

Atomer i fire dimensioner

Formål

Vi lever i en tredimensionel verden, hvor alting har en højde, bredde og dybde. Men hvordan spiller antallet af dimensioner en rolle i vores moderne naturvidenskab, og hvorfor eksisterer der lige præcis tre dimensioner? Hvorfor ikke flere eller færre? For at kunne besvare dette spørgsmål er det måske relevant at undersøge, hvilke konsekvenser det kunne have på vores univers, hvis der fandtes et andet antal dimensioner.

På baggrund af dette vil jeg i projektet lave en model for, hvordan atomorbitaler ville se ud, hvis atomerne eksisterede i fire dimensioner. Ud fra modellerne vil jeg specifikt undersøge, hvor mange elektroner der bliver tilladt at eksistere i hver skal, og hvordan formerne på orbitalerne påvirker atomernes bindingsegenskaber. Dette vil blive gjort for at belyse, hvilke molekyllære strukturer der kan/ikke kan eksistere i fire dimensioner.

Metode

Atomorbitalerne blev udledt ved at opstille en kvantemekanisk model for hydrogenatomet ud fra Schrödingers ligning. Først blev Hamilton operatoren i den tidsuafhængige ligning løst i atomare enheder. Dette blev gjort ved at udlede Laplace operatoren for et ekstra-sfærisk koordinatsystem med udgangspunkt i Laplace-Beltrami operatoren på sfæren S^3 . Den endelige operator var udtrykt af radius r , den polære vinkel θ , azimuthal vinkel ϕ og den firedimensionelle vinkel χ . Efter dette kunne de angulære variabler separeres fra de radiale led, hvorfra den firedimensionelle sfæriske harmoniske funktion blev udledt.

I princippet ville sandsynlighedensdensiteten $|\text{Re}[\mathcal{Y}(\theta, \phi, \chi)]|^2$ kunne plottes i et firedimensionelt ekstra-sfærisk koordinatsystem. Men da det er (meget!) svært at plotte i 4D, blev der anvendt tværnsnitprojektion ud fra w -aksen og vinklen χ . Dette kunne illustreres ved at animere tværnsnittet mellem orbitalen og et tredimensionelt sfærisk rum med χ som variabel, hvorefter tværnsnittet blev projiceret på xyz -rummet.

Derudover blev udartningen af de firedimensionelle kvantiserede energiniveauer udledt. Dette indikerede, hvor mange forskellige orbitaler der rent faktisk ville eksistere i hver skal, hvilket kunne sammenlignes med de animerede projektioner for at bedømme metodens validitet. Med videre analyse, blev det periodiske system for firedimensionelle atomer konstrueret ved at beregne forskellene mellem udartningerne af de forskellige energiniveauer.

Resultater

Ud fra den teoretiske model blev den firedimensionelle sfæriske harmoniske funktion udledt. Dette gav den endelige løsning

$$\mathcal{Y}_{nlm}(\phi, \theta, \chi) = N_{lm} \cdot P_n^l(\cos \chi) \cdot Y_{lm}(\phi, \theta),$$

hvor $Y_{lm}(\phi, \theta)$ er den sfæriske harmoniske funktion i tre dimensioner, $P_n^l(\cos \chi)$ er den generaliserede associerede Legendre funktion, og N_{lm} er normaliseringsfaktoren. Der observeres at den sfæriske harmoniske funktion i fire dimensioner ikke kun er påvirket af kvantetallene m og l , men også n . Ud fra dette kan der tænkes, at de firedimensionelle orbitaler har en langt større kompleksitet end for tre dimensioner.

Ved at indsætte kvantetallene $n = 1$, $l = 0$ og $m = 0$ i ligningen, gav det funktionen for hydrogenatomets 1s-orbital $\mathcal{Y}_{1s} = \cos \chi$. Ved at tage projektionen af denne med variabel χ blev 1s-orbitalen

animeret i intervallet $\chi \in [0, \pi]$. Animationen indikerede, at orbitalen ville udstrække sig i to modsatte retninger langs w -aksen, hvilket udviser samme karakteristisk opførsel som 2D projektionen af en 3D p-orbital. Ligeledes indikerede animationen af den firedimensionelle p-orbital, at den udstrakte sig på samme måde som en normal d-orbital.

Funktionsudtrykket for s-orbitalen viste, at der kun eksisterer præcis én mulig s-orbital i fire dimensioner. Men idet denne ville opføre sig på samme måde som en p-orbital, ville man forvente at den havde fire mulige rotationer. Udartningen af de forskellige energiniveauer i den firedimensionelle harmoniske oscillator blev dermed udregnet for at finde ud af, om der rent faktisk kun eksisterer én s-orbital. Funktionsudtrykket for denne blev bestemt til at være $\binom{k+3}{k}$, hvor k er den specifikke skal. Disse udartninger blev brugt til bl.a. at opskrive det periodiske system for firedimensionelle atomer.

s	p	d
---	---	---

I	II	III	IV	
1	2	3	4	
H	He	Li	Be	
5	6	7	8	
B	C	N	O	
21	22	23	24	
Sc	Ti	V	Cr	
37	38	39	40	41-65
Rb	Sr	Y	Zr	
77	78	79	80	81-104
Ir	Pt	Au	Hg	
117	118			
Ts	Og			

V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	XIV	XV	XVI
9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	K	Ca
25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76
Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os
105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116
Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv

41	42	43	44	45	46	47	48	49	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65
Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd
81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104
Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Rf

Figur 1: Det periodiske system for de firedimensionelle orbitaler. Bemærk her at s-orbitalen opfører sig på samme måde som en p-orbital. Ligeledes for $p \rightarrow d$ og $d \rightarrow f$.

Diskussion & Konklusion

Ud fra resultaterne kan der hypoteseres, at overgangen fra 3D til 4D flytter ordenen af det azimuthale kvantetal l med $+1$. Dermed vil der umiddelbart ikke kunne eksistere en perfekt sfærisk orbital i fire dimensioner, fordi orbitalen med det laveste energiniveau ikke vil opføre sig på samme måde som en normal s-orbital. Resultaterne betyder også, at de simpleste atomer i første skal vil have flere retninger, hvori deres elektrontæthed udstrækker sig. Dette kan i princippet medføre, at et firedimensionelt hydrogenatom vil kunne danne lineære gitterstrukturer, hvilket fuldstændig ændrer på kemien af vand og organiske strukturer. Derudover vil stoffer som fluor og neon indeholde p-orbitaler, som vil opføre sig på samme måde som normal d-orbitaler. Dette betyder i princippet, at disse stoffer, samt alle i p-blokken, vil kunne danne komplekser.

Modellen for atomerne betyder dog ikke nødvendigvis, at den fjerde dimension rent faktisk eksisterer. Udartningen og løsningerne for den sfæriske harmoniske funktion indikerer nemlig blot, hvis de fandtes, at orbitaler og spin af partikler ville være meget mere komplekse, end hvis vi forestillede os det, på baggrund af vores tredimensionelle tankegang. Men fordi vi ikke observerer disse multidimensionelle tendenser i virkeligheden, kan der tænkes at vi heldigvis ikke lever i et univers som Edwin Abbott Abbotts - uvidende "spacelanders" i et firedimensionelt univers.