



INSTITUTIONEN FÖR KEMI OCH MOLEKYLÄRBIOLOGI

Quantum dynamical effects in complex chemical systems

S. Karl-Mikael Svensson

Institutionen för kemi och molekylärbiologi
Naturvetenskapliga fakulteten

Akademisk avhandling för filosofie doktorsexamen i naturvetenskap, inriktning kemi, som med tillstånd från Naturvetenskapliga fakulteten kommer att offentligt försvaras tisdagen den 9:e juni 2020 kl. 9:00 i Hörsal Carl Kylberg, Medicinaregatan 7B, 413 90 Göteborg.

Med hänvisning till gällande restriktioner kommer antalet personer som tillåts närvara i lokalen att vara begränsat.

Försvaret kommer att direktsändas via internet på länk som publiceras i GUPEA (<http://hdl.handle.net/2077/64131>) och i universitetets kalendarium för disputationer (<https://medarbetarportalen.gu.se/aktuellt/disputationer/>). Det kommer finnas möjlighet för personer som deltar på distans att ställa frågor till respondenten.

ISBN: 978-91-7833-922-8 (Tryck)

ISBN: 978-91-7833-923-5 (PDF)

Tillgänglig via <http://handle.net/2077/64131>

Sammanfattning

När matematiska modeller används för att undersöka ett kemiskt system med beräkningar så är det viktigt att beräkningsmetoderna som används är tillräckligt tillförlitliga för att kunna beskriva de relevanta egenskaperna hos systemet. Samtidigt behöver beräkningsmetoderna vara tillräckligt enkla för att vara överkomliga med den datorkraft som finns tillgänglig.

Denna avhandling presenterar forskning som hittills resulterat i tre publicerade artiklar och ett opublicerat manuskript. Dessa artiklar behandlar nyttjandet och utvecklingen av metoder för beräkningskemi. Viss tonvikt läggs på beräkningar av reaktionshastighetskonstanter.

Inom astrokemin så är strålningsassociation en betydelsefull reaktionsväg för bildandet av molekyler. Det är ofta svårt att erhålla hastighetskonstanter för sådana reaktioner via experiment. I den första artikeln i avhandlingen presenteras en hastighetskonstant för bildandet av hydroxylradikalen genom strålningsassociation av syre- och väteatomer. Denna hastighetskonstant beräknades genom en kombination av olika metoder och borde vara mer tillförlitlig än tidigare tillgängliga hastighetskonstanter för denna reaktion.

I den andra artikeln i avhandlingen presenteras två nya sorters basfunktioner som kan användas tillsammans med en variationsprincip för kvantmekaniska fasrumsfördelningars dynamik. Dessa basfunktioner testas på modellsystem och visar sig ha tilltalande egenskaper.

Den klassiska Wignermetoden är en approximativ simuleringsmetod, där en initial kvantmekanisk fördelning i fasrummet utvecklas över tid med hjälp av klassisk dynamik. I den tredje artikeln i avhandlingen härleds och testas en ny metod för att erhålla den kvantmekaniska fördelningen med hjälp av en Feynman-vägingtegral i imaginär tid. Den nya metoden verkar intressant för framtida tillämpningar. I det opublicerade manuskriptet tillämpas den nya metoden på reaktionshastighetskonstanter.