
Voordracht gehouden in de gewone vergadering van de Afdeling Natuurkunde der Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen op 20 december 1982

METEN OF REKENEN?

Een (quantummechanische) studie van de krachten tussen moleculen en de eigenschappen van materie

A. van der Avoird

Zoals Dirac reeds in 1928 opmerkte, worden de eigenschappen van materie en het verloop van alle chemische en de meeste fysische processen in principe bepaald door de quantummechanische golfvergelijking - de Schrödinger vergelijking - voor de atoomkernen en elektronen, die echter te ingewikkeld is om exact te worden opgelost. In deze voordracht wordt de ontwikkeling geschetst van de zogenaamde quantumchemische methoden die zich richten op het benaderd oplossen van de Schrödinger vergelijking. Deze ontwikkeling is sterk gekoppeld aan de ontwikkeling van elektronische computers: naarmate de rekenfaciliteiten beter worden is het mogelijk theoretisch meer geavanceerde en nauwkeuriger methoden toe te passen op meer en meer realistische modelsystemen van chemisch of fysisch belang.

Een illustratief voorbeeld is de "ab initio" berekening van intermoleculaire krachten, niet alleen als functie van de afstand tussen de moleculen maar ook van hun onderlinge oriëntaties. Vrij nauwkeurige berekeningen van de richtingsafhankelijke "intermoleculaire potentiaal" zijn tegenwoordig mogelijk voor kleinere moleculen. Het is echter tevens mogelijk deze potentialen te gebruiken voor verdere "dynamische" berekeningen, waaruit velerlei interessante eigenschappen van macroscopische materie kunnen worden afgeleid: stabiliteit, faseovergangen, mechanische en optische eigenschappen van verschillende fasen, transport- en energie-overdrachtscoëfficiënten, etcetera. De verkregen informatie is vaak complementair aan het experiment.