Kvantemekanikk og kjemi

Trygve Helgaker

Senter for grunnforskning

Det Norske Videnskaps-Akademi

Hylleraas Centre for Quantum Molecular Sciences

Kjemisk institutt, Universitetet i Oslo

31 januar 2018

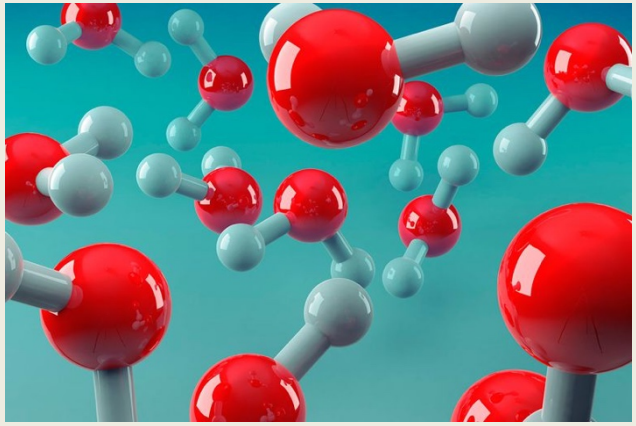
Kjemi

- Kjemi er læren om stoffer — deres egenskaper og reaksjoner
- Kjemi er tradisjonelt en eksperimentell vitenskap

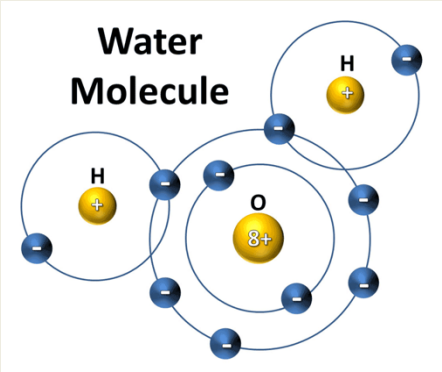
- Nå studeres svært mye kjemi også på datamaskiner
  - Hylleraas-senteret bruker 40–50 millioner datamaskintimer i året
  - hva benyttes denne datakraften til — hva får vi ut av dette?

Molekyler og atomer

- Stoffer er molekyler eller materialer satt sammen av atomer



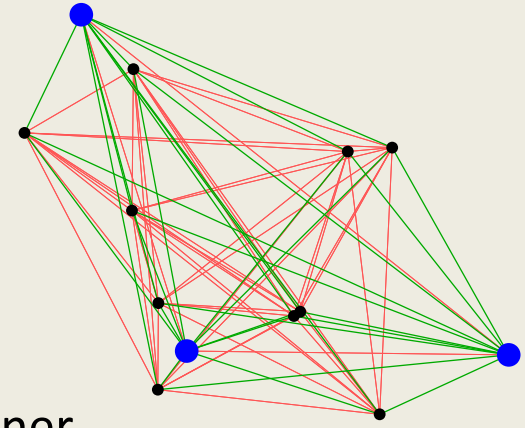
- Hvert atom består av en tung kjerne og et eller flere elektroner



H_2O

Molekyler og kvantemekanikk

- Molekyler er enkle: ladede partikler i bevegelse
  - kjerner frastøter hverandre
  - elektroner frastøter hverandre
  - kjerner og elektroner tiltrekker hverandre

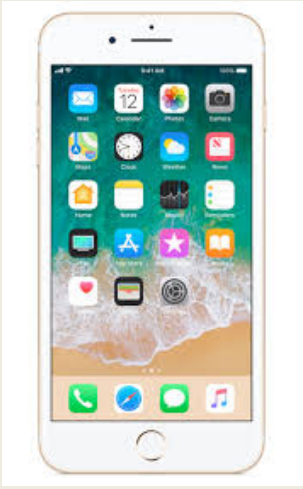


- Partiklene følger kvantemekanikkens lover
  - vi løser Schrödinger-ligningen (1926) på datamaskiner
  - et komplisert mangepartikkelproblem

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x_1,\dots x_N,t) = \left(-\frac{1}{2}\sum_i \nabla_i^2 - \sum_{iI}\frac{Z_I}{r_{iI}} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{1}{r_{ij}}\right)\Psi(x_1,\dots x_N,t)$$

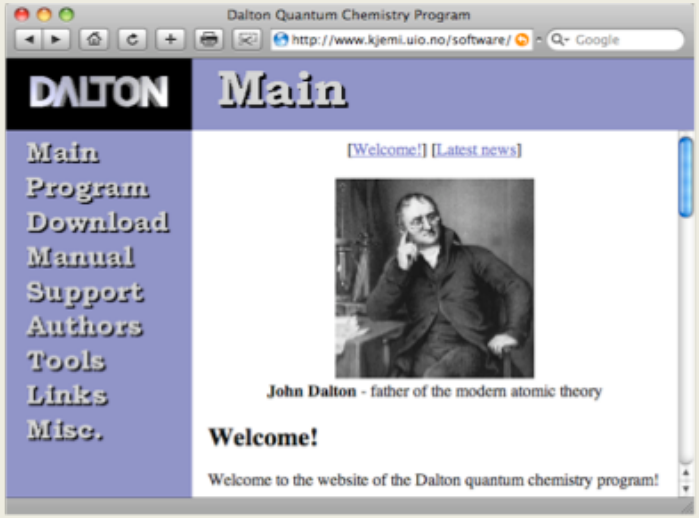
"The underlying physical laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations that are too complicated to be soluble" Dirac (1927)

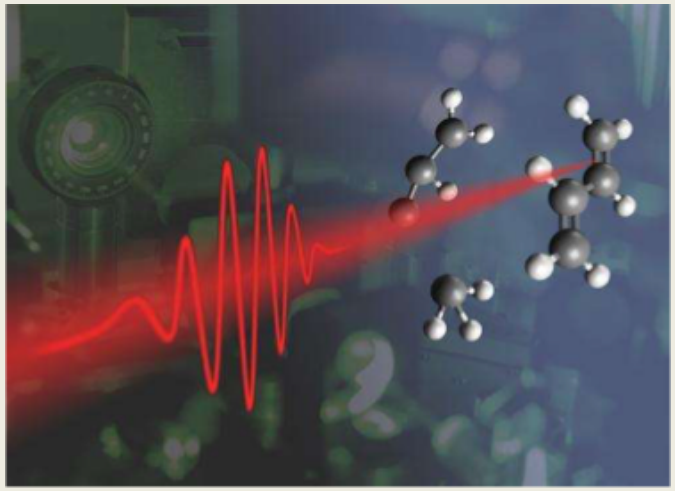
Hjelpen kom fra uventet hold...



Kvantekjemi

- Kvantekjemi er kvantemekanikk anvendt på kjemiske systemer
  - stadig mer avanserte metoder utviklet i store programpakker
  - struktur, dynamikk, reaktivitet, vekselvirkning med stråling
  - anvendelser innen kjemi, fysikk og biolog, innen forskning og industri
- Dalton Quantum Chemistry Program
  - utviklet i Skandinavia siden 1983
  - verdens mest avanserte program for vekselvirkninger med stråling

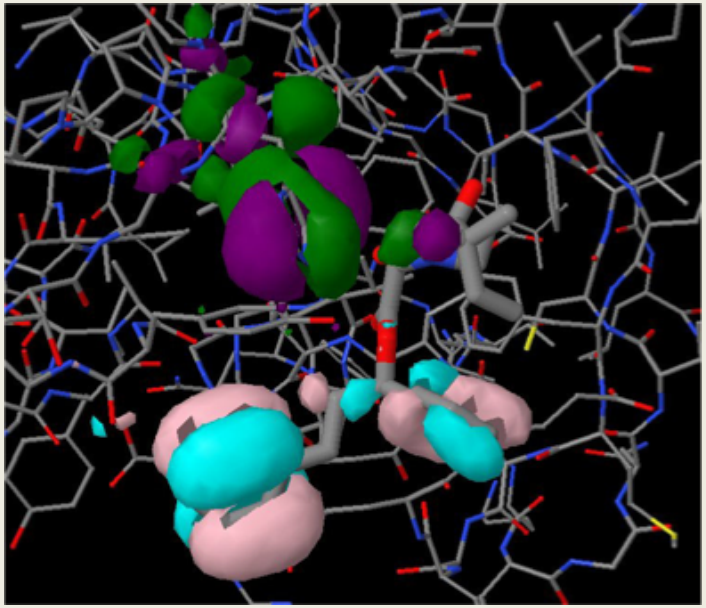


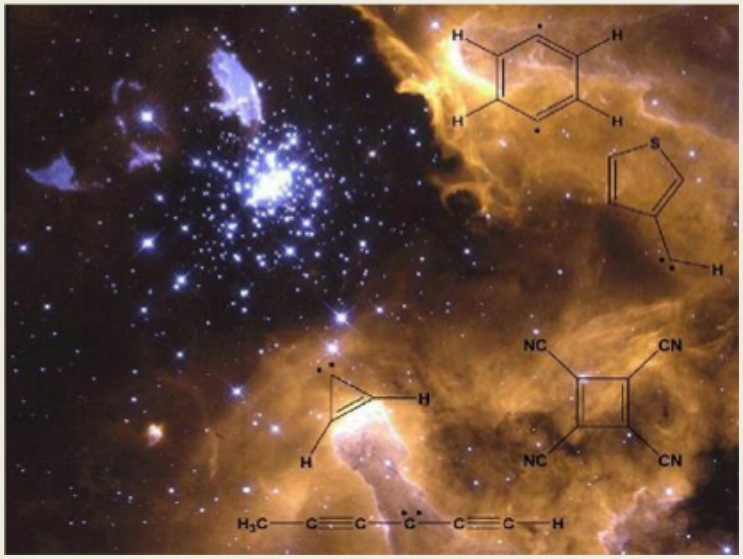


Numeriske simuleringer

Teori, eksperiment — og beregninger

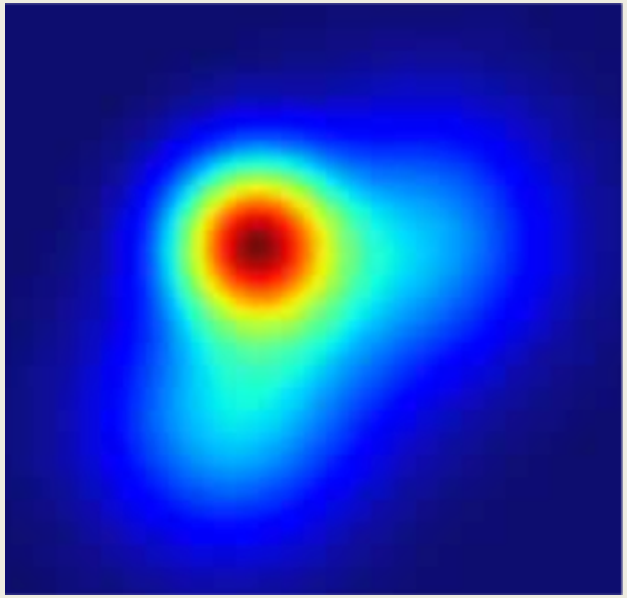
- tolkning og forutsigelser av eksperimenter
- et alternativ til (vanskelige, kostbare eller farlige) eksperimenter
- dette er et generelt utviklingstrekk i mange fag



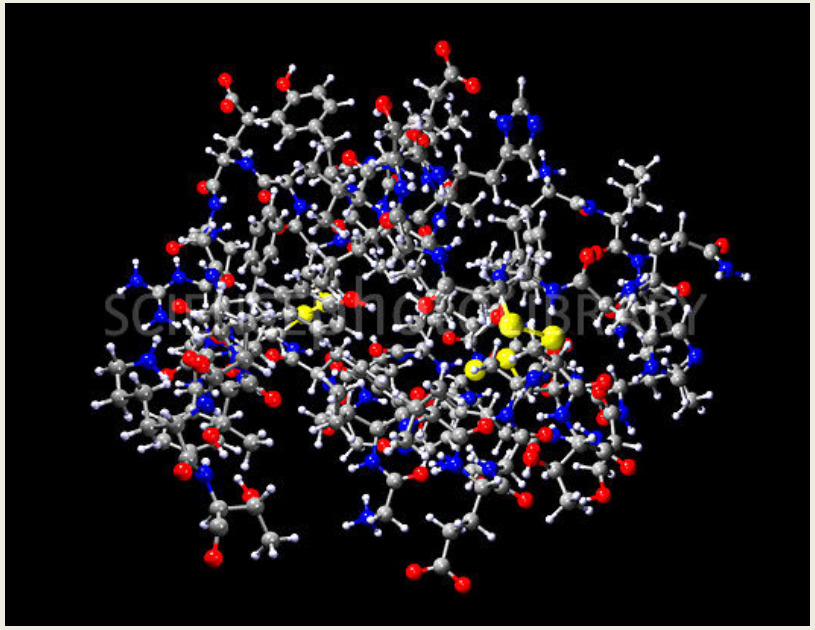


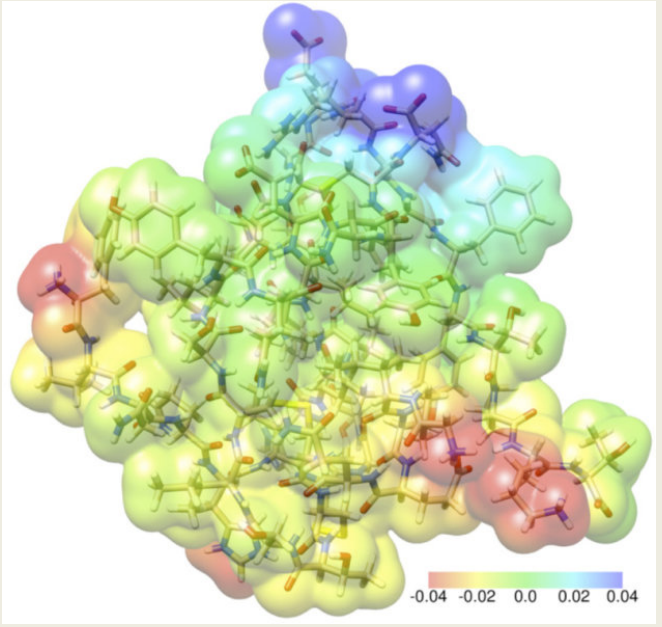
Elektrontettheten

- Elektronene lever en flyktig, omflakkende tilværelse
  - de er ikke noe sted før de blir funnet — så blir de borte igjen
  - vi beregner sannsynligheten for å finne dem hvert sted i molekylet
- Denne sannsynligheten kalles elektrontettheten



Insulinmolekylet

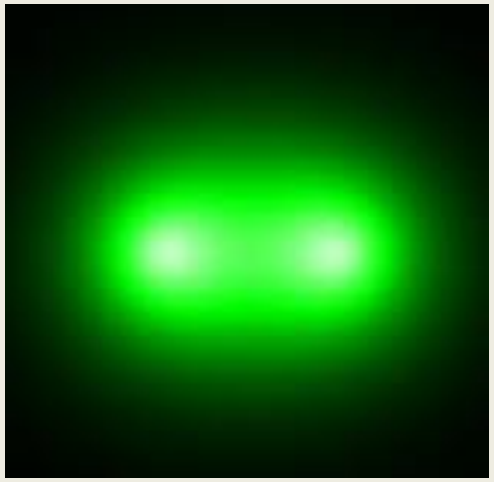




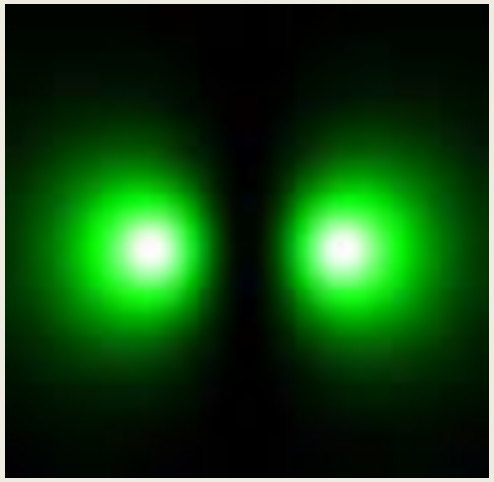
787 kjerner + 3106 elektroner = 3893 partikler

Kvantetilstander

- Et molekyl kan være i ulike kvantetilstander
  - hver tilstand har en bestemt energi og elektrontetthet
- Her er to tilstander for hydrogenmolekylet H–H



Grunntilstanden:
- lavest energi
- bindende tilstand



Eksitert tilstand:
- høyere energi
- antibindende tilstand

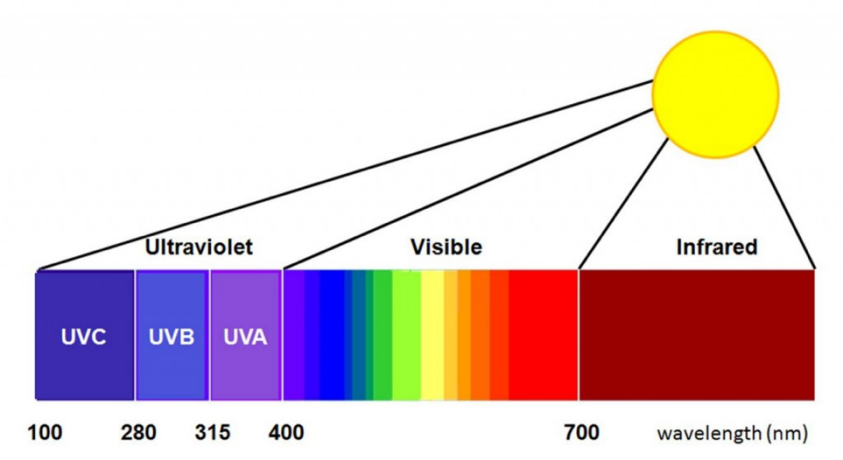
- Et molekyl kan foreta kvantesprang mellom ulike tilstander

Fotoner

- Stråling er en strøm (bølge) av partikler kalt fotoner
  - fotoner har ingen masse og beveger seg med lysets hastighet
  - hvert foton har en energi omvendt proporsjonal med bølgelengden

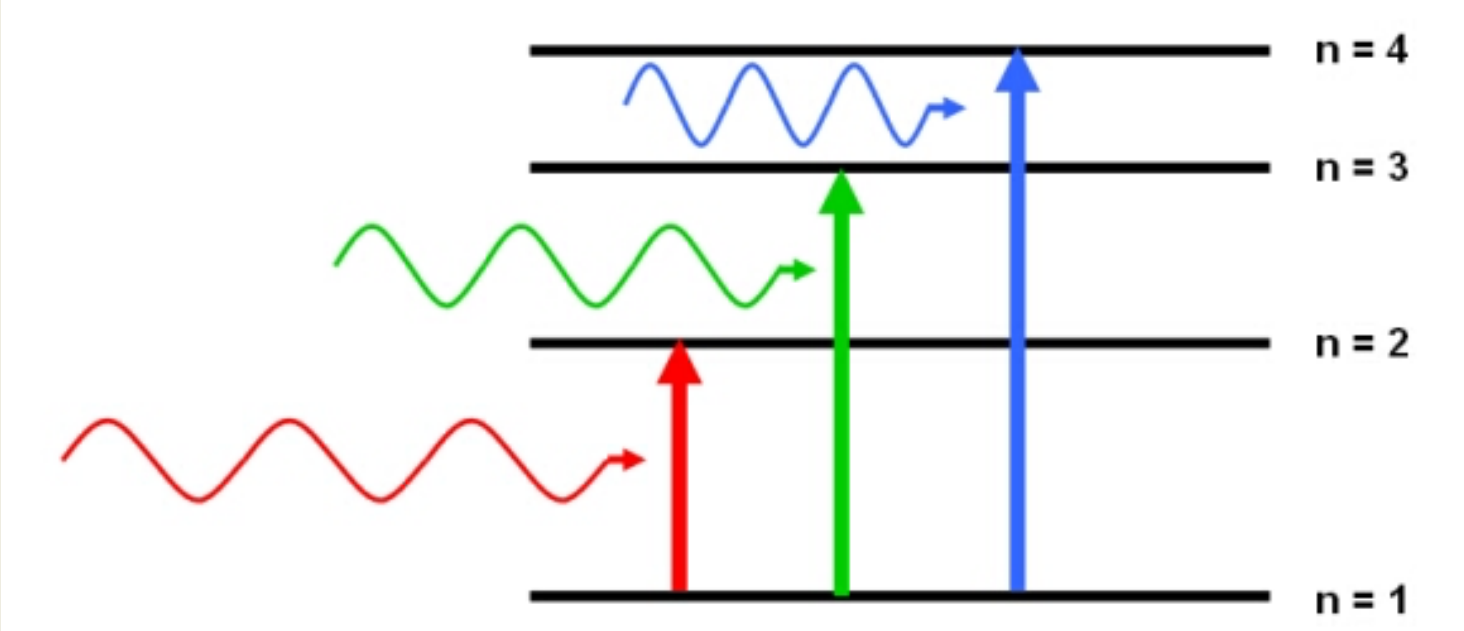
$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

- Solen sender hovedsakelig ut synlige fotoner
  - men også UV-fotoner med mer energi og IR-fotoner med mindre energi



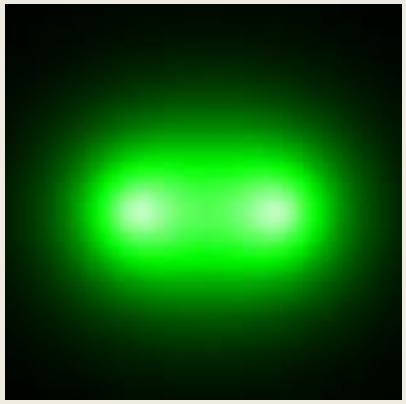
Kvantesprang

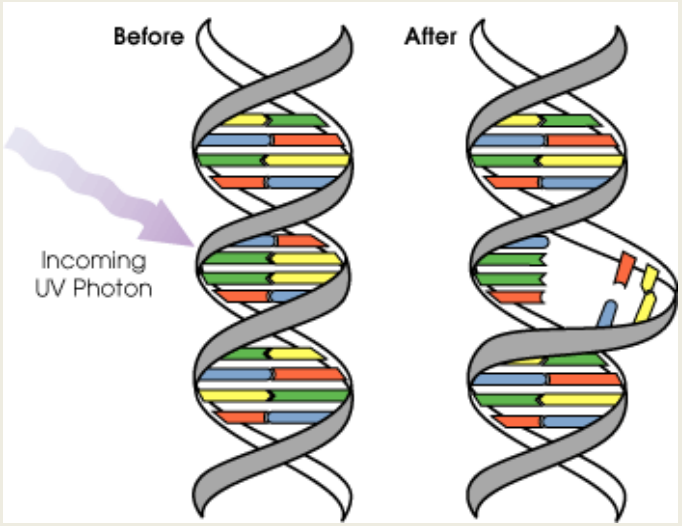
- Energien av et molekyl er kvantisert
  - kun energinivåer som svarer til en kvantetilstand er tillatt
- Et molekyl kan foreta kvantesprang mellom energinivåene
  - energien opptas eller avgis da i form av fotoner
  - fotonets energi må svare presis til energiendringen i kvantespranget

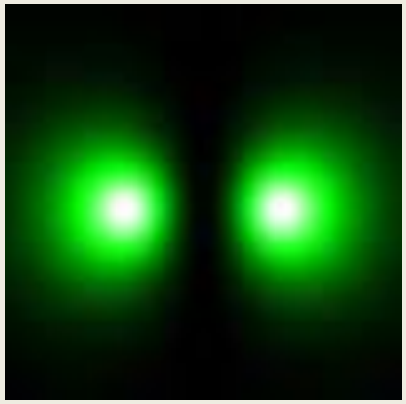


Ultrafiolette fotoner

- UV-foton kan gi sprang fra bindende til antibindende tilstand
  - UV-fotoner kan derfor bryte bindinger og ødelegge molekyler
  - UV-fotoner i sollyset kan skade DNA-molekylet (kan oftest repareres)
  - synlige og infrarøde fotoner har for liten energi til å bryte bindinger

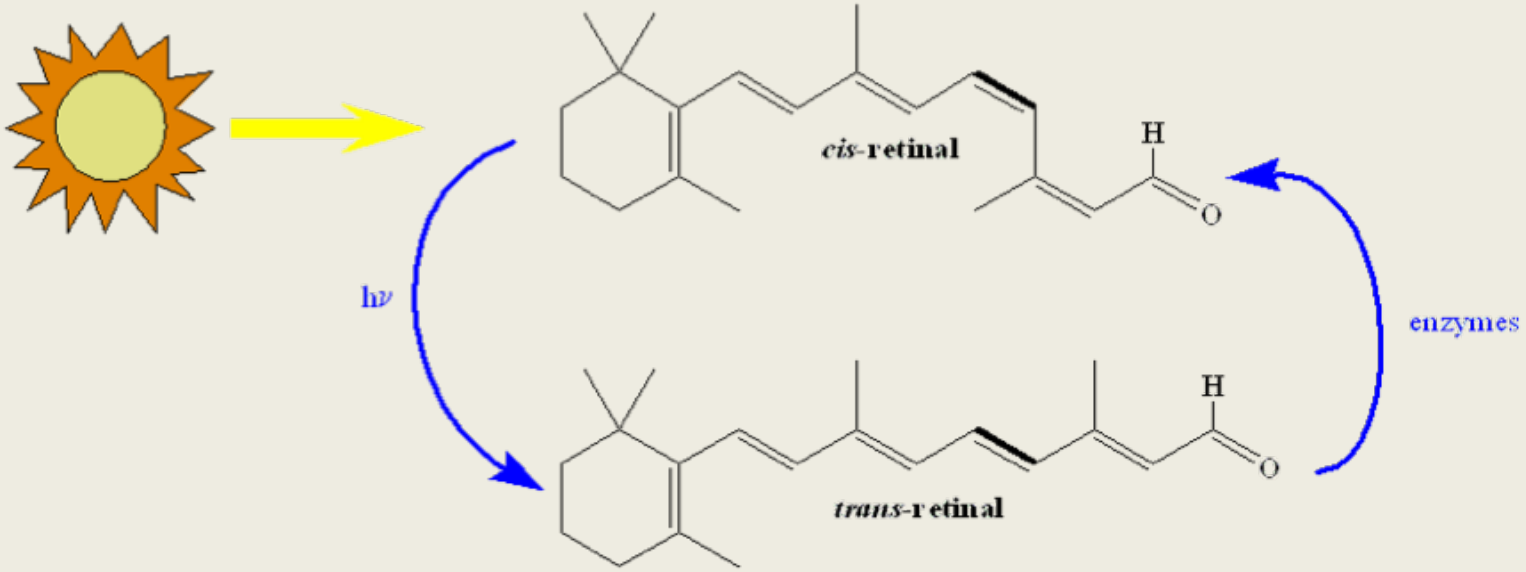






Synlige fotoner

- Et synlig foton har ikke nok energi til å bryte binding
- Det kan vri en av bindingene i retinal, som så endrer struktur
  - energien fra fotonet omgjøres deretter til et nervesignal til hjernen
  - et enzym hjelper samtidig retinal tilbake til sin opprinnelige form



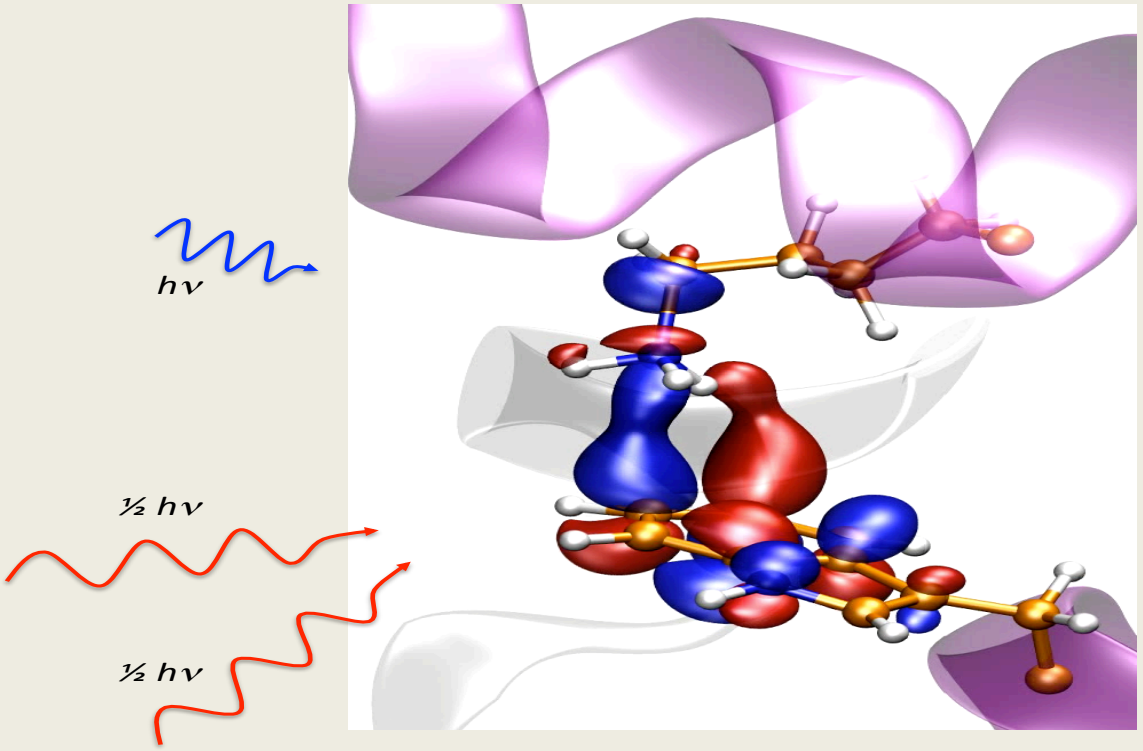
Infrarøde fotoner

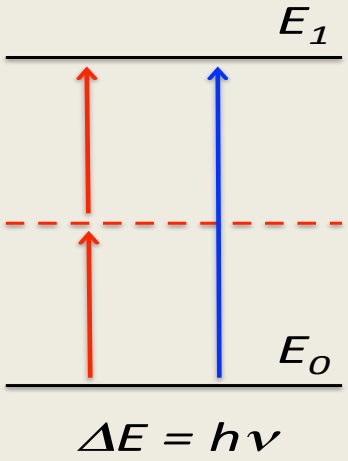
- Infrarøde fotoner har mindre energi enn synlige fotoner
  - de påvirker molekylenes vibrasjoner og oppfattes som varme
  - kan registreres av et infrarødt kamera, men ikke sees direkte av mennesker

- Men: vi kan faktisk se infrarød stråling hvis den er intens nok!

Infrarødt syn

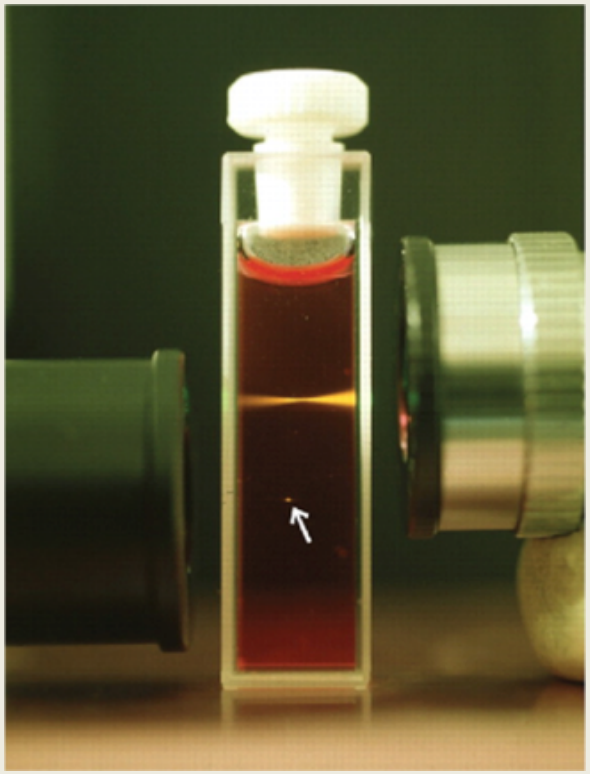
- To infrarøde fotoner har samme energi som ett grønt foton
  - ved høy fotontetthet kan retinal absorbere to fotoner samtidig
  - vi viste dette med avanserte beregningsmetoder utviklet i vår gruppe





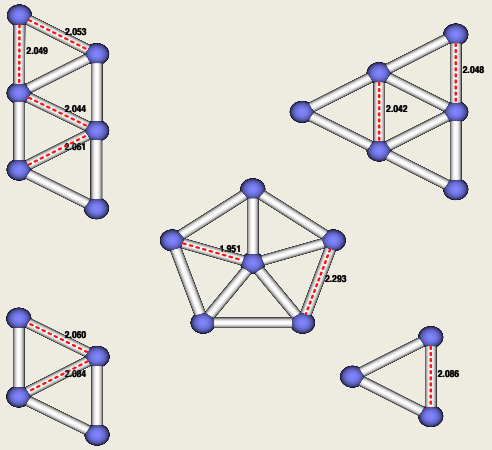
Tofotonteknologi

- Mange spennende teknologiske og medisinske anvendelser
  - tofoton-prosesser foregår kun i fokusområdet — enfoton-prosesser overalt
  - medisinsk avbildning, fotodynamisk terapi, litografi, optisk datalagring



Magnetisk binding

- Vi oppdaget en ny type kjemisk binding
  - binder inerte atomer i ekstreme magnetfelt



- Ennå ikke observert...
  - hvite dverger?
  - krystallurenheter?

Find a Job | M&S Wine | Feedback

Wednesday, Aug 28 2013 6AM 16°C 9AM 20°C 5-Day Forecast

MailOnline Science & Tech

Home | News | U.S. | Sport | TV&Showbiz | Femail | Health | Science | Money | RightMinds | Coffee Break | Travel | Columnists

Science Home | Pictures | Gadgets Gifts and Toys Store

Login

Search

Rewriting the rules of the universe: Mysterious new atomic bond found in white dwarf stars could change computing forever

- Third kind of bond after ionic and covalent
- Found only in white dwarf stars - with magnetic fields 10,000 times stronger than any on Earth
- Find rewrites rules of universe
- Could lead to new discoveries in quantum physics
- Techniques used to analyse bonds could lead to new computers

By ROB WAUGH

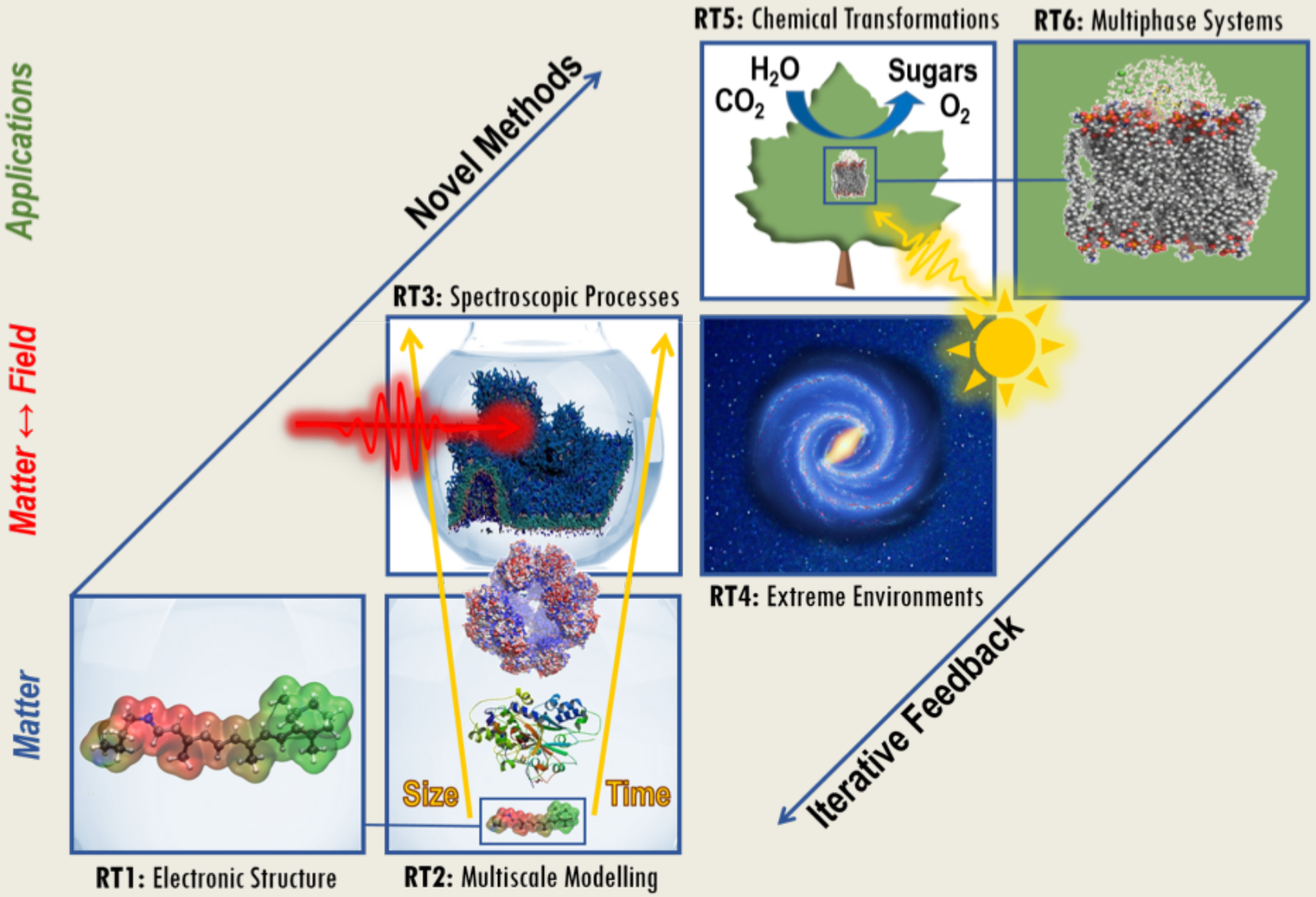
PUBLISHED: 11:07 GMT, 24 July 2012 | UPDATED: 11:24 GMT, 24 July 2012

16 View comments

A new kind of bond between atoms found only in the crushingly intense magnetic fields of white dwarf stars could unlock new secrets of quantum physics.

The find - a 'third kind' of bond between atoms, unknown on Earth - could also unlock the secrets of ultra-powerful new computers.

MailOnline on

Today's headlines | Most Read

Hylleraas Centre for Quantum Molecular Sciences