

Et virtuelt laboratorium: Kjemi på datamaskinen



REAKSJON: Disse ”pølsene” viser hvordan man ved hjelp av datamaskin kan illustrere atomenes baner i et reaksjonsforløp.

Mye av dagens kjemiske forskning foregår på datamaskiner og ikke i tradisjonelle laboratorier. Kjemiske reaksjoner kan i mange tilfeller beskrives mer nøyaktig med datamaskiner enn ved vanlige eksperimenter. Kvantekjemi er blitt et eget forskningsfelt hvor virtuelle kjemiske systemer bygges opp og studeres ved hjelp av gigantiske beregninger uten at et eneste reagensrør blir skittent.

Tekst: Trygve Helgaker, Kjemisk institutt, Universitetet i Oslo

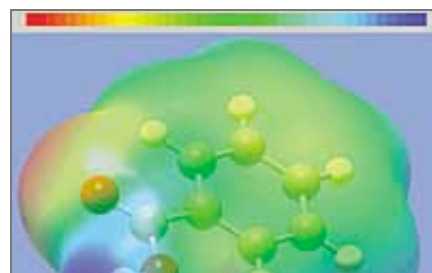
For de aller fleste fremstår kjemi som et eksperimentelt fag. Fra skoledagene assosierer vi gjerne kjemi med farlige

kjemikalier, mystiske løsninger, reagensrør og bunsenbrennere. Historisk sett er dette på mange måter et riktig bilde. De kunnskaper som vi i dag har om kjemiske stoffer, er bygd opp etter utallige eksperimenter, hvis resultater er blitt systematisert og sammenfattet på grunnlag av ulike teorier. For mange er det nettopp dette empiriske aspektet av kjemien som gjør den morsom og spennende; andre synes derimot at det gjør kjemien vanskelig og utilgjengelig.


Mange blir derfor ofte overrasket når de får vite at mye av dagens kjemiske forskning ikke foregår på et tradisjonelt laboratorium, men på datamaskiner – et virtuelt laboratorium. Med datamaskiner kan vi i dag løse ligninger med over en milliard ukjente og på den måten beregne egenskapene av ukjente forbindelser og teoretisk forutsi produktene av en kjemisk reaksjon. I mange sammenhenger er faktisk resultatene av slike beregninger mer nøyaktige enn av de tilsvarende eksperimentelle undersøkelser. Eksempelvis kan vi ofte beregne strukturen av en kjemisk forbindelse med større presisjon enn det er mulig å måle den med. Likeledes kan vi med stor pålitelighet beregne bølgelengde og intensitet av den stråling (lys) som utsendes eller oppfanges av molekyler.

Hvordan er slike beregninger blitt mulige, og hvordan gjøres de? Kjemiske systemer er meget kompliserte. Det enkle vannmolekylet består eksempelvis av to hydrogenatomer bundet til ett oksygenatom. Hvert hydrogenatom består av en tung positiv atomkjerne og et lett negativt elektron, mens oksygenatomet består av åtte elektroner og en tung kjerne. Vannmolekylets egenskaper (dets struktur og dets reaktivitet) er et resultat av gjensidige vekselvirkninger mellom disse elektronene og kjernene. Til enhver tid vil elektronene søke fra hverandre og trekkes mot kjernene, mens kjernene på sin side unngår hverandre og søker mot elektronene. Som et resultat av disse vekselvirkningene dannes en karakteristisk molekylær struktur, der de tunge atomkjernene knyttes til hverandre av elektroner som foretar en evig runddans omkring dem.

Et slikt enkelt bilde av molekylene er nyttig. Det kan dessuten forfines på ulike måter og danne utgangspunktet for enkle kjemiske modellbeskrivelser som kan være nyttige når vi skal forutsi molekylene oppførsel eller tolke eksperimenter. Men for å kunne gjennomføre nøyaktige beregninger av molekylene struktur og reaktivitet, må vi benytte presise fysiske lover og matematiske ligninger.



Newtons velkjente klassiske mekanikk fra slutten av 1600-tallet danner utgangspunktet for vår beskrivelse av alle dagligdagse (makroskopiske) systemer. Disse lovene benyttes eksempelvis til å simulere bevegelsene av fly eller biler, men de har ingen gyldighet for mikroskopiske partikler som elektroner og atomkjerner. For slike systemer må vi isteden benytte kvantemekanikkens lover, som ble oppdaget på 1920-tallet, da fysikere for første gang var i stand til å studere små systemer som atomer og molekyler.



MOLEKYL: Computergrafikk som framstiller elektrontettheten rundt et molekyl.

Kvantemekanikken beskriver således systemer som vi ikke har erfaring med fra dagliglivet. Den er derfor naturlig nok mindre tilgjengelig og mindre anskuelig enn Newtons mekanikk, og den inneholder elementer som mange finner besynderlige og selvmotsigende. Ikke desto mindre gir den i motsetning til klassisk mekanikk, en meget presis beskrivelse av mikroskopiske systemer som atomer og molekyler. En simulering av kjemiske systemer på datamaskiner må derfor ta utgangspunkt i kvantemekanikkens lover.

Da kvanteteorien ble formulert i begynnelsen av forrige århundre, ble den umiddelbart anvendt på de enkleste kjemiske systemer: hydrogenatomet og heliumatomet. Hydrogenatomet byr på få problemer, da det kun består av ett elektron (i tillegg til en stasjonær kjerne). Heliumatomet er mer interessant da det er det enkleste system med mer enn ett elektron. Hvis man skulle ha håp om at kvantemekanikken skal virke for systemer av flere hundre eller flere tusen elektroner, måtte man først få det til å virke for to elektroner.

I 1929 beregnet Egil A. Hylleraas ved Universitetet i Oslo energinivåene i heliumatomet og fant at kvantemekanikken gir resultater i full overensstemmelse med de eksperimentelle observasjoner. Disse beregningene var epokegjørende da de viste at kjemiske systemer i prinsippet kunne studeres på et rent matematisk grunnlag. I det samme året skrev den store engelske fysikeren Paul A. M. Dirac: "The underlying physical laws necessary for the mathematical theory 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 lead to equations much too complicated to be soluble."

Den vanskeligheten som Dirac refererer til, er *mangepartikkelproblemet*: I prinsippet er de matematiske ligninger som bestemmer partiklens oppførsel enkle, men i praksis byr det på store problemer å behandle samtidig et stort antall slike partikler. Da alle partiklene hele tiden beveger seg i forhold til hverandre, er det meget vanskelig å beregne deres gjensidige påvirkninger på en nøyaktig måte. Problemet er av en så uoverskuelig natur at man inntil midten av det forrige århundre betraktet det som uløselig unntatt for små systemer som heliumatomet.

Løsningen kom fra et helt uventet hold, med utviklingen av elektroniske datamaskiner etter den annen verdenskrig. Med slike maskiner kunne man angripe det kjemiske mangepartikkelproblemet på ny og beskrive molekylene matematisk med langt større presisjon enn tidligere. Dette førte til at *kvantekjemien* på 1960-tallet oppstod som et selvstendig forskningsfelt. Særlig i løpet av de siste par tiår har kvantekjemien fremstått som et viktig område av den moderne kjemi, med anvendelser langt utover spesialistenes rekke. Da Nobelprisen i kjemi for 1998 ble tildelt Walter Kohn og John A. Pople for deres bidrag til utviklingen av kvantekjemien, var dette samtidig en anerkjennelse av den sentrale rolle kvantekjemiske beregninger nå spiller i kjemisk forskning.

Kvantekjemien er den delen av kjemien som beskjeftiger seg med anvendelse av kvantemekanikken på kjemiske systemer – molekyler og faste stoffer. Den skiller seg fra annen kjemi ved at den modellerer de kjemiske prosessene med utgangspunkt i de fundamentale fysiske lovene, uten å benytte informasjon fra kjemiske eksperimenter. Kvantekjemien er spennende fordi den foregår ved at vi på datamaskiner danner selvstendige, virtuelle kjemiske

systemer fra scratch, for så å observere hvordan disse systemene oppfører seg. Denne fremgangsmåten har den klare fordelen at vi kan studere systemer som er utilgjengelige i et laboratorium – fordi de er for kostbare, for farlige eller for reaktive til å eksistere under normale laboratorieforhold. Samtidig kan beregningene benyttes som et supplement til eksperimenter og bidra til oppklaring av tvetydige eller uklare observasjoner.

Utviklingen av kvantekjemi foregår i et spennende krysningspunkt mellom moderne kjemi, fysikk, matematikk og informatikk. Mens målet er å løse kjemiske problemer med utgangspunkt i fysikkens fundamentale lover, så er metodene matematiske og redskapene datamaskiner. For å kunne beskrive kjemiske systemer på en nøyaktig måte, må vi løse ligninger med et stort antall ukjente, ofte flere hundre millioner. For å kunne benytte datamaskiner løses disse ligningene som en serie elementære matematiske operasjoner, bestående av kanskje en million milliard (10^{15}) addisjoner og multiplikasjoner. Det sier seg selv at vi da er avhengige av å benytte effektive numeriske metoder og kraftige regnemaskiner. Men vel så viktig er det å utvikle de grunnleggende kvantekjemiske modellene videre slik at de kjemiske systemene blir beskrevet på en mest mulig kompakt og enkel måte, uten at dette går utover nøyaktigheten i beskrivelsen.

Kvantekjemien er metodisk beslektet med en rekke andre fagfelter der den fysiske verden beskrives matematisk ved hjelp av datamaskiner. Et godt eksempel er flysimuleringer. Mens man i gamle dager bygde fysiske flymodeller som ble testet i vindtunneler, simulerer man i dag flyene nøyaktigere og billigere på datamaskiner. Et annet eksempel er værmeldingen, som er basert på simuleringer av atmosfæren. En fellesbetegnelse for slike fagområder er *computational science*, som i fremtiden vil inngå som en studievei ved Universitetet i Oslo.

Kvantekjemi er et aktivt forskningsområde på Kjemisk institutt ved Universitetet i Oslo. Gruppen for teoretisk kjemi er en av de største datamaskinbrukere i Norge og har i samarbeid med andre kvantekjemikere i Skandinavia utviklet *Dalton* – ett av de mest kraftfulle kvantekjemiske programsystemer i verden, lisensiert til over 800 forskningsgrupper verden over. Utviklingen av slike programmer er en spennende prosess der kjemi, fysikk, matematikk og databehandling inngår som nødvendige elementer. Studenter med hovedfag eller doktorgrad i kvantekjemi får derfor en bred faglig bakgrunn, som gjør dem godt skikket til mange ulike arbeidsoppgaver i samfunnet – i skolen, i industriell kjemisk forskning eller i mer generelle anvendelser av databehandling.

[Publisert 2002-03-01]

Universitetet i Oslo (<http://www.uio.no/>)

Apollon (/forside)