





Jens Peder Dahl

30. JULI 1934 - 17. FEBRUAR 2016

AF JAN LINDERBERG¹

Professor emeritus, dr.phil. Jens Peder Dahl afgik ved døden i februar 2016 efter nær ved tresindstyve års virke inden for kvantekemiens grundlag og anvendelser.

Gårdejersønnen Jens Peder, den næstældste af fem søskende, deltog i det daglige arbejde på gården Gl. Amstrup i Vroue ved Skive, men hans store interesse var læsning og litteratur. Lærer Augustin Kristensen ved landsbyskolen i Sjørup så tidligt evner hos drengen og gav ham adgang til skolens bibliotek allerede i lilleklassen. Han fik videre, efter at være kommet i storeklassen, mulighed for at studere engelsk og tysk i form af brevkurser. Hjemmets læge Højgrav hjalp med at rette udtalen til. Med støtte især fra moderen opfordrede læreren til, at den videbegærlige Jens Peder skulle gå videre til Viborg Katedralskole efter konfirmationen. Han blev optaget der i tredje mellem. Dermed begyndte en femårsperiode som pendler, selv om ordet nok ikke var brugt dengang. Det var godt tyve kilometer i rutebil morgen og aften. Den matematisk-naturvidenskabelige studentereksamen var i hus ved dimissionen i 1954. Høje karakterer gav ham adgang til det prestigefyldte kemiingeniørstudie ved Polyteknisk Lærestanstalt.

Egmont H. Petersens kollegium blev hans hjem under studietiden i København. Om sommeren blev kollegiet anvendt som hotel, og som bartender kunne han styrke sin økonomi og færdighed i væskekemi. Udover sit specialefag teknisk biokemi interesserede han sig for kvantemekanik og relativitetsteori. Der oplevede han sin

manglende matematiske baggrund og brugte tid til at blive dygtigere til analyse og algebra sideløbende med ingeniøruddannelsen. Han blev tilkendt cand.polyt.-graden i begyndelsen af 1959.

Amanuensis Thor A. Bak ved Fysisk-Kemisk Institut inspirerede Dahl til at lade sig immatrikulere som licentiatstuderende med begyndelse i februar 1959. Vejleder blev professor Jørgen Koefoed, men en skelsættende sommerskole bragte Carl Johan Ballhausen på banen som mentor. Det gode forskningsmiljø var stimulerende, og flere af de unge fik mulighed for at komme til Lidingö ved Stockholm og Per-Olov Löwdins anden *International Summer School in Quantum Chemistry*. Her mødtes deltagerne af et stort antal forelæsere, der behandlede grundlæggende kvantemekaniske begreber, matematiske formalismer og anvendelser. Dahl hæftede sig særligt ved den hollandske kemisk-fysiker Laurens Jansens fremstilling af teorien for endelige grupper. Det satte sig spor i hans fremtidige virke. Endvidere kom Ballhausen som gæsteforelæser, hvorved Dahl fik lejlighed til at aftale et fortsat licentiatstudie. Sommerskolen bød også på personlige kontakter, og han lærte blandt andre Roald Hoffmann at kende. De genoptog deres bekendtskab nogle år senere i Cambridge, Mass.

Opgaven, der skulle behandles for licentiatgraden, gjaldt ferrocenmolekylets bindingsforhold ud fra molekylorbitalmodellen. Ferrocen er en såkaldt sandwich-forbindelse, hvor to cyklopentadienyl-ringe binder til et jernatom. Molekylet unddrager sig det traditionelle billede med toelektronbindinger mellem atomer. Selv inden for Pauling-Slater-beskrivelsen med ”rettet valens” må man give op. Hver af de to ringe har fem atomer med umættede bindinger, og jern bidrager med seks. Molekylorbitalmodellen tager som udgangspunkt, som et minimum, at der er ti atomorbitaler fra ringene og seks fra det centrale jernatom. Disse danner et Hilbertrum i seksten dimensioner, hvoraf et underrum i otte skal bestemmes som beskrivelse af bindingsforholdene. Molekylorbitalerne er så lineære kombinationer af atomorbitaler og er optimale med hensyn til elektronfordelingens totale energi, som den formuleres i det kvantemekaniske variationsprincip. Beregningerne fører formelt til at evaluere vekselvirkningsintegraler mellem $16 \times 17 / 2 = 136$ atomorbital-produkter. Det giver $136 \times 137 / 2 = 9316$ integraler over seks dimensioner. Dahl havde ikke adgang til elektroniske hjælpemidler og var henvist til elektromekaniske maskiner. Systemets symmetri og forskellige tilnærmelser bringer dog tallet betydeligt ned, og det var muligt at finde de ønskede værdier, at sætte dem ind i de rigtige ligninger og at komme frem til resultater. Således var licentiatafhandlingen en bemærkelsesværdig bedrift, og dens væsentligste resultater kunne publiceres i dette Selskabs Matematisk-fysiske Meddelelser.

Dahl modtog diplommet for licentiatgraden i januar 1961 og påmønstrede så i flåden som værnepligtig. Opgaverne var af beregningsmæssig art, og med tiden blev han udstationeret ved Regnecentralen. Det gav mulighed for at blive fortrolig med elektronisk databehandling, og med adgang til disse maskiner blev der i fritiden lejlighed til at udføre kvantekemiske beregninger. Han blev hjemsendt som søløjtnant I af reserven efter to år i januar 1963.

Fulbright-organisationen var villig til at betale rejsen i forbindelse med et studieophold i USA, og Ballhausen formidlede kontakten til professor John C. Slater ved Massachusetts Institute of Technology i Cambridge, Mass. Slaters *Solid-State and Molecular Theory Group (SSMTG)* var den måske fremmeste, når det gjaldt udvikling af beregningsmåder, og man havde adgang til de bedste maskiner. Foruden de postdoktorale medarbejdere og studerende ved SSMTG var der et godt teoretisk miljø ved Harvard Universitetet, hvor Ballhausen havde opholdt sig nogle år tidligere, og hvor professor William Lipscomb (Nobelpristager 1976) fostrede Roald Hoffmann (Nobelpristager 1981). Halvandet år i USA udviklede Dahls videnskabelige evner, og hans og hans kones liv blev præget af de kontakter og venskaber, der blev stiftet. Det videnskabelige arbejde ved MIT vedrørte kobberoxids elektronstruktur. Krystalformen er en halvleder, og båndstrukturen i elektrontilstandenes spektrum bruges til at beskrive stoffets egenskaber. Flere publikationer fulgte af dette arbejde. Dahl brugte også tid på andre projekter, blandt andet besvarede han Københavns Universitets prisopgave i organisk kemi 1963 om beregning af heterocykliske forbindelsers dipolmomenter. Opgaven belønnedes med guldmedalje.

Ved hjemkomsten fra MIT ansatte Københavns Universitet Dahl som amanuensis ved Kemisk Laboratorium IV, der bestyredes af Ballhausen, og tildelte ham et lektorat i valensteori. Laboratoriet var etableret i det nybyggede H.C. Ørsted Institut, der også rummede de andre kemiske afdelinger samt fysiske og matematiske fag. Som lektor fik han opgaven at etablere det nye førstedelsfag Kemi 6, hvorved kvantekemien nåede en lignende stilling som de mere klassiske discipliner inden for kemi. Det nye fag blev valgt af flere dygtige studerende, som senere fortsatte mod specialestudium og kandidatgrad. Blandt disse var Tom Ziegler, der indvalgtes i Videnskabernes Selskab som udenlandsk medlem i år 2000.

Kvantekemi blev et obligatorisk fag for kommende kemiingeniører ved Danmarks Tekniske Højskole i 1968, og som ekstern lektor underviste Dahl med entusiasme de store hold. Han knyttedes til DTH som professor i kemisk fysik i juni 1972 og forlod da Ørsted Instituttet. Dahl præsenterede og forsvarede disputatsen *The independent-particle model* ved Universitetet i september samme år og modtog

den filosofiske doktorgrad. Professor Inga Fischer-Hjalmars og Ballhausen virkede som opponenter. Afhandlingen behandler, på en personlig måde, molekylorbitalmodellen. Den var en central del af Dahls videnskabelige arbejde siden dets begyndelse, og i disputatsen formuleres en form for fortolkning af modellens resultat vedrørende elektronfordelingen i atomer og kemiske bindinger. Bogen blev også brugt i undervisningen. Kvantekemikurset blev gjort frivilligt for de ingeniørstuderende ved modulstudieplanens vedtagelse i 1972, og holdstørrelsen blev væsentligt mindre.

Da undervisningsopgaven blev mindre, indvilligede Dahl i at påtage sig bestyreropgaven for Kemisk Laboratorium B ved professor R. W. Asmussens afgang i 1974. Professoratet blev genbesat med Rolf Norrestam, og med et nyt røntgen-diffraktometer for krystalstrukturbestemmelser blev forskningsmiljøet aktiveret. Dahls egen interesse var fortsat fokuseret på kvantemekanikken og relativitetsteorien.

Tjenestemandsstillingen forlangte ikke forskning, der førte til fakturaer, men tillod abstraktion og koncentration om grundlæggende ting. Der kommer elektronens spin til at være af særlig interesse. Det er næppe indlysende at indse, hvordan en partikel af meget uanseelig størrelse skal beskrives som et roterende legeme. Diracs ligning for elektronen i kovariant form var resultatet af en analytisk-algebraisk proces, hvor partiklens struktur ikke indgik. Dahls nysgerrighed og matematiske dygtighed gav et nyt billede af baggrunden for elektronens spin. Afhandlingen *The Spinning Electron* udkom i Selskabets Matematisk-fysiske Meddelelser 1977. Han går ud fra den kvantemekaniske rotor og udleder de nødvendige betingelser for at gøre ligningerne forenelige med Einsteins firedimensionale rum-tid. Elektroniske systemers spintilstande er afgørende og karakteristiske for mange kemiske fænomener såsom bindinger, paramagnetisk resonansspektroskopi, fotokemiske reaktioner, såkaldte *intersystem crossings* blandt mange andre. Dahls fremstilling giver et udvidet billede af elektroniske systemers spinstrukturer.

De elektronstrukturberegninger, som Dahl udførte under sit ophold ved Slaters gruppe, var baseret på forestillingen om, at potentialet, der bestemte de stationære en-elektrontilstande, var lokalt og bestemt af elektrontætheden. På denne tid var Slaters tilnærmelse den almindeligt brugte. Efter 1964 samledes interessen om det Hohenberg-Kohnske teorem, der viste, at elektrontætheden kunne opfattes som den altafgørende størrelse ved diskussioner om elektronstruktur. Walter Kohn udviklede så sammen med Lu Jeu Sham den metode, som gav en ny retning for beregninger vedrørende molekylers og faste stoffers elektronstruktur. Nu blev de kendte algoritmer anvendt på en ny måde. Den veletablerede, selvkonsistente Hartree-

Fock-metode, der forudsatte integraler fra det ikke-lokale potentiale, der sikrede, at den resulterende tilstandsfunktion var forenelig med Paulis udelukkelsesprincip, erstattedes af en metode, hvor de seksdimensionale integraler elimineredes og repræsenteredes af tredimensionale, der indtil videre bestemmes ved empiriske tilpasninger, som kan simulere såkaldte korrelationseffekter.

Dahls interesse for udviklingen af tæthedsfunktionalmetoder førte til, at han sammen med John Avery arrangerede et videnskabeligt møde. Bidragene ved dette blev udgivet i en bog med titlen *Local Density Approximations in Quantum Chemistry and Solid State Physics* (Plenum, 1984). En beskrivelse, der kun er baseret på elektrontætheden, har elimineret detaljer, hvor information om hastighedsfordelingen er gemt. Dahl gik ind i studiet af faserumsfunktioner i Eugene Wigners ånd. Her balanceres elektrontætheden og impulstætheden, impuls er proportional med hastighed i klassisk kinematik. Interessen gav kontakt til Wolfgang Schleich i Ulm, hvilket resulterede i Humboldt-Forschungs-Preis 2000 og en række ophold i Ulm.

Dahl samlede ved udgangen af det tyvende århundrede sine erfaringer fra undervisning og forskning i kvantekemi i en monografi med titlen *Introduction to the Quantum World of Atoms and Molecules*, der blev udgivet af World Scientific 2001. Bogen karakteriseres ved nøjeregnende valg af anvendelser og præcist formulerede opgaver. Læseren får først den historiske fortælling om kvanteteorien nødvendighed og opståen for så siden at blive ledt ind på Schrödingers ligninger og de analytisk tilgængelige problemer. Atomteorien med termsymboler og spinkobling føres videre til enklere molekyler, vibrations- og rotationsenerginiveauer. Formalia såsom variationsmetoden, Hartree-Fock-algoritmen og Kohn-Sham-fremstillingen præsenteres i de senere kapitler velformuleret og med kritisk tilbageholdenhed.

Jens Peder Dahl blev min bekendte ved sommerskolen i 1959, og vi blev kollegaer og venner, da jeg fik ansættelse i Aarhus. Med fælles interesse for det ny fag Kemi 6 delte vi erfaringer og skiftedes til at være censorer ved eksaminer. Venskabet fordybedes og kom til at omfatte vore familier. Samarbejdet er også kommet til udtryk inden for Sektionen for Teoretisk Kemi under Kemisk Forening. En gruppe ved Ørsted Institutet lod indkalde til en stiftende generalforsamling den 3. december 1969. Dahl blev valgt som formand for bestyrelsen af den ny sektion, og sammen med Svend Erik Nielsen indtrådte jeg også i bestyrelsen. Sektionen havde 38 medlemmer den 1. marts 1970 og er fortsat aktiv med arrangementer. Der var samtidig nær kontakt med sektionen for atomfysik under Dansk Fysisk Selskab gennem flere år.

Det administrative gen fik aldrig overtaget hos Dahl, der i 1978 blev indvalgt i Videnskabernes Selskab. Han var for mig personificeringen af videnskabsmanden, som er dedikeret sit fag og større end de modsætninger, der ofte opstår i universitetsmiljøet. Han er savnet, men har efterladt sig væsentlige spor og en videnskabelig arv at forvalte.

Ære være Jens Peder Dahls minde.

¹ Familien Dahl har velvilligt ladet mig medtage dele af det personlige materiale om Jens Peder, og ph.d. Stephan Sauer har givet mig adgang til Sektionen for Teoretisk Kemis arkiv og til Kasper Rytter Falster Detlefsens specialeafhandling *Historiske aspekter af kvantekemien i Danmark. Et case study af Jens Peder Dahl*. Torkild Andersen har venligst fjernet svecismer fra min oprindelige tekst.