

Vi kan med DFT beregninger isolere de forskellige effekter beskrevet ovenfor og se på hvordan de påvirker f.eks. barrieren for reaktionen $O_2(\text{gas}) \rightarrow 2O(\text{adsorberet})$. Netop muligheden for at isolere forskellige aspekter ved at opstille tænkte scenarier er en af de største styrker ved DFT, men samtidigt også en af de største udfordringer. Der er i DFT beregninger ikke en indbygget mekanisme der kan fortælle os om de beregninger vi laver er det rene tankespin. Det er derfor vigtigt at have eksperimentelle data at sammenligne med.

Konklusioner

Vi har i denne artikel vist, hvordan DFT beregninger kan benyttes til at opnå en øget forståelse af kemiske processer. Ved at sammenligne den beregnede tilstandstæthed for guld og platin kan vi forstå hvorfor en fyldt d-skal giver anledning til et mere ædelt metal. Ud fra forskellene i d-tilstandenes udstrækninger for kobber og guld, forklares hvorfor gulds store 5d-tilstand forhindrer guld i at reagere, og dermed gør det endnu mere ædelt.

I den sidste del af artiklen har vi kort beskrevet at små guldpartikler ikke længere er ædle og vi har forsøgt at illustrere hvor komplekst det er at undersøge disse små partikler ifht. at undersøge hele krystaloverflader.

Litteratur

- [1] Paul A. M. Dirac, Quantum Mechanics of Many-Electron Systems, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, **123** (792):714–733, 1929. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1929.0094>.

- [2] Walter Kohn, Nobel Lecture – Electronic Structure of Matter – Wave Functions and Density Functionals. http://nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/kohn-lecture.html, 1998.
- [3] Neil W. Ashcroft og N. David Mermin. *Solid State Physics*. Brooks Cole, 1976.
- [4] Bjørk Hammer og Jens K. Nørskov. Why gold is the noblest of all the metals. *Nature*, **376** (6537):238–240, 1995.
- [5] A. S. K. Hashmi og Graham J. Hutchings. Gold Catalysis. *Angewandte Chemie International Edition*, **45** (47):7896–7936, 2006.



Lasse B. Vilhelmsen er ph.d.-studerende i fysik ved Aarhus Universitet og arbejder til dagligt med DFT til at beskrive de katalytiske egenskaber af nanopartikler på overflader ved hjælp af en genetisk algoritme.



Anton M.H. Rasmussen er ph.d.-studerende ved Aarhus Universitet. Han anvender DFT til at undersøge, hvordan molekyler indgår i katalytiske reaktioner på metaloverflader, især hvordan reaktionerne kan kende forskel på molekyler, der er hinandens spejlbilleder.

Solen i 2012

Af Sven Ove Thimm

Astronomisk Selskab har en solsektion for folk, der er interesserede i at observere Solen. Herunder er der en lille gruppe, der regelmæssigt tæller antallet af solpletter. Solen er et interessant objekt for amatører, da den er let at observere, selv med en lille kikkert. Yderligere forandrer den sig fra dag til dag på en uforudsigelig måde, så man er altid spændt på, hvad man får at se, når man starter observationerne.

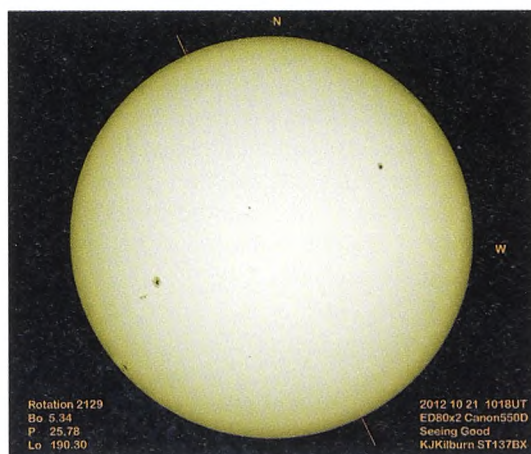
Solobservationer kræver særlige forholdsregler. Enten må man have et solfilter foran objektivet, eller man kan projicere billedet af Solen på et stykke hvidt papir, anbragt bag okularet. Sidstnævnte metode er kun egnet, hvis teleskopet kan tåle varmen. Det kan en simpel linsekikkert (refraktor) eller spejlkikkert, som ikke har for meget plastik i nærheden af objektivets brændepunkt, som regel. Kompakte astronomiske teleskoper kan derimod ikke tåle varmen. Husk i øvrigt at afmontere eller afdække en eventuel sigtekikkert, da trådkorset ellers kan brænde over.



Figur 1. Min lille 80-mm refraktor til de daglige observationer.

Selv bruger jeg en lille refraktor med solfilter (figur 1). Det er hurtigt at anbringe på et fotostativ og på under et minut er jeg klar til at observere. Om vinteren skal teleskopet dog tempereres nogle minutter, hvis den kommer fra en varm stue. Det er vigtigt at teleskopet er hurtigt at stille op, hvis man vil forsøge at følge solaktiviteten hver dag.

Bortset fra enkelte observationer af solpletter med det blotte øje, blev solpletter først observeret i forbindelse med kikkertens opfindelse i begyndelsen af 1600-tallet. Flere observatører kiggede på Solen, når den var svækket af tåge eller ved solnedgang, hvilket dog ikke var særlig sundt for øjnene. Systematiske observationer ved hjælp af projektionsmetoden blev lavet fra 1610 af Galileo Galilei og Christopher Scheiner. De skændtes i lang tid om hvem af dem der først havde opdaget solpletterne. Scheiner, der tilhørte de etablerede tilhængere af det klassiske aristoteliske verdensbillede, antog dem for at være genstande mellem Solen og Jorden, da de traditionelle himmellegemer skulle være perfekte legemer. Galilei fortolkede dem derimod helt i overensstemmelse med vor viden i dag, hvilket sammen med observationer af bjerge på Månen, legemer kredsende omkring Jupiter mm, passede fint til hans konstruktion af et nyt verdensbillede. Han var endog i stand til at konkludere, at Solen roterede om en akse. Fjendskabet mellem de to blev måske senere dyrt for Galilei. Scheiner var jesuitermunk med en vis indflydelse i den katolske kirke. Han har sandsynligvis hjulpet til med at få Inkvisitionen pudset på Galilei.

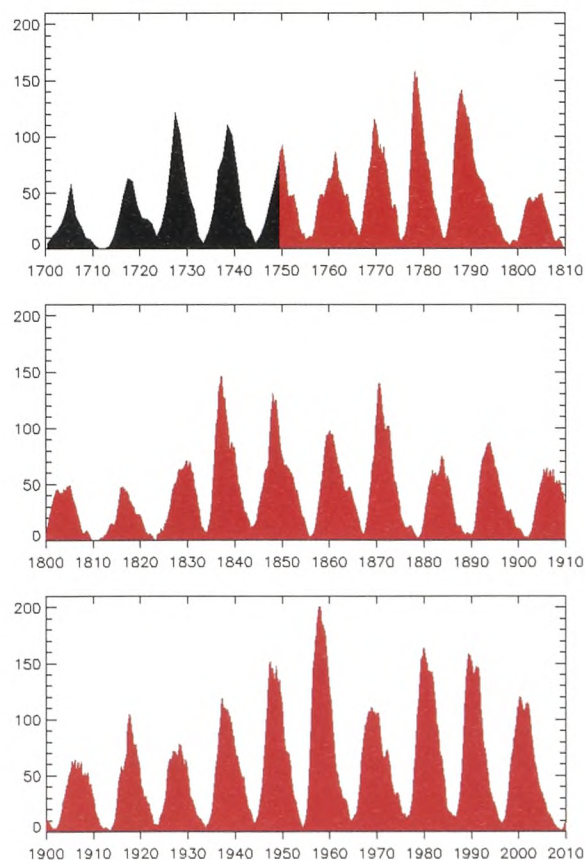


Figur 2. Foto taget af Kevin Kilburn fra solsektionen i BAA (British Astronomical Association) [1].

Siden den tid har Solen været observeret nogenlunde regelmæssigt. I sidste halvdel af 1600-tallet var pletterne stort set fraværende, men fra ca 1700 er de vendt tilbage i stigende antal. "Antallet" af pletter kan opgøres på flere måder. Den mest anvendte er det såkaldte relativtal, der blev indført midt i 1800-tallet af Rudolf Wolf, leder af observatoriet i Zürich. Solpletter viser sig oftest i grupper, som kan bestå af alt fra en til mange enkeltpletter. Relativtallet (R) fås ved at gange antallet af grupper med 10 og lægge antallet af pletter til. Billedet på figur 2 fra 21-10-2012 indeholder 4 grupper med i alt 8 pletter (gruppen midt på Solen

med to små pletter er ikke særlig tydelig). Dette giver $R = 48$. Wolfs metode bygger på, at pletter fordelt på Solen indikerer en større aktivitet end pletter, der er samlet et enkelt sted. Det giver god mening i dag, hvor vi ved at pletterne skyldes kraftige magnetfelter, hvilket ikke var helt klarlagt på den tid, så Wolf må have haft en god intuition. Dog havde han observeret korrelation mellem relativtallet og geomagnetiske forstyrrelser.

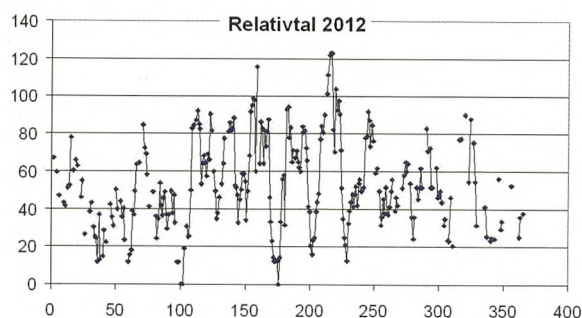
Wolf rejste rundt til observatorier i Europa og rekonstruerede relativtallet tilbage til år 1700. Han besøgte også Rundetårn, hvor Christian Horrebow, som en af de få i Europa i den periode havde foretaget systematiske observationer af Solen fra 1761 til 1776, og herunder bemærket, at antallet af solpletter varierede. Wolfs relativtal blev det "officielle" og bestemt i Zürich i en lang periode. I dag er det overtaget af SIDC (Solar Influences Data Center) i Bruxelles [2]. Nu observeres relativtal også af andre organisationer, både professionelle- og amatørstronomer. Oversigten over relativtallet i de sidste 300 år er vist på figur 3. Her ses tydeligt, at R er periodisk med den kendte "11-års-cyklus", som egentlig varierer mellem 9 og 13 år. Det ses, at også højden af cyklerne varierer stærkt. De enkelte perioder er nummererede fra 1755. Den nuværende er nr. 24.



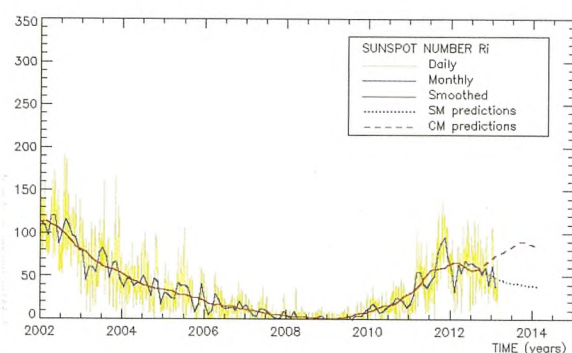
Figur 3. 300 års relativtal fra SIDC [2]. Udglatte gennemsnit (se tekst til figur 5).

Som amatørstronom er det let at bestemme relativtallet. Det jeg ser i min lille kikkert svarer nogenlunde til fotoet på figur 2. SIDC har bidrag fra 70 observatorier verden over. I solsektionen varierer det daglige antal observatorier mellem en og fire. Vore resultater ses på figur 4. Bemærk at kurven er noget hullet om vinteren,

hvilket forklares ved det lave antal observatører og de korte dage. Det ses at relativtallet varierer enormt over få dage. Figur 5 viser en graf fra SIDC fra omkring sidste maksimum til og med 2012. Her ses også de store daglige variationer (gul). En mere jævn kurve fås ved at tage månedlige gennemsnit (blå), som yderligere kan udglattes (rød). Bemærk det lange minimum mellem nr 23 og 24. I flere år var der næsten ingen solpletter, og man begyndte at skrive om, at Solen var "gået helt i stå". Cyklus 24 ser heller ikke ud til at blive særlig høj. Den har sandsynligvis allerede nået sit maksimum. Dette kan dog ikke overraske. På figur 3 kan man nemlig også se en ca. 100-års periode (den såkaldte Gleissberg periode), med et lavt antal pletter i starten af hvert århundrede. Denne periodes længde varierer i øvrigt også lidt og kan følges tilbage i tiden i fx kulstof-14 og iskerne data.

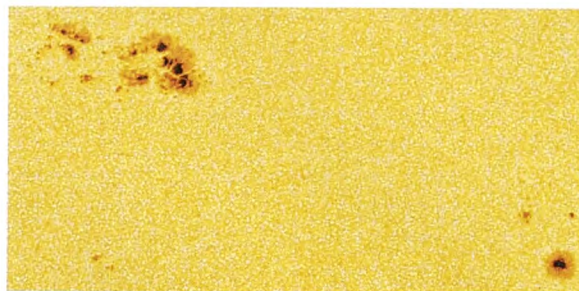


Figur 4. Solsektionens relativtal for hver dag i året. Dag 1 er nytårsdag.



Figur 5. De sidste 11 års daglige og månedlige relativtal fra SIDC [2].

Den enkelte observatørs relativtal skal i praksis ganges med en kalibreringsfaktor (k), da alle ikke har lige store kikkerters og lige gode øjne. Bestemmelse af k for den enkelte observatør kan kun gøres ved at sammenligne med et stort observationsnetværk gennem længere tid. Det tilstræbes at værdien $k = 1$ svarer nogenlunde til Wolfs egne observationer. Med min lille kikkert ligger jeg kun ganske lidt over 1. Observationernes værdi stiger, når man kan beregne gennemsnit af resultater fra en stor gruppe observatører, da variationerne fra person til person kan være ganske store. Værdierne har et vist subjektivt præg, da man ofte må anvende skøn. Hvis man fx ser en lang kæde af solpletter, er det så én lang gruppe, eller to der ligger i forlængelse af hinanden?



Figur 6. Solpletter fra 9. april 2013. Udsnit af foto fra NASAs Spaceweather side [3].

Som amatørastonom kan man også have stort udbytte af at klassificere de forskellige grupper af solpletter, som kan have en meget varierende struktur. En større plet består typisk af et mørkt område, *umbra*, omgivet af et lidt lysere område, *penumbra*. På figur 6 er pletten nederst til højre et typisk eksempel. Strukturen kan også være mere kompliceret, som for gruppen øverst til venstre. Sådanne grupper kan ofte også indeholde en del småpletter, som det er vanskeligt at se i en lille kikkert, hvilket netop er begrundelsen for den ovenfor omtalte k -faktor. Et nærmere kendskab til klassifikation af solpletter kan give mulighed for at vurdere Solens magnetiske aktivitet ud fra simple visuelle observationer.

I dag kan solastronomer med avancerede jordbaserede teleskoper og talrige satellitter undersøge Solen i imponerende detaljer, og bestemme mange parametre, så man kan spørge om, hvilken værdi simple visuelle observationer egentlig har? Fælles for de højteknologiske observationer er dog, at de oftest kun strækker sig over få årtier. Det unikke ved Wolfs relativtal er, at vi har en ubrudt tidsserie over mere end 300 år! Hvis man vil studere solaktivitetens historie er dette datasæt altså vigtigt. Ved at sammenligne de R -værdier, man i dag observerer med samme metode som Wolf, med moderne bestemte parametre, kan man måske rekonstruere disse i fortiden.

Litteratur

- [1] British Astronomical Association, <http://britastro.org/baa>
- [2] Solar Influences Data Analysis Center (SIDC), <http://sidc.oma.be>
- [3] Nyheder og information om rumvejret omkring Solen og Jorden, <http://spaceweather.com>



Sven Ove Thimm er cand.scient fra Århus Universitet og underviser i fysik og astronomi på Hjørring Gymnasium. Han er specielt interesseret i Solen og sol-jord fysik og er leder af Solsektionen i Astronomisk Selskab. E-mail: sven.ove.thimm@skolekom.dk.