

Teoreettinen ja laskennallinen molekyylifysiikka

Juha Vaara

NMR-spektroskopian tutkimusyksikkö

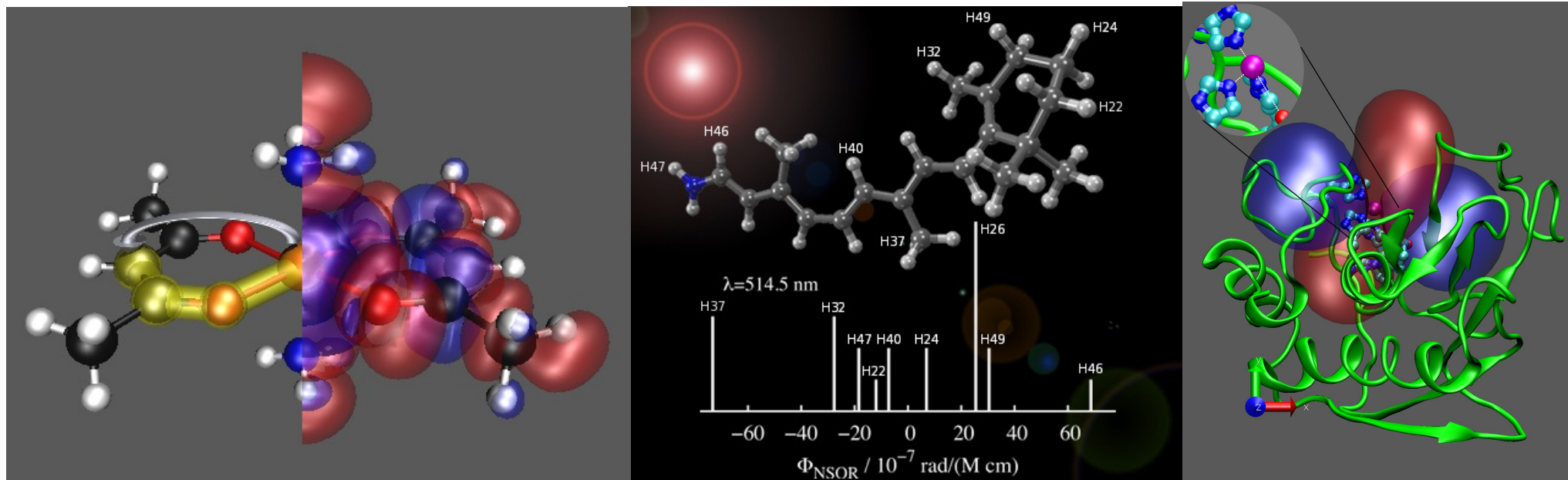
Oulun yliopisto



[Verkkosivu](#)

[Videosittely](#)

[Esittelyposterit](#)



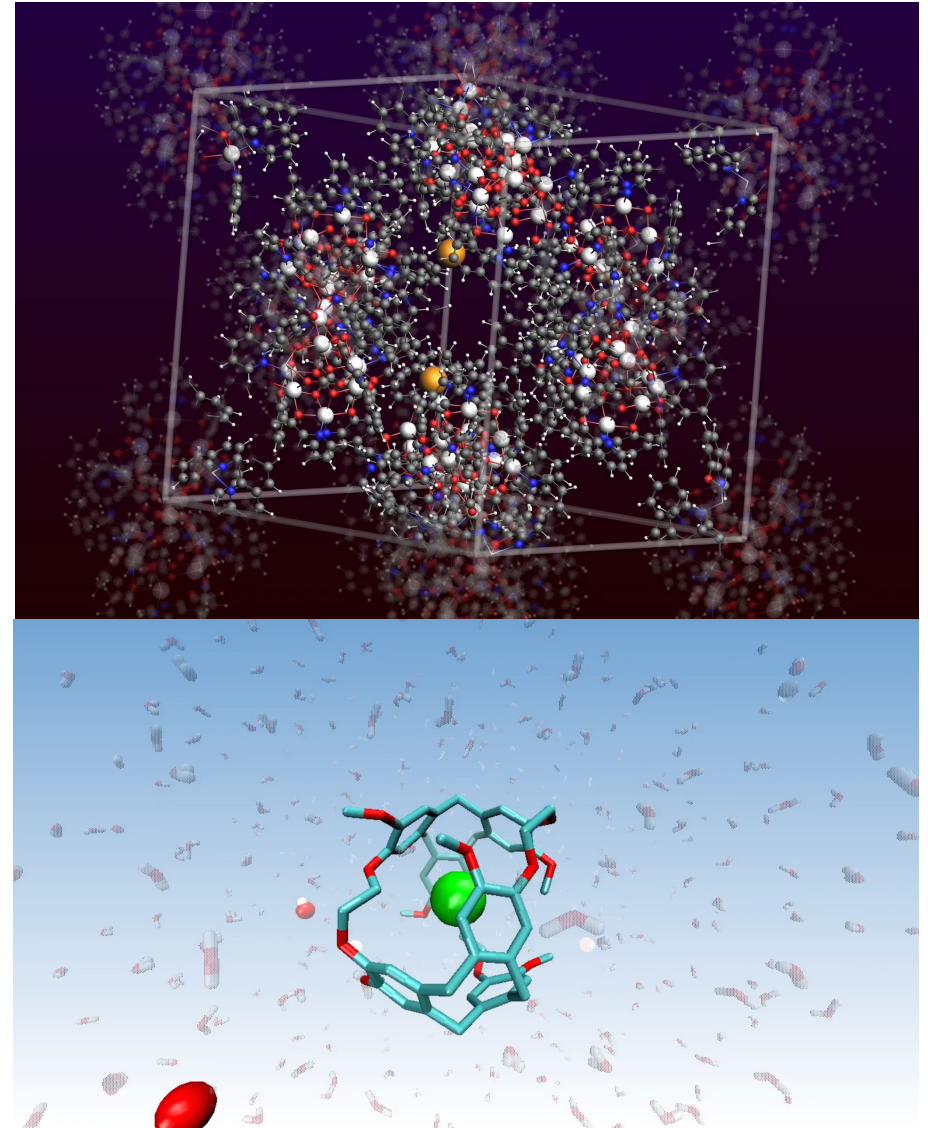
Mitä atomit ja molekyylit tekevät mikroskooppisella tasolla?



➡ Molekyylidynamiikan simulointi!

$$\frac{d^2 \mathbf{R}_K}{dt^2} = -\frac{1}{m_K} \nabla_K V(\{\mathbf{R}\})$$

- klassinen MD
- voimakentät koneoppimisella
- *ab initio* MD
- ydinten kvanttidynamiikka



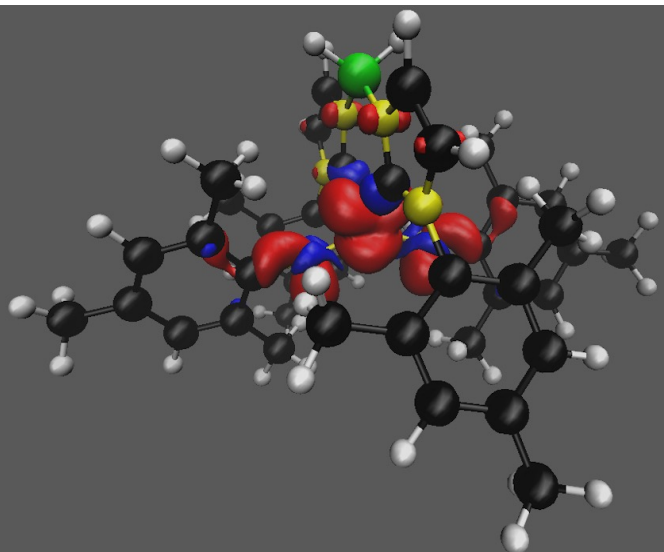
Mistä molekyyliin kohdistuvat voimat ja muut sähkömagneettiset ominaisuudet määräytyvät?



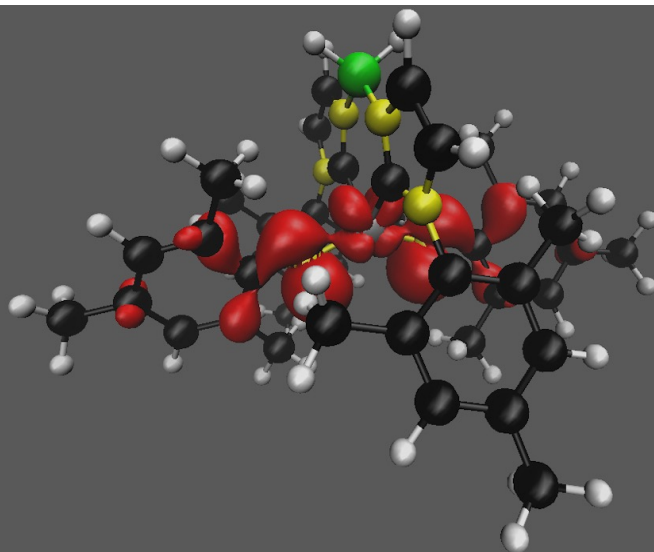
➡ Elektronirakennemallinnus!

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{iK} \frac{Z_K}{r_{iK}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi(\{\mathbf{r}_i\}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\{\mathbf{r}_i\})$$

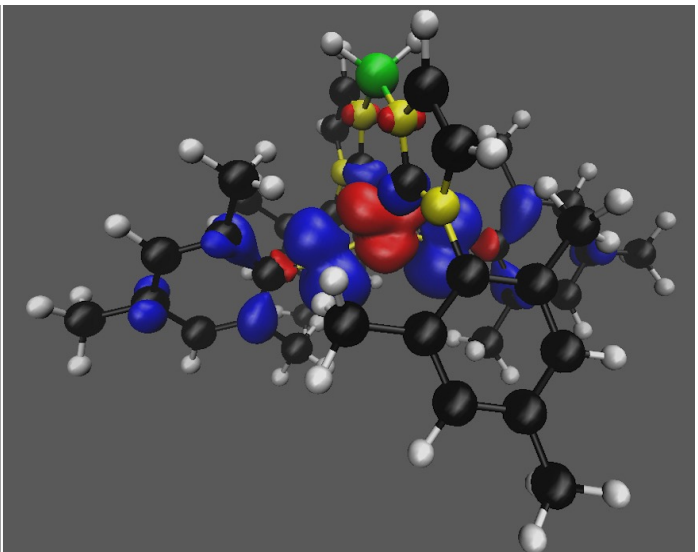
- elektronikorrelaatio
- suhteellisuusteoria
- magneettiset vuorovaikutukset



Spin Density



SOMO²



Spin Density - SOMO²

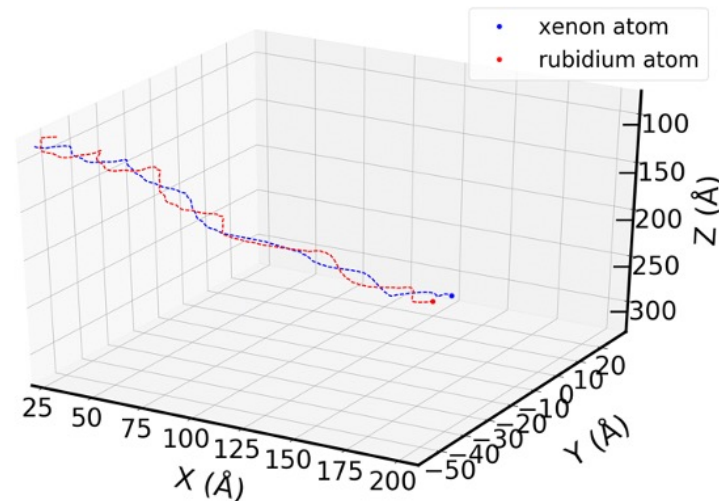
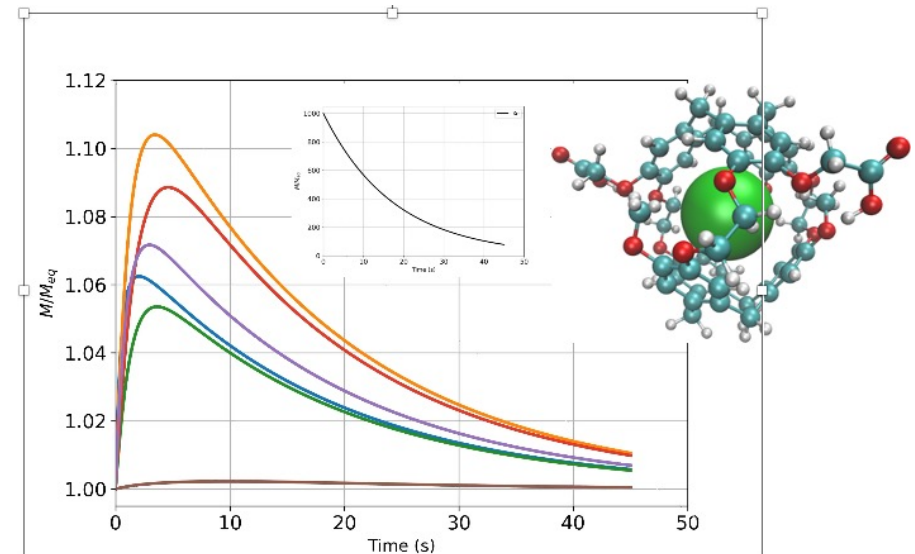
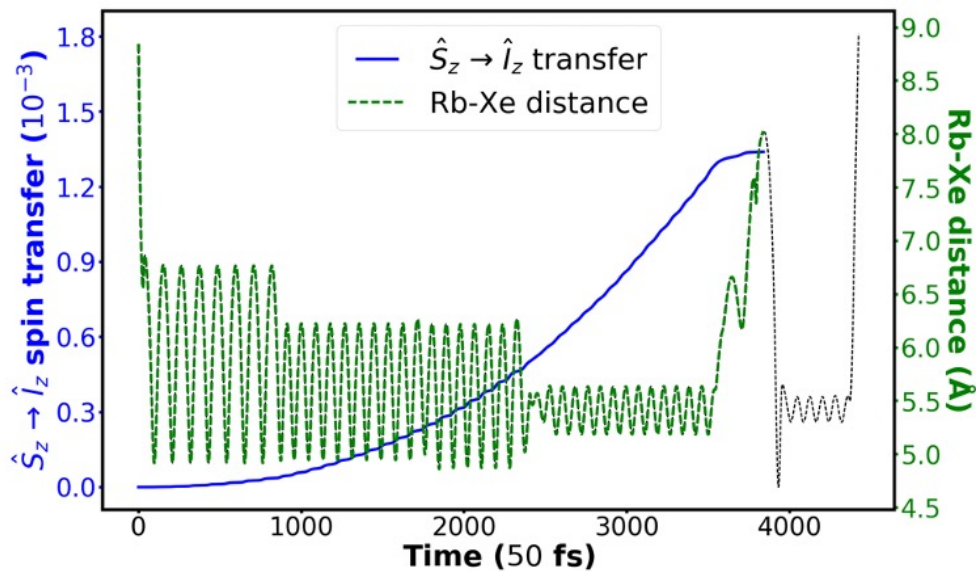
Mistä tulevat materiaalien magneettiset ominaisuudet?

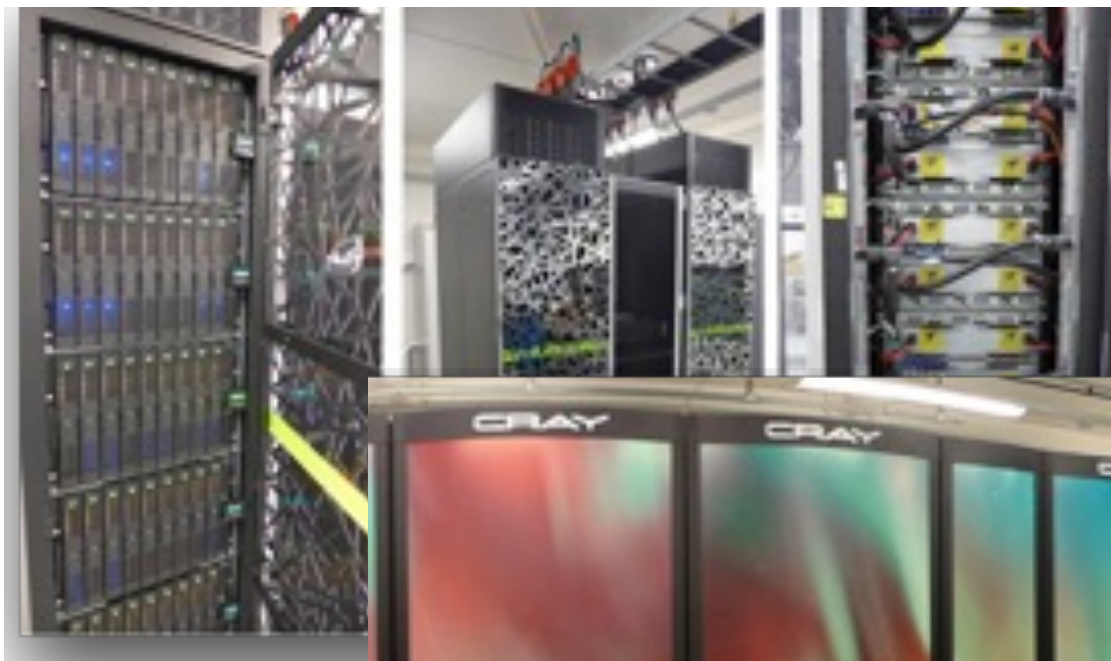


➔ Spindynamiikan simulointi!

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \left(\hat{L}_0 + \hat{R} + \hat{K} \right) \hat{\rho}(t)$$

- koherentti kvanttievoluutio
- dissipaatio ja kemiallinen vaihto
- NMR-spektrit ja relaksaatio
- magnetisaatiodynamiikka





Superlaskentaa

- teoriankehitys
- mallinnus- ja analyysiohjelmien koodaus
- suurtehosimulaatiot
- vertailu koetuloksiin



Ryhmät ja yhteystiedot:

NMR-spektroskopian tutkimusyksikkö, porras G2 / 2. ja 3. kerros:

• Professori Juha Vaara (juha.vaara@oulu.fi): Spinfysiikka ja teoreettinen spektroskopia

• Dosentti Perttu Lantto (perttu.lantto@oulu.fi): Materiaalien ja NMR-parametrien laskennallinen mallinnus

• Dosentti Akseli Mansikkamäki (akseli.mansikkamaki@oulu.fi): Molekyylimagnetismi ja yksittäismolekyylimagneetit

Ryhmä Vaara: Esimerkkejä v. 2025-2026 kandiaiheista:

- SABRE-hyperpolarisaatiokompleksien molekyylidynamiikka ja magneettiset vuorovaikutukset (MD+QC)
- SABRE-kompleksien kemiallinen dynamiikka (QC)
- SABRE-Relay –hyperpolarisaatiokompleksin spindynamiikka (SD)
- Veden NMR-relaksaatio kaasu- ja nestefaaseissa (MD+QC+SD)
- MOF-materiaalien ^{129}Xe NMR-mallinnus (MD+QC)
- SEOP-hyperpolarisaatiomenetelmän parametrit harvinaisille atomipareille (QC)