \rightarrow 6 \text{ N}_2 + 10 \text{ H}_2\text{O} + 7 \text{ CO}_2 + 21 \text{ C}$
- vypočtená uvolněná energie
- $\Delta E = -14643,37 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
- hodnota z wiki asi  $949,768 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
- energetická hodnota rozkladu ATP na AMP
- $51,2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$



**FIGHT**





# Závěrem

my jsme se pobavili



vás jsme taky pobavili (doufáme)



za nás cíle práce splněny

# Zdroje

- [https://en.wikipedia.org/wiki/Open\\_Babel](https://en.wikipedia.org/wiki/Open_Babel)
- <https://github.com/psi4>
- <https://www.openchemistry.org>
- <https://snapcraft.io/jmol>
- [https://en.wikipedia.org/wiki/TNT#Energy\\_content](https://en.wikipedia.org/wiki/TNT#Energy_content)
- <https://biology.stackexchange.com/questions/72371/atp-hydrolysis-to-amp-in-the-urea-cycle-what-is-the-free-energy-change#:~:text=If%20we%20consider%20the%20the,to%20AMP%20and%20Pi.>
- [https://www.pikpng.com/pngvi/Txhbwh\\_mortal-kombat-vs-png-mortal-kombat-fight-png-clipart/](https://www.pikpng.com/pngvi/Txhbwh_mortal-kombat-vs-png-mortal-kombat-fight-png-clipart/)



OTÁZKY?



DĚKUJEME ZA  
POZORNOST