

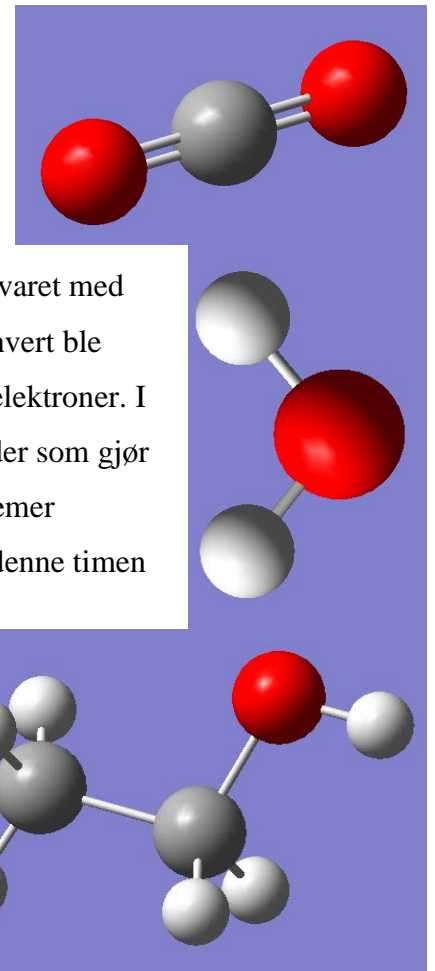
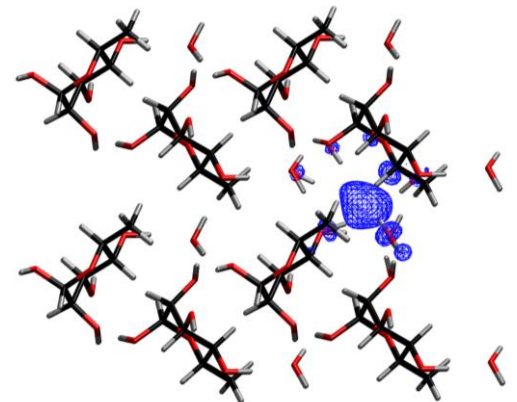
Kollokvium 12: Molekyler – noen eksempler på bruk av kvantefysikk i kjemien

Kvantefysiske beregninger på kjemiske systemer er et stort forskningsfelt. TUSL er ikke eksakt løsbart for systemer med mer enn ett elektron, men det er mulig å komme ganske nær det riktige svaret med numeriske metoder. På 1920 tallet jobbet Egil Hylleraas (som etter hvert ble professor i teoretisk fysikk i Oslo) med å beskrive atomer med 2(!) elektroner. I 2013 gikk nobelprisen i kjemi til tre forskere som har utviklet metoder som gjør at vi nå kan studere kvantemekaniske egenskaper i molekylære systemer bestående av >1000 atomer.¹ Den ene av dem er fysiker. Vi bruker denne timen til å beregne (med datamaskin og ferdig programvare) egenskaper til noen små molekyler som f.eks. vann, etanol og koffein.

- Hva skjer med orbitalene/egentilstandene når vi setter fler atomer ved siden av hverandre?
- Hvordan ser slike molekylorbitaler ut?
- Kan utseende til en sånn orbital fortelle oss hvor godt molekylet henger sammen?
- Hvordan ser det ut når molekyler med fler enn to atomer vibrerer?

Andre eksempler på hva molekylberegninger brukes til: Hydrogenatomkjerner som «vandrere» langs molekylkjeder og elektroner som blir fanget inni sukkerkrystaller.

Oppgave 5.11 i Griffiths går ut på å gjøre et grovt estimat av energien til et heliumatom. Hvor nær den eksperimentelle verdien kommer vi på den måten? Hvor nært kommer vi med avanserte databeregninger?



¹Les mer om nobelprisen og vinnerne her http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/