

33 KAN CHEMISCHE REACTIVITEIT THEORETISCH WORDEN VOORSPELD?

Het experiment speelt in de chemie traditioneel een cruciale rol: om te weten hoe een chemische reactie gaat aflopen, moet die reactie in het laboratorium worden uitgevoerd. Stap voor stap leren chemici echter om chemische reacties met rekenmodellen te simuleren. Met simpele moleculen werkt het al. Maar is het mogelijk om met zulke modellen ook het verloop van heel complexe reacties te voorspellen?

In de geschiedenis van de scheikunde heeft het principe van *trial and error* altijd een grote rol gespeeld. Chemische reacties speelden zich per definitie af in de 'reageerbuis', en wie nieuwe synthesesmethoden, alternatieve reagentia, betere medicijnen of nieuwe materialen wilde ontwikkelen, ontkwam er niet aan om vele laboratoriumexperimenten te doen.



In de afgelopen vijftig jaar heeft de theoretische chemie gewerkt aan manieren om chemische processen te vangen in betrouwbare rekenmodellen. Combinaties met experimenteel onderzoek maakten het mogelijk die modellen te testen, bij te stellen en steeds verder uit te bouwen.

Het kunnen naspelen en voorspellen van chemische reacties in de computer zou chemici grote mogelijkheden bieden. Ze zouden nieuwe moleculen, reacties en materialen kunnen ontwerpen zonder voortdurend terug naar het laboratorium te hoeven om te controleren of wat ze hadden verzonnen in het echt ook mogelijk is.

Computermodellen zouden hen te voren kunnen vertellen welke structuur de tussen- en eindproducten hebben, hoe stabiel ze zijn, hoe gemakkelijk ze reageren met andere moleculen, welke fysische eigenschappen ze bezitten en hoe je hun aanwezigheid met spectroscopen kunt aantonen.

Het bezit van goede modellen zou voor veel chemici een heel andere manier van werken inluiden. Gebruiksvriendelijke computermodellen zouden de creatieve mogelijkheden van vrijwel elke chemicus sterk verruimen. Niet langer gehinderd door allerlei praktische beperkingen van het laboratorium zouden ze nieuwe moleculen, materialen en katalytische reacties kunnen verzinnen, die dan na afloop in het laboratorium alleen nog te hoeven worden gecontroleerd.

Nauwkeurigheid

In de afgelopen vijftig jaar is grote vooruitgang geboekt. Op dit moment is het al mogelijk chemische reacties tussen enkele atomen zeer nauwkeurig te modelleren: de computer berekent hoe de diverse atoomkernen en elektronen door de wetten van de kwantummechanica op elkaar inwerken en voorspelt met grote betrouwbaarheid wat de uitkomsten van de reacties zullen zijn.

Ook iets complexere chemische reacties tussen enkele tientallen atomen zijn al binnen het bereik van rekenmodellen, zij het dat wel concessies moeten worden gedaan op het gebied van nauwkeurigheid en detail. Naarmate de moleculen en hun onderlinge kwantummechanische relaties complexer worden, neemt de omvang van de benodigde berekeningen namelijk razendsnel toe. De benodigde rekenkracht van computers wordt dan al snel een beperkende factor.

De komende decennia wordt de grote uitdaging voor de theoretische chemie het ontwikkelen van efficiënte rekenmodellen die reacties met honderden atomen redelijk nauwkeurig kunnen simuleren. De berekeningen zullen, in chemische vaktermen gesproken, nauwkeurig moeten zijn tot 0,5 kilojoule per mol.

En net als in de harde werkelijkheid van het experiment of de natuur zullen de modellen die reacties ook in complexe omgevingen betrouwbaar moeten kunnen voorspellen, zodat ook enzymreacties en reacties in oplossing met behulp van de theoretische chemie kunnen worden aangepakt.