

Những mô hình đa mức của các hệ hóa học phức tạp

Khi xét đến một hệ hóa học phức tạp, các nhà hóa học đứng trước một khó khăn về mặt tính toán vì không thể ứng dụng cơ học cổ điển (Classical Mechanics - CM) hoặc cơ học lượng tử (Quantum Mechanics - QM) riêng lẻ được. Một giải pháp cho vấn đề này là phân hệ đó thành nhiều mức, ở mỗi mức có thể ứng dụng một lý thuyết thích hợp, sau đó tìm cách nối các lời giải ở các mức với nhau theo đúng các điều kiện của vật lý.

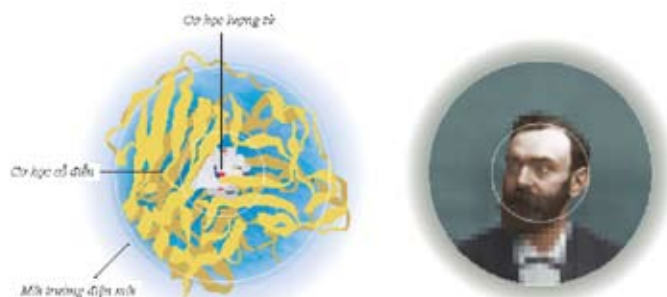
Đặt vấn đề

Các môn hóa học và hóa sinh học (biochemistry) phát triển mạnh mẽ trong vòng 50 năm gần đây, song sự phát triển của hóa sinh học là ấn tượng hơn cả, trong đó việc xác định cấu trúc của protein là một trong những vấn đề mà giới hóa học đã có nhiều đóng góp to lớn. Các phương pháp chuẩn nghiên cứu cấu trúc protein là tinh thể học tia X (X-ray crystallography) và cộng hưởng từ hạt nhân NMR (nuclear magnetic resonance spectroscopy) là các phương pháp quen thuộc được các nhà hóa học sử dụng khi nghiên cứu tính chất hóa học của các phân tử.

Tuy nhiên, ngày nay các nhà khoa học quan tâm tới câu hỏi HOW (xảy ra như thế nào?) hơn là câu hỏi WHAT (trông như thế nào?) mà các phương pháp trên đã có thể trả lời. Để tiến đến việc trả lời câu hỏi HOW, nhiều phương pháp tính toán đã được phát triển.

Các công trình đoạt Giải Nobel Hóa học năm 2013 của 3 nhà hóa học *Martin Karplus*, *Michael Levitt* và *Arieh Warshel* (sau đây được viết tắt là KLV) đã phát triển những phương pháp nối liền CM (mô tả nguyên tử và nhóm nguyên tử) với QM (mô tả tương tác electron và hạt nhân nguyên tử) [1, 2]. Các nhà khoa học đã xây dựng được các mô hình của những hệ hóa học phức tạp và những phản ứng hóa học.

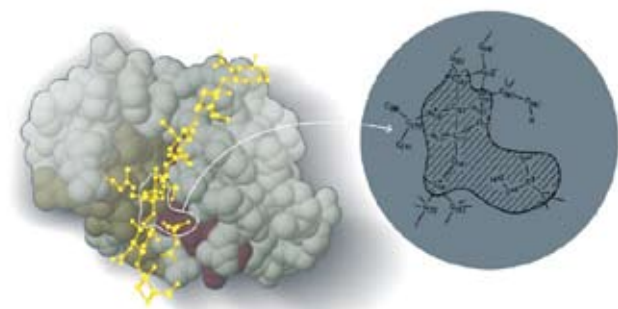
Do CM đơn giản hơn nên dễ tính toán hơn và nhờ đó góp phần làm tăng tốc độ tính toán. KLV đã xây dựng mô hình đa mức (multiscale) trong đó sử dụng QM cho phần lõi của hệ, còn đối với phần xung quanh nối liền với lõi, các tác giả sử dụng CM. Mấu chốt của vấn đề là phải nối được hai vùng tương tác đó với nhau sao cho phù hợp với vật lý học. Toàn hệ hóa học được nhúng trong một môi trường điện môi liên tục (dielectric continuum), thể hiện ở hình 1.



Hình 1: hiện nay, các nhà hóa học xây dựng mô hình các quá trình hóa học, trong đó các chương trình máy tính được sử dụng đến mức tối đa. Đối với trung tâm (lõi) của hệ, các phép tính toán được thực hiện nhờ QM. Ở vùng xa vùng phản ứng, họ đã sử dụng CM và ở các lớp ngoài nguyên tử và phân tử được xem như một khối đồng nhất. Phép phân đa mức này làm cho khả năng tính toán đối với những hệ hóa học lớn trở nên hiện thực. Phần bên phải của hình biểu diễn tượng trưng 3 mức của mô hình

Lý thuyết dùng để mô hình phần nằm phía ngoài xung quanh lõi dựa trên cơ sở thể tương tác cổ điển giữa các phân tử (sử dụng thể tương tác Coulomb và van der Waals). Ưu thế của các phương pháp dựa trên thể cổ điển là có thể xác định được năng lượng dễ dàng cho các hệ hóa học lớn. Bài toán hàm thế cho phần xung quanh lõi được xem như là có lời giải, tuy vậy vẫn còn lại bài toán xác định cấu hình của phần xung quanh lõi. Để thực hiện công đoạn này, người ta sử dụng phương pháp MD (Molecular Dynamics) hay MC (Monte Carlo) để tạo nên những cấu hình.

Vấn đề mà KLV phải giải quyết là làm sao tính được các biến phân (variations) năng lượng của hệ khi có một thay đổi lớn về hình học hay thay đổi cấu hình của một bộ phận nhỏ là lõi vốn tương tác mạnh với phần xung quanh và phần xung quanh này chỉ bị nhiễu loạn nhỏ. Ở đây, các nhà hóa học phát triển phương pháp tổ hợp mô hình cổ điển mô tả phần xung quanh với mô hình lượng tử của lõi ở đó xảy ra các quá trình phản ứng hóa học (hình 2).

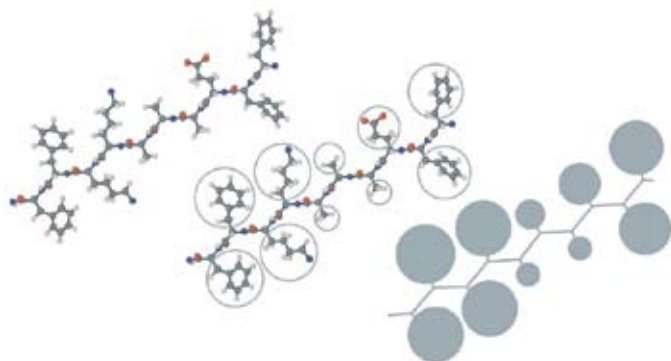


Hình 2: để hiểu lysozyme chia tách một dây glycoside như thế nào, chỉ cần mô hình hóa bộ phận chủ yếu của hệ bằng QM, trong khi các bộ phận xung quanh được xử lý theo cơ học phân tử hoặc theo mô hình của môi trường liên tục (continuum)

Sự đóng góp của K LW

Ba nhà hóa học K LW đã xây dựng những chương trình máy tính có khả năng tính phổ pi-electron nhờ QM, hiệu ứng của sigma-electron và của các hạt nhân được mô tả nhờ CM về hai loại electron này. Các số hạng tương tác giữa CM và QM phải được xây dựng cũng như các số hạng tương tác giữa các phần CM và QM với môi trường điện môi xung quanh.

Để xử lý các hệ lớn, K LW đưa ra những mô hình đơn giản hóa dần dần theo nhiều bước (hình 3).



Hình 3: cấu trúc chi tiết của một xích polypeptide (hình trên cùng) được đơn giản hóa bằng cách gán cho mỗi amino acid residue [3] một thể tích tương tác (hình ở giữa) và cuối cùng có được cấu trúc kết quả trong dạng một dây hạt (hình phía dưới)

Ba tác giả K LW đã chứng minh rằng, có thể nhóm các nguyên tử trong một hệ gồm những đơn vị cổ điển rồi sau đó xử lý chúng như những giả nguyên tử (pseudo atoms). Nhờ thủ thuật này mà họ có thể làm tăng tốc độ tính toán lên rất nhiều lần.

Khi nói đến những đóng góp vào mô hình đa mức, ngoài ba tác giả K LW phải kể đến J. Gao, F. Maceras

& K. Morokuma, U.C. Sing, P. Kollman, H. M. Senn, W. Thiel. Phương pháp của họ có thể dùng trong nghiên cứu không chỉ trong phạm vi các quá trình phức tạp hóa học hữu cơ mà còn có thể dùng trong nghiên cứu các quá trình xúc tác không đồng nhất (heterogenous catalysis) và trong tính toán phổ các phân tử hòa tan trong chất lỏng. Và một điều quan trọng khác là 3 nhà khoa học K LW đã tích hợp được lý thuyết và thực nghiệm, điều này dẫn đến khả năng giải những bài toán trước đây được cho là không giải được.

Kết luận

Cùng với nhiều nhà hóa học khác, 3 nhà khoa học K LW đã mở cánh cổng nối liền CM với QM. CM có thể áp dụng cho những hệ lớn chứa nhiều phân tử và chỉ hữu hiệu cho những hệ ở trạng thái tĩnh và cho ta biết những cấu hình vị trí các nguyên tử trong phân tử. Trong quá trình phản ứng hóa học xảy ra, các phân tử được cung cấp năng lượng và phân tử trở nên bị kích thích thì CM không cho chúng ta thông tin, đây là hạn chế của CM. Khi xây dựng các mô hình của những phản ứng hóa học phức tạp, các nhà khoa học phải cầu cứu đến QM. Một điều cần chú ý là khi xây dựng mô hình không thể bỏ qua tương tác với môi trường xung quanh vì các phản ứng hóa học thường phải xảy ra trong một loại dung dịch nào đó. Như vậy trong các chương trình tính toán hiện đại, ngoài hai mức ứng với lõi và phần xung quanh lõi, các nhà khoa học phải xét thêm một mức thứ ba, ở mức này các nguyên tử và phân tử được gộp thành một khối lượng đồng nhất. Trong khoa học gọi mức này là mức môi trường điện môi. 3 nhà khoa học K LW đã xây dựng nhiều chương trình máy tính hiện đại cho phép thực hiện các tính toán trên các loại electron khác nhau. Đây là một phương pháp phổ quát có khả năng sử dụng cho nhiều lĩnh vực hóa học, từ các phân tử của sự sống đến các quá trình hóa học công nghiệp. Những thành tựu quan trọng của K LW đã cho phép các nhà khoa học nghĩ đến việc xây dựng những mô hình của một cơ thể sống ở mức phân tử ■

CC. biên dịch

Tài liệu tham khảo và chú thích

- [1] *Advanced Information*, Nobelprize.org
- [2] *Popular Information*, Nobelprize.org
- [3] Residue = chỉ một acid amin trong dây peptide.