

Quantum mechanics and (bio)chemical processes

Pr. Orlando TAPIA-OLIVARES

(Uppsala University, Sweden)

Invité par Rob Meijers

Lundi 4 Février à 14h00
Grand Amphi Soleil

Abstract :

In this work we show the interest there is to represent chemical and biochemical processes as time evolution of quantum states. The quantum state is given within the linear superposition principle as sets of amplitudes (complex numbers) in an invariant set of base states. Once we label base states with quantum numbers characteristic of (or related to) chemical species they got a fixed signature. Chemical graphs help understanding this special way to look at chemical change. We present a computing method that may help seeing chemical and biochemical reaction in a way complementary to standard procedures. One fundamental result concerning chemical reaction involving electronic closed shell reactant and products is the quantum mechanical necessity for a TRANSITION STATE given by an open shell structure.

Formalités d'entrée : accès libre dans l'amphi du Pavillon d'Accueil. Si la manifestation a lieu dans le Grand Amphi Soleil du Bâtiment Central, merci de vous munir d'une pièce d'identité (à échanger à l'accueil contre un badge d'accès).

SYNCHROTRON SOLEIL

Division Expériences - L'Orme des merisiers - Saint-Aubin - BP 48 - 91192 GIF S/YVETTE Cedex

<http://www.synchrotron-soleil.fr/portal/page/portal/Soleil/ToutesActualites>

Secrétariat Division Expériences : sandrine.vasseur@synchrotron-soleil.fr