

Moderne fysikk for bachelorstudenter

Bjarne Stugu

Forord

Trass massiv anglifisering av universitets- og høyskolesektoren, så foregår fortsatt undervisningen for Bachelorstudenter i fysikk på norsk. Det burde da også finnes læreverk på norsk for denne gruppen av studenter. Rundt årtusenskiftet ble det utgitt to glimrende lærebøker som dekker den klassiske delen av fysikkpensumet, Generell Fysikk, bind I Mekanikk (Jan R. Lien og Gunnar Løvhøiden) og bind II Varmelære og elektromagnetisme (Egil Lillestøl, Ola Hunderi og Jan R. Lien). Et bind III om moderne fysikk ville gjort læreverket komplett, men er aldri blitt utgitt. Motivasjonen for denne boka er dermed å gi framstilling av moderne fysikk på norsk for denne gruppen studenter, og andre interesserte.

Dette kompendiet har blitt til etter å ha undervist to kurs i moderne fysikk for bachelorstudenter i fjerde og femte semester ved Universitetet i Bergen i en årrekke. Det definerer pensum for disse kursene, og inneholder også en del regneoppgaver. Det er ment å dekke alle deler av moderne fysikk på et nivå som passer alle bachelorstudentene, før de i siste semester velger fordypningsemner rettet mot en spesifikk mastergrad. Graden av fordypning i de forskjellige fagfeltene er dermed relativt begrenset.

Boka vil nok være litt for knapp som eneste kilde til å lære seg pensum. Men i vår tid er det jo lett å finne godt tilleggsmateriale på nettet. Wikipedia har ofte god informasjon, i alle fall den engelske versjonen. Det fins også mye gode videoer på Youtube, men her finner man ofte ut at man har brukt alt for lang tid på videoer som ikke har truffet særlig bra på det man ønsker å lære. Det er lagt ut noen noen pythonprogrammer som kan være av interesse, på

<https://github.com/bstugu/Modernefysikk>.

Mange av disse ble brukt for å lage figurer i boka (og bildet på forsiden). Noen av disse programmene kan også være løsninger av oppgaver der det bes om lage data-programmer.

Noen konstanter og omregningsverdier

Den moderne fysikken handler i stor grad om hvordan naturens byggestener fungerer, og om hvordan makroskopiske fenomener forklares utfra den mikroskopiske beskrivelsen. Det er naturlig å erstatte energienheten Joule med elektronvolt, som er den kinetiske energien som et elektron i ro oppnår når det akselereres i et felt satt opp av en spenningsforskjell på 1 volt. Videre er det svært ofte hensiktsmessig å oppgi partikkelmasser som hvileenergier i eV/c^2 isteden for i kg. SI systemet (Système international d'unités) tar utgangspunkt i lyshastigheten, Plancks konstant, Boltzmanns konstant og elektronladningen som eksakte naturkonstanter. De andre konstantene oppgis her med et passende antall siffer.

navn	symbol	verdi	enhet
Lyshastigheten	c	$2,99792458 \times 10^8$	m/s
Plancks konstant	h	$6,62607015 \times 10^{-34}$	Js
Boltzmanns konstant	k	$1,380649 \times 10^{-23}$	J/K
elektronladning	e	$-1,602176634 \times 10^{-19}$	C
	\hbar	$4,136 \times 10^{-15}$	eVs
	$\hbar = \frac{h}{2\pi}$	$6,583 \times 10^{-16}$	eVs
	hc	1240	eV nm
	$\hbar c$	197	eV nm
	k	$8,617 \times 10^{-5}$	eV/K
masse-enhet	u	931,494	MeV/c^2
	u	$1,66054 \times 10^{-27}$	kg
Elektronets masse	m_e	$9,1094 \times 10^{-31}$	kg
	m_e	511,0	keV/c^2
Protonets masse	m_p	938,28	MeV/c^2
Nøytronets masse	m_n	939,57	MeV/c^2
Ladning for svak kjernekraft	$g \approx \frac{e}{0,23}$		C
Fermi koblingskonstant $G_F = \frac{\sqrt{2}g^2}{m_W^2}$	$G_F/(\hbar c)^3$	$1,166 \cdot 10^{-5}$	GeV^{-2}
tomromspermittivitet	ϵ_0	$8,854 \times 10^{-12}$	F/m
Finstrukturkonstanten	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$	$\approx \frac{1}{137}$	
Newtons gravitasjonskonstant	G	$6,674 \times 10^{-11}$	$Nm^2 kg^{-2}$
1 elektronvolt	eV	$1,60218 \times 10^{-19}$	J
1 Joule	J	$6,242 \times 10^{18}$	eV
Avogadros tall	N_A	$6,02214 \times 10^{23}$	mol^{-1}

N_A , er antall atomer i 0,012 kg av nukliden ^{12}C og defineres eksakt lik $6,02214076 \times 10^{23}$. m_W er massen til W -bosonet.

Innhold

Forord	iii
1 Relativitetsteori	1
1.1 Galileitransformasjoner	1
1.1.1 Invarianter i Galileitransformasjoner	2
1.2 Postulatene i spesiell relativitetsteori.	3
1.2.1 Postulatene	3
1.2.2 TidsdilaTAsjon	4
1.2.3 Lengdekontraksjon	6
1.3 Lorentztransformasjon	7
1.3.1 Tidsdilatasjon, versjon 2	10
1.3.2 Lengdekontraksjon, versjon 2	10
1.3.3 Tidrom ('Spacetime')	11
1.3.4 Dopplereffekten	12
1.4 Tvillingparadokset	14
1.5 Addisjon av hastigheter	15
1.6 Invarianter, firervektorer	16
1.7 Dynamikk	18
1.7.1 Newtons 2. lov	19
1.7.2 Arbeid og hvorfor $E = mc^2$	20
1.7.3 Energi - bevegelsesmengde - Invariant masse, Mandelstam-variabelene s og t	21
1.7.4 Lorentztransformasjon av energi og bevegelsesmengde	23
1.8 Comptonspredning	25
1.9 Postulat i generell relativitetsteori	27
1.10 Oppgaver	30
2 Mot kvantemekanikken	35
2.1 Sort stråling	36
2.2 Lysets partikkelnatur	39
2.2.1 Den fotoelektriske effekt	39

2.2.2	Comptonspredning	41
2.2.3	Pardannelse	44
2.2.4	Fotondiffraksjon gjennom spalte.	44
2.2.5	Heisenbergs usikkerhetsrelasjon	45
2.2.6	Dobbeltspalte	46
2.3	Røntgenstråling	47
2.4	Radioaktivitet og Rutherfords eksperimenter	50
2.5	Bohrs atommodell	52
2.6	Materiebølger	54
2.7	Oppgaver	57
3	Kvantemekanikk	61
3.1	Partiklenes bølgenatur	62
3.1.1	Bølgefunksjoner og bølgepakker	63
3.1.2	Betrakninger rundt bølgefunksjonen.	65
3.2	Schrödingerligningen	67
3.2.1	Fri partikkel	67
3.2.2	Schrödingerligningen for en partikkel bundet i et potensial	69
3.2.3	Tidsutvikling	70
3.3	Løsninger av Schrödingerligningen	71
3.3.1	Krav til bølgefunksjonen	71
3.3.2	Partikkel i boks	71
3.3.3	Potensialbarriere og tunnelleffekt	75
3.3.4	Harmonisk oscillator	77
3.3.5	Deltafunksjon-potensialet	81
3.4	Kvantemekanikkens postulater	83
3.5	Tidsutvikling av system med to energinivåer	85
3.6	Oppgaver	88
4	Tre dimensjoner og hydrogenatomet	93
4.1	Partikkel i boks	93
4.1.1	Degenerasjon i kubisk beholder	94
4.2	Coulombpotensialet	96
4.2.1	Vinkelavhengighet og banespinn	98
4.2.2	Radialligningen	101
4.2.3	Nomenklatur	115
4.2.4	Oppsplitting av energinivåene i magnetfelt	115
4.2.5	Egenspinn: elektronets indre angulære moment.	116
4.2.6	Spinn-banekobling	119
4.2.7	Spinn-Spinn kobling	121

4.2.8	Mer nomenklatur	122
4.3	EPR paradokset	122
4.4	Oppgaver	125
5	Atomer med fler elektroner	127
5.1	Identiske partikler, Eksklusjonsprinsippet	127
5.2	Degenerasjon og skallmodell	130
5.2.1	Ionisasjonsenergi - elektronaffinitet	132
5.3	Strålingsoverganger, spektroskopi	133
5.3.1	Sentralfelt-tilnærming, skjerming	134
5.3.2	Tids-symmetri	139
5.4	Oppgaver	140
6	Molekyler og molekylbindinger	143
6.1	To-atomige bindinger	143
6.1.1	Kovalente bindinger	143
6.1.2	Rotasjonstilstande	144
6.1.3	Vibrasjonstilstande	145
6.1.4	Strålingsoverganger i molekyler	147
6.2	Ionebindinger	148
6.3	Van der Waals bindinger	149
6.3.1	Hydrogenbindinger	149
6.4	Oppgaver	149
7	Statistisk fysikk	151
7.1	Bakteppe: termodynamikken	151
7.2	Maxwells hastighetsfordeling	154
7.3	Entropi og termodynamikkens andre hovedsetning	156
7.4	Noen termodynamiske størrelser	158
7.5	Statistikk: Oppstelling av tilstander	159
7.5.1	Mynt og kron (og en paramagnet)	159
7.5.2	Mikrotilstand - makrotilstand	163
7.6	Identifiserbare partikler	163
7.6.1	Maksimering av antall mikrotilstander	165
7.6.2	Temperatur	167
7.6.3	Oppsummering, og et uttrykk for entropi	169
7.6.4	Partisjonsfunksjonen	170
7.6.5	Varmekapasiteten til et krystall	171
7.6.6	Flere dimensjoner	173
7.6.7	Partisjonsfunksjon for systemer	174
7.7	Identiske partikler og ideelle gasser	175

7.7.1	Partisjonsfunksjonen for en ideell gass	178
7.7.2	Egenskaper til en ideell gass	178
7.7.3	Hastighetsloven fra Boltzmannfordelingen	180
7.8	Diatomiske gasser	181
7.8.1	Rotasjonsenergi	181
7.8.2	Vibrasjonsenergi	183
7.8.3	Oppsummering for diatomiske gasser	183
7.9	Kvantestatistikk	184
7.9.1	Fermi-Dirac-statistikk	184
7.9.2	Fermigass	187
7.9.3	Bose-Einstein statistikk	189
7.9.4	Fotoner og sort stråling	189
7.9.5	Einstein's tilnærming til sort stråling - og laser	193
7.10	Oppgaver	196
8	Faste stoffer	203
8.1	Studier av faste stoffer	203
8.2	Klassifisering av krystaller	205
8.3	Krystaller med ionebindinger	208
8.3.1	Form av potensialet følt av et ion i gitteret	211
8.3.2	Van der Waals bindinger	212
8.4	Metaller	214
8.4.1	Elektroner som Fermigass	214
8.4.2	Ohms lov	215
8.4.3	Periodiske potensial og Blochtilstander	218
8.5	Halvledere	221
8.5.1	Ledningsevne i halvledere.	221
8.5.2	Doping av halvledere	225
8.5.3	p-n overganger	225
8.5.4	Anvendelser av halvlederdioder	228
8.5.5	Transistor	231
8.6	Superledere	233
8.7	Oppgaver	236
9	Kjernefysikk	239
9.1	Protoner og nøytroner	239
9.2	Tyngre kjerner	241
9.3	Kjernens oppbygging	242
9.3.1	Bindingsenergi og Q-verdi	243
9.3.2	Antall protoner og nøytroner i stabile kjerner	246
9.3.3	Kjernespin og magnetiske moment	248

9.3.4	MR: Kjernemagnetisk resonans	248
9.4	Radioaktivitet	249
9.4.1	Naturlig radioaktivitet i og på jorda	250
9.4.2	C-14 datering	251
9.4.3	Enhet for radioaktivitet	252
9.5	Den sterke kjernekraften og modeller for kjerner	253
9.5.1	Nukleoner som Fermigass i en potensialbrønn	254
9.5.2	Dråpemodellen og empirisk masseformel	255
9.5.3	Skallmodell	258
9.6	Kjernreaksjoner	258
9.6.1	α -henfall	259
9.6.2	β -henfall	262
9.6.3	γ -stråling	264
9.6.4	Elektroninnfanging	264
9.7	Ioniserende stråling	265
9.7.1	Doser av ioniserende stråling	266
9.7.2	Hva slags skader gir strålingen?	268
9.7.3	Kreftbehandling / Store doser	273
9.7.4	Prototerapi	274
9.7.5	PET - PositronEmisjonTomografi	274
9.8	Induserte reaksjoner	276
9.8.1	Virkningstverrsnitt	276
9.8.2	Fisjon	279
9.8.3	Kjedereaksjon og kritisk masse	280
9.9	Kjernereaktor	282
9.9.1	Brenselet	282
9.9.2	Styring og kjøling av reaktoren	283
9.9.3	Fordeler og ulemper med kjernekraft	284
9.10	Elementenes opprinnelse - Kjernefysiske prosesser i stjerner	285
9.10.1	Prosesser i sola	285
9.10.2	Prosesser i tyngre stjerner og supernovaeksplosjoner	286
9.11	Oppgaver	286
10	Partikkelfysikk	291
10.1	Prosesser og bevaringslover	293
10.2	Vekselvirkninger og kvantefelt-teori	295
10.2.1	Feynmandiagrammer	295
10.2.2	Spredning og prosesser med to vertekspunkter	297
10.2.3	Feltpartikler med hvilemasse	300
10.2.4	Oppsummering om Feynmandiagrammer	303
10.3	Fler bevaringslover	304

10.3.1 T - Tidsreversjon	304
10.3.2 P - Paritet	304
10.3.3 C - Ladningskonjugasjon	306
10.4 Invariant masse og kollisjonsenergi	306
10.5 Levetid, forgreningsforhold og bredde	308
10.6 Myonet, τ -leptonet, og svake vekselvirkninger	309
10.7 Kvarker i svake vekselvirkninger	311
10.8 Foreløpig oppsummering om svake vekselvirkninger	311
10.9 Sterk kjernekraft, hadroner,kvarker,gluoner	312
10.9.1 e^+e^- -kollisjoner	313
10.9.2 Proton-proton, og antiproton-proton kollisjoner	314
10.10 Z^0 -bosonet. Antall generasjoner og forening av vekselvirkninger.	318
10.11 Higgs-bosonet	320
10.12 Beregninger ved hjelp av Feynmandiagram.	323
10.12.1 Omskriving av Diracligningen	323
10.12.2 Feynmandiagram	323
10.13 Oppgaver	325
10.14 Liste over partikler	326
11 Kosmologi	329
11.1 Observasjoner av himmellegemer	330
11.1.1 Enheter i astronomien	330
11.2 Hubble-ekspansjon	331
11.3 Λ - CDM modellen	333
11.4 Universets utvikling	339
11.4.1 Det store smellet og kosmisk bakgrunnstråling	339
11.4.2 Inflasjon (oppblåsing)	340
11.4.3 Kvark-gluon plasma	343
11.4.4 Skapelse av baryoner	343
11.4.5 Skapelse av lette kjerner	345
11.4.6 Dagens kosmiske bakgrunnstråling	345
11.4.7 Den mørke tiden, og dannelse av stjerner og galakser .	345
11.4.8 Dagens og framtidens univers	346
11.5 Enhetsteori og Planck-enheter	347
A Noen formler og integraler	349
B Statistikk	351
B.1 Middelverdi og standardavvik	351
B.1.1 Sammenhengen med sannsynlighetsbegrepet	353
B.2 Poissonstatistikk og -fordeling	355

C Dirac's 'Bra - Ket' formalisme	357
D Deteksjon av partikler og stråling	361
D.1 Ionisasjonsdetektorer av gass	361
D.2 Silisiumdetektorer	363
D.3 Magnetfelt	363
D.4 Måling av energi ved absorbsjon	364
E Det periodiske system	367

Kapittel 1

Relativitetsteori

Kunnskapen om elektrisitet og magnetisme nådde nye høyder da Maxwell formulerte sine fire ligninger, og viste at elektrisitet og magnetisme hadde samme kilde, nemlig elektrisk ladning i ro eller i bevegelse. Med ligningene fikk man en enhetlig beskrivelse i én teori, elektromagnetismen. Med ligningene kunne man forutsi eksistensen av elektromagnetiske bølger. Ligningen man kom fram til for elektriskt felt i vakuum var:

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (1.1)$$

og tilsvarende for B-feltet. De elektiske og magnetiske feltene brer seg utover som transverse bølger i rommet med en hastighet $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$. Verdien av denne hastigheten (svært nær 3×10^8 m/s) var lik lyshastigheten. Det var dermed nærliggende å undersøke om synlig lys også er elektromagnetiske bølger.

Einstein var opptatt av en merkelig side av de elektromagnetiske bølgene: Maxwells ligninger forutsier at bølgene brer seg utover med samme hastighet, uansett valg av referansesystem for observasjonen. Lyset fra en lyskilde vil altså oppfattes som å bre seg utover med samme hastighet for en observatør i ro på jorda som for en observatør som beveger seg med en vilkårlig høy hastighet relativt til jorda. Dette strider mot vanlige forestillinger. Det fins et utall populærvitenskapelige framstillinger av relativitetsteorien, blant annet [1] og [2].

1.1 Galileitransformasjoner

I slutten av 1500- og begynnelsen av 1600-tallet vokste det fra erkjennelser som førte fram til vår Newtonske mekanikk. Blant frontfigurene var Galileo

Galilei, som blant annet viste at alle ting faller like fort i tyngdefeltet (uansett vekt) ved falleksperimenter fra det skjeve tårn i Pisa. Han utformet også lover om treghet, akselerasjon, og referansesystemer. Hvordan matematikken for overgang mellom systemene skal håndteres, bærer derfor hans navn.

Dersom man reiser med et skip med lukkede øyne på en godværsdag, vil det føles som man befinner seg i ro sammen med alle andre objekter på skipet. Med lukkede øyne kan man ikke vite at man er i bevegelse, så lenge man befinner seg i et *inertialsystem*.

Et inertialsystem er et referansesystem (koordinatsystem) der Newtons første lov gjelder: Et legeme som ikke er påvirket av krefter vil være i ro eller bevege seg med konstant hastighet i dette systemet. Tiden løper likt i alle punkter som er *i ro* i systemet. Før Galileo og Newton var det også opplagt at tiden løper likt i alle inertialsystemer, altså også for punkter i bevegelse. Vi skal se at det ikke er slik i relativitetsteorien.

Reglene for transformasjon av koordinater og tiden mellom to inertialsystemer som beveger seg med hastighet v (langs sammenfallende x-akser) relativt til hverandre langs var dermed gitt ved *Galileitrasformasjonene* (se fig 1.1):

$$x' = x - vt \quad y' = y \quad z' = z \quad t' = t$$

I klassisk Newtonsk fysikk postulerer man at fysikkens lover er like i alle inertialsystemer. Om man befinner seg i et lukket rom og gjør eksperimenter, så skal utfallene ikke være påvirket av om rommet befinner seg på en vogn som beveger seg på bakken, så lenge Newtons første lov gjelder. Man fant også at fysikkens lover til et objekt i jordens tyngdefelt er de samme som de som gjelder når objektet befinner seg i et akselerert referansesystem.

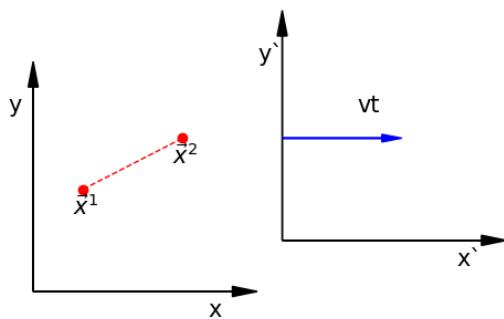
Man tenkte seg likevel at alle fysiske ting var plassert i et altomfattende og ubevegelig verdensrom. Etter at det ble klart at lys er et godt beskrevet som et bølgefønomen, så trengte man også et medium der lyset propagerer som perturbasjoner i mediet. Dette mediet ble kalt for *eteren*.

1.1.1 Invarianter i Galileitrasformasjoner

Det er enkelt å se at avstanden mellom to koordinater er den samme for to observatører som befinner seg i forskjellige inertialsystemer. Man observerer jo bare de samme punktene fra to forskjellige steder. Avstanden

$$d = \sqrt{(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^2} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$$

er den samme om vi gjør beregningen i det merkede system. Den er invariant, uforandret etter en Galileitrasformasjon. Tiden er også invariant. Et tidspunkt definert i de umerkede systemet har samme verdi i det merkede systemet.



Figur 1.1: Galileitransformasjon mellom to referansesystemer. Punktene er i ro i det umerkede systemet. I det merkede systemet beveger punktene seg med konstant hastighet mot venstre, men avstanden mellom punktene endres ikke.

1.2 Postulatene i spesiell relativitetsteori.

1.2.1 Postulatene

Det første postulatet kan formuleres slik:

Postulat 1) Alle inertialsystemer er ekvivalente

Vi ser at de fysiske konsekvensene av dette er det samme som for Galileitransformasjoner. Men for at relativitetsteorien skal være rimelig selv-konsistent, så er man nødt til å revurdere konseptet om at det skal finnes et absolutt rom der alle ting er plassert. I Einsteins relativitetsteori er alle inertialsystemer fullstendig ekvivalente. Intet referansesystem vil peke seg ut som det som er i ro (og der eteren ikke beveger seg). Hvis to galakser i verdensrommet fjerner seg fra hverandre med en gitt hastighet, så kan man aldri si at en av dem ligger i absolutt ro, mens den andre har en absolutt hastighet.

Postulat 2) Lyshastigheten er den samme i alle inertialsystemer.

Dette griper inn i våre vante forestillinger om hvordan tiden løper, og vi må være nøyne med definisjonen av tidsmåling i forskjellige inertialsystemer, S

og S' . Vi plasserer personene Solveig og Peer i systemene. I dette notatet har Peer alltid lommeuret på seg, og kan alltid lese av tiden selv, der han reiser avgårde i full fart! Solveig må måle tidsforskjell for to hendelser som kan skje på *forskjellige steder*. Men klokken hun bruker er i ro i forhold til henne selv. (Informasjon om klokkeslett kan bruke tid før å nå fram til henne, men dette kan hun korrigere for). Det er alltid snakk om *tidsintervaller*, men starttid og sted er ofte valgt slik at de faller sammen; $t = t' = 0$ og $x = x' = 0$. Anta at klokka er i ro i det ene systemet, i den forstand at tidsmåling av to hendelser (ved $t' = 0$ og tiden t') foregår på *samme sted*. I det andre systemet er hendelsene inntruffet på *forskjellige steder*. Om vi skal finne ut hvordan tiden går i S' , f.eks. i et tog, så plasserer vi Peer i toget, utstyrt med en klokke. Han er da i ro i forhold til klokka.

Konsekvens 1: Tap av samtidighet

Situasjon (se fig 1.2 a))

Togvogn som beveger seg med hastighet v . Peer sitter midt i vognen med en lysdetektor som kan registrere lyssignaler (enten de kommer fra vognens forkant eller bakkant). I hver ende av vognen er det montert nødbluss som kan tennes elektronisk utenfra. Person B (Solveig) står utenfor og ser på at begge blussene fyres av **samtidig**.

Når ser hun at lysglimtene kommer fram til Peer? Vi må ta hensyn til vognens bevegelse. Solveig står og ser på at glimtet fra bakenden av vognen ankommer Peer etter glimtet fra fronten. Vognen har flyttet seg og lyset trenger lenger tid på å komme fram.

Peers lysdetektor mottar også det bakre glimtet etter glimtet fra vognens forkant. Men siden lyshastigheten er den samme i alle retninger i Peers referansesystem, så vet han at et signal fra fronten bruker like lang tid på å komme fram som et signal fra bakenden ($t' = L/(2c)$ der L er lengden av vognen).

Peer mener dermed at nødblusset i bakenden av vognen ble tent etter lyset i front!

Konklusjon: **To hendelser som er samtidige i ett inertialsystem, inntreffer ikke samtidig i et annet.**

1.2.2 TidsdilaTAsjon

Situasjon: (fig 1.2 b)

Peer har tatt plass i vognen og sender lysglimt på tvers av bevegelsesretningen, inn i et speil. Han har med seg en fotodiode (som er i ro i forhold til ham) og vil måle tidspunktet for når glimtet kommer tilbake til ham. Spei-

let er i avstand D , og sender lyset tilbake. Lyset tilbakelegger en strekning $s' = 2D$ og han ser glimtet komme tilbake etter tiden

$$t' = 2D/c.$$

Solveig står utenfor og ser på at lyset kommer tilbake til Peers diode ved tiden t . I hennes referansesystem har lyset reist lengre. Vognen har nemlig beveget seg en strekning vt . Lyset har tilbakelagt en strekning som vi finner v.h.a. Pythagoras

$$s^2 = 2^2(D^2 + (vt/2)^2) = (ct')^2 + (vt)^2$$

etter ha satt inn for $D = ct'/2$. Dette må være lik $(ct)^2$ altså

$$(ct)^2 = (ct')^2 + (vt)^2$$

$$t'^2 = \frac{c^2 - v^2}{c^2} t^2 = (1 - (v/c)^2)t^2$$

To viktige størrelser som karakteriserer hastigheten er:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} ; \beta = \frac{v}{c} \quad (1.2)$$

slik at formelen skrives:

$$t' = \frac{t}{\gamma}$$

Peer har her målt et tidsintervall *mens han har stått i ro*. Solveig har målt tiden mellom to hendelser som har inntruffet *på forskjellig sted*. Vi kaller tiden i systemet som er i ro i forhold til klokka for *egentid* (proper time). Dette er tiden på toget (i det merkede systemet).

Tiden i S' der klokka er i ro definerer *egentiden*, og man betegner ofte egentiden med en indeks: t_0 , og formelen for tidsdilatasjon skrives:

$$\boxed{\Delta t = \gamma \Delta t' = \gamma \Delta t_0} \quad (1.3)$$

der Δt_0 er egentiden. Ofte benyttes også gresk t, τ , til å betegne egentiden. Legg merke til at egentiden mellom to hendelser alltid er mindre enn tiden mellom de samme hendelsene når de er observert i et system der disse hendelsene finner sted på to forskjellige steder.

Eksempel 1

Peer sitter i et romskip og ser på klokka. Når det er gått en time (3600

sekunder) på hans klokke, så er det gått 3601 sekunder på klokka til Solveig (som står 'i ro' og ser på romskipet fare avgårde). Hvor fort går romskipet?

SVAR:

Vi kaller tiden i systemet der klokka er i ro, for t_0 , og bruker ligning 1.3.

$$t = \frac{t_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

$$\frac{t_0^2}{t^2} = 1 - \frac{v^2}{c^2}$$

Vi får $v = 7.1 \times 10^6 \text{ m/s}$. (Til sammenligning: Raketter må ha minst en hastighet på ca 11 km/s for å unslippe jorda). For å verifisere tiden så må det stå en person (vi kan kalle henne Anitra) 2.3×10^{10} meter unna og se romskipet komme. Anitra og Solveig er begge i ro i systemet S og klokkene deres går derfor synkront.

Eksempel 2

Kosmisk stråling består i stor grad av myoner som skapes i reaksjoner høyt oppe i atmosfæren. Typisk levetid er på 2×10^{-6} sekunder. Hvis myonet har en hastighet nær lyshastigheten, på $v = 0,98c$, hvor langt flyr det før henfall?

SVAR

Vi finner $\gamma = 1/\sqrt{1 - 0,98^2} = 5,0$. Levetiden sett fra jorda er $t = \gamma t_0 = 5,0 \times 2 \times 10^{-6} = 10,0 \times 10^{-6}$ sekunder. Flygelengde er $d = vt = 0,98ct = 2,95$ km. Myonet selv syns at det bare har flydd $0,98c \times 2 \times 10^{-6} \text{ m} = 0,59 \text{ km}$. Men til gjengjeld skal vi se at myonet syns at jorda er nokså flatttrykt.

1.2.3 Lengdekontraksjon

Tilbake til vogna (fig. 1.2 c)). Den har lengde L , utmålt med målebånd når den er i ro. Peer vil følge klokka og står på bakken og vil måle lengden av vogna mens den beveger seg. Solveig går inn for å sjekke hva som skjer der. Peer setter opp en lys-stråle som brytes når vogna passerer. Han står i ro og finner lengden utfra hvor lenge lystrålen var brutt. Sett denne tiden lik t' , med merke siden tidsintervallet måles av en klokke i ro, mellom to hendelser på samme sted . Lengden til vogna blir:

$$L' = vt'$$

Peer og Solveig er enige om at tidsmålingen starter idet vognas front bryter lyskjeglen. Da er $t = t' = 0$. Solveig kan se at lyskjeglen flytter seg bakover, og det går en tid $t = L/v$ til den er ved vognas bakre ende. Solveigs

tidsmålinger er på to steder, starttid måles i vognas forkant, og stopptid er i vognas bakkant. Men sammenhengen mellom egentiden og Solveigs tid er $t = \gamma t'$, så vi får:

$$L' = vt' = (L/t) \times (t/\gamma) = L/\gamma = L\sqrt{1 - (v/c)^2}$$

Ofte skriver man L_0 for lengden for et objekt i ro. Med denne notasjonen er formelen for lengdekontraksjon:

$$\boxed{L = L_0/\gamma} \quad (1.4)$$

Vogna i bevegelse er altså målt til å være *kortere* enn lengden utmålt når vogna er i ro.

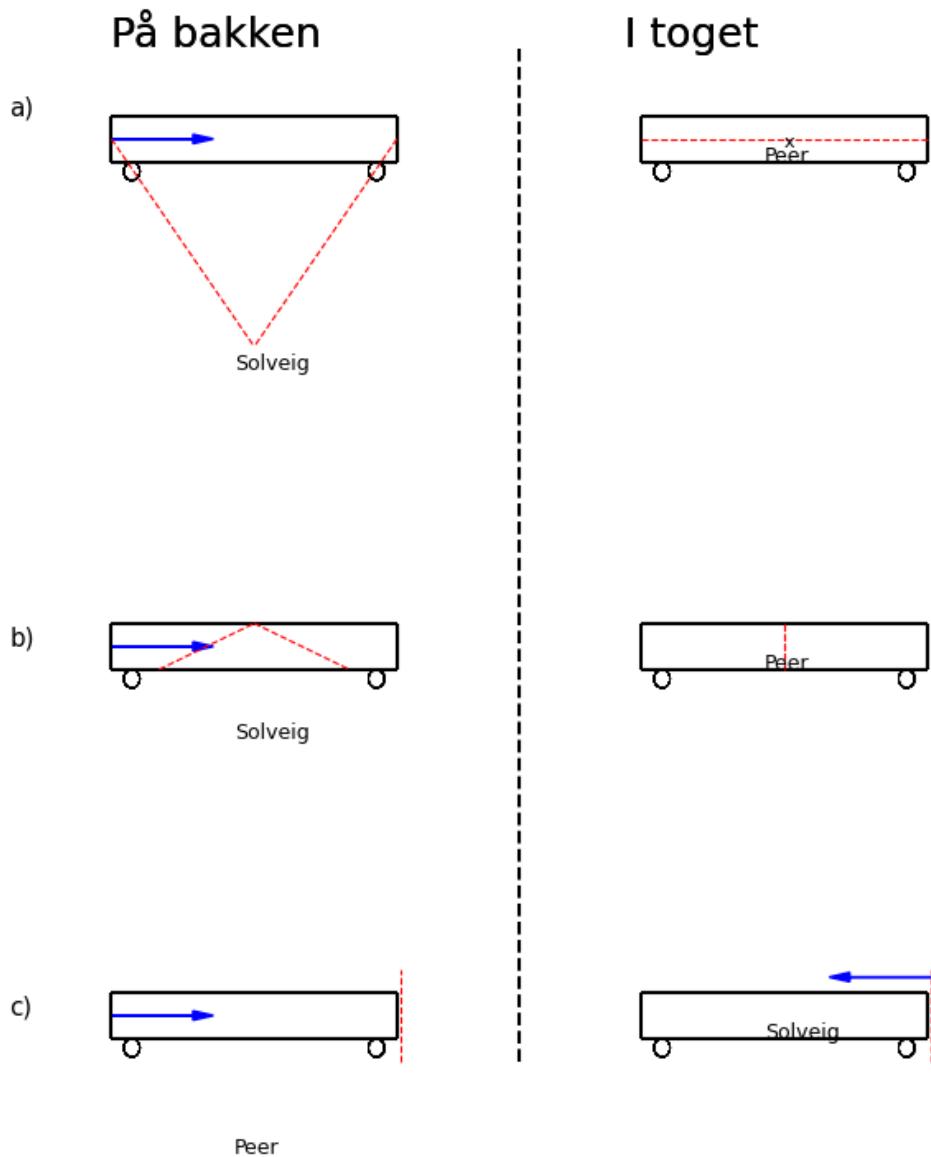
1.3 Lorentztransformasjon

Det er på tide å definere skikkelig hva vi mener med lengden av en vogn som er i bevegelse. I eksempelet om lengdekontraksjon så gjorde man sluttninger om lengden utfra et tidsintervall. Vi definerer heller en lengdemåling slik: Lengden av en stav i bevegelse er bestemt utfra avstanden mellom de to endepunktene når disse punktene er målt ved *samme tidspunkt* i et referansesystem i ro. Om Solveig står i ro (i system S) og vil måle lengden på vogna slik den beveger seg med system S' , så må hun altså få hjelp av en annen person (som vi kan kalle Anitra) som står strategisk plassert og i ro i systemet S for å måle posisjonen til den andre enden ved gitt tidspunkt. I vognens referansesystem, S' , sitter Peer og opplever at endepunktene er i ro, i en avstand L fra hverandre. Denne lengden kan finnes ved hjelp av et målebånd.

Vi ønsker å finne ut hvordan vi skal transformere disse punktene til Solveigs system. Dette gjøres ved **Lorentz-transformasjonene**. Anta at vi har en hendelse, et *event*, som skjer i posisjon x og tidspunkt t i et inertialsystem, S . Dette blir betraktet i et annet system S' som beveger seg med hastighet v langs x-aksen, relativt til det første systemet. Ved tiden $t = t' = 0$ har de felles origo. Da slipper vi å trekke fra starttider og steder i beregnin gene nedenfor. Posisjonen til hendelsen i S' vil avhenge av når det skjer (i S). La oss anta at denne avhengigheten kan skrives på formen:

$$x' = k(x - vt)$$

Vi har $k = 1$ for Galileittransformasjoner. Hva blir verdien av k når relativitetsteorien skal gjelde? Vi kan sette oss i S' og se på et event i x' . Når inntreffer det i S ? Inertialsystemene er ekvivalente. Det er bare fortegnet på



Figur 1.2: a) Tap av samtidighet. Lysglimt fra bluss i hver ende av vognen som er avfyrt samtidig som observert på bakken; oppfattes ikke som avfyrt samtidig av Peer siden glimtet fra venstre ankommer etter glimtet fra høyre. b) Tidsdilatasjon. Solveig ser den reflekterte strålen på et annet sted enn der den ble sendt ut fra. c) Lengdekontraksjon. En lys-stråle på bakken blir brutt av toget i et gitt tidsrom observert av Peer (som nå er på bakken). Lysflekkene beveger seg fra front til bakende i et annet tidsrom.

hastigheten som gjør situasjonen forskjellig fra den første situasjonen, så vi antar:

$$x = k(x' + vt')$$

Se på hvordan et lyssignal beveger seg: Da er posisjonen av lysfronten gitt som $x = ct$ og, siden lyshastigheten er den samme i S' så har vi også $x' = ct'$. Dette kan vi sette inn på venstre side, og multiplisere ligningene. Vi får:

$$c^2tt' = k^2(ct - vt)(ct' + vt') = k^2(c^2 - v^2)tt'$$

så

$$k^2 = \frac{c^2tt'}{(c^2 - v^2)tt'} = \frac{c^2}{c^2 - v^2} = \frac{1}{1 - (v/c)^2}$$

Vi har altså

$$k = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} = \gamma$$

Da gjenstår det å finne transformasjonsregelen for tid. Vi ser igjen på utgangspunktet:

$$x' = \gamma(x - vt)$$

$$x = \gamma(x' + vt')$$

Vi setter inn for x' i nederste ligning:

$$x = \gamma[\gamma(x - vt) + vt'] = \gamma^2x - \gamma^2vt + \gamma vt'$$

eller

$$t' = \gamma t + \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v}x = \gamma(t + \frac{1 - \gamma^2}{\gamma^2 v}x)$$

Foran x har vi:

$$\frac{1 - \gamma^2}{\gamma^2 v} = \frac{1/\gamma^2 - 1}{v} = \frac{1 - v^2/c^2 - 1}{v} = -\frac{v}{c^2}$$

så vi ender med

$$t' = \gamma(t - \frac{v}{c^2}x)$$

Vi har funnet **Lorentztransformasjonene**:

$$\begin{aligned} t' &= \gamma(t - \frac{v}{c^2}x) \\ x' &= \gamma(x - vt) \\ y' &= y \\ z' &= z \end{aligned}$$

(1.5)

Vi bruker ofte $\beta = v/c$, og bruker dette i de inverse transformasjonene (slik at dere ser hvordan det blir):

$$\begin{aligned} t &= \gamma(t' + \frac{\beta}{c}x') \\ x &= \gamma(x' + c\beta t') \\ y &= y' \\ z &= z' \end{aligned}$$

(1.6)

Legg merke til symmetrien. Om vi velger hastighetsenhet $c = 1$ så er transformasjonsreglene for x og t helt like! Ut fra dette viser vi enkelt tidsdilatasjon og lengdekontraksjon.

1.3.1 Tidsdilatasjon, versjon 2

Vi har to hendelser på stedene x'_1 og x'_2 ved tidene h.h.v. t'_1 og t'_2 . Hvis de inntreffer på samme sted i det merkede systemet, så har vi $x'_1 = x'_2$. Vi vil transformere til det umerkede systemet:

$$\Delta t = t_2 - t_1 = \gamma(t'_2 + \frac{\beta}{c}x'_2) - \gamma(t'_1 + \frac{\beta}{c}x'_1)$$

Men vi vil se på situasjonen $x'_1 = x'_2$ så

$$\Delta t = \gamma(t_2 - t_1) = \gamma\Delta t'$$

altså formel 1.3. Egentiden er mindre enn tiden der hendelsene skjer på forskjellig sted. Ofte identifiseres som sagt egensystemet med en indeks '0'. t_0 , eller τ (gresk t) vil være egentid i de fleste lærebøker.

1.3.2 Lengdekontraksjon, versjon 2

Vi har to hendelser på stedene x_1 og x_2 ved tidene h.h.v. t_1 og t_2 . Om hendelsene var at endepunktene til en stav passerte h.h.v. x_1 og x_2 til samme tid så har vi $t_1 = t_2$, og differansen $L = x_2 - x_1$ er meningsfylt mål av lengden av en vogn i bevegelse. Lengden av vogna i ro er kjent, $L_0 = x'_2 - x'_1$. Vi transformerer fra det merkede system der staven er i ro, og får:

$$L_0 = \Delta x' = x'_2 - x'_1 = \gamma(x_2 - vt_2) - \gamma(x_1 - vt_1)$$

Men $t_1 = t_2$ så

$$L_0 = \Delta x' = \gamma(x_2 - x_1)$$

eller formel 1.4:

$$L = L_0/\gamma$$

Hva med $\Delta t'$ i dette tilfellet? Om det merkede systemet er egensystemet til staven, så trenger vi ikke å tenke så mye på det, men om vi snakker om tidsforskjellen mellom to *event* i alminnelighet, så må vi vite om tidsforskjellene. F.eks kunne staven være i bevegelse i det merkede systemet også. La oss finne $\Delta t'$ når $\Delta t = 0$:

$$\begin{aligned} t'_2 - t'_1 &= \gamma(t_2 - \frac{v}{c^2}x_2) - \gamma(t_1 - \frac{v}{c^2}x_1) \\ c\Delta t' &= \frac{v}{c}\gamma(x_1 - x_2) \end{aligned}$$

Dette gir altså tidspunktene for måletidspunktet $t_1 = t_2$ slik dette er oppfattet i systemet som følger staven og viser eksplisitt tapet av samtidighet slik vi snakket om helt i begynnelsen (med korrekt fortegn!).

Man kan ha glede/nytte av å definere $\beta = \frac{v}{c}$ og skrive Lorentztransformasjonen slik:

$$\begin{pmatrix} t' \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta/c \\ -\gamma c\beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x \end{pmatrix}$$

Det er da enkelt å vise at bytte av fortegn på hastigheten gir den inverse transformasjon.

I mange tilfeller, for eksempel når vi skal definere firervektorer, så er det veldig hensiktsmessig å gi de to størrelsene i vektoren samme dimensjon. Dette oppnås ved å multiplisere tider med lys hastigheten. Da har vi:

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta \\ -\gamma\beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

Formulert slik ser vi at det er fullstendig symmetri mellom tid og rom!

1.3.3 Tidrom ('Spacetime')

I den klassiske mekanikken er det ofte illustrerende å tegne grafer av posisjon som funksjon av tid, $x = x(t)$. Ettersom sammenhengen mellom koordinat og tid er mer komplisert i relativitetsteori, så er det ikke så enkelt i relativitetsteori. Men det er likevel lærerikt å tegne opp diagrammer med x langs abcissen og ct som vertikal koordinat. Et signal med lys hastighet propagerer langs linjen $x = ct$. Om vi generaliserer til to og tre romlige koordinater

så kan vi si at lyssignalet propagerer som en rett linje på en lyskjegle. objekter som beveger seg langsommere beveger seg alltid et sted inni kjeglen, ($vt < ct$). Det er nyttig å beskrive en reise ved hjelp av tidrommet når vi skal snakke om tvillingparadokset. Figur 1.3 viser en reise i tidrommet med hastighet $\frac{1}{4}c$ ut til $x = x_1/2$ og tilbake til utgangspunktet. Man sier at en slik mulig reise er beskrevet med en 'verdenslinje' i tidrommet. En slik reise (som starter med $t = 0$) vil alltid foregå i kjeglen der $(ct)^2$ er større enn \vec{x}^2 . To hendelser denne kjeglen av tidrommet kan forbindes med et lyssignal, og det kan dermed teoretisk være kausalitet mellom dem, d.v.s. at den ene hendelsen har forårsaket den andre. Hendelser utenfor denne kjeglen, med $(ct)^2 < \vec{x}^2$ kan derimot anses som fullstendig urelaterte. Hvis den reisende (Peer) sender radiosignaler hjem med jevne mellomrom, så ser vi at tiden mellom hvert signal som Solveig mottar er lengre enn tiden mellom hvert utsendte signal, når Peer fjerner seg fra jorden, mens tiden mellom hvert mottatte signal er mindre når raketten nærmer seg jorden. Dette kalles for Dopplerforskyvning.

1.3.4 Dopplereffekten

Dopplereffekten for lydkilder forklarer hvorfor frekvensen på lyd som kommer fra en kilde som nærmer seg med en hastighet v er høyere enn frekvensen på en kilde i ro. Relasjon mellom lydhastighet, c_l , bølgelengde og frekvens (periode) er $c_l = \lambda f$. ($c_l = \lambda/T$). Det tar tid gitt ved $T_0 = \lambda_0/c_l$ for at bølgen skal ha forflyttet seg med en bølgelengde, sett fra hvilesystemet til lydkilden. Men i laboratoriet har den neste bølgen litt kortere reisevei for å nå oss, nemlig $\lambda_0 - vT_0 = \lambda = c_l T$. Vi har med andre ord:

$$\lambda_0 - vT_0 = c_l T_0 - vT_0 = (c_l - v)/f_0 = c_l/f$$

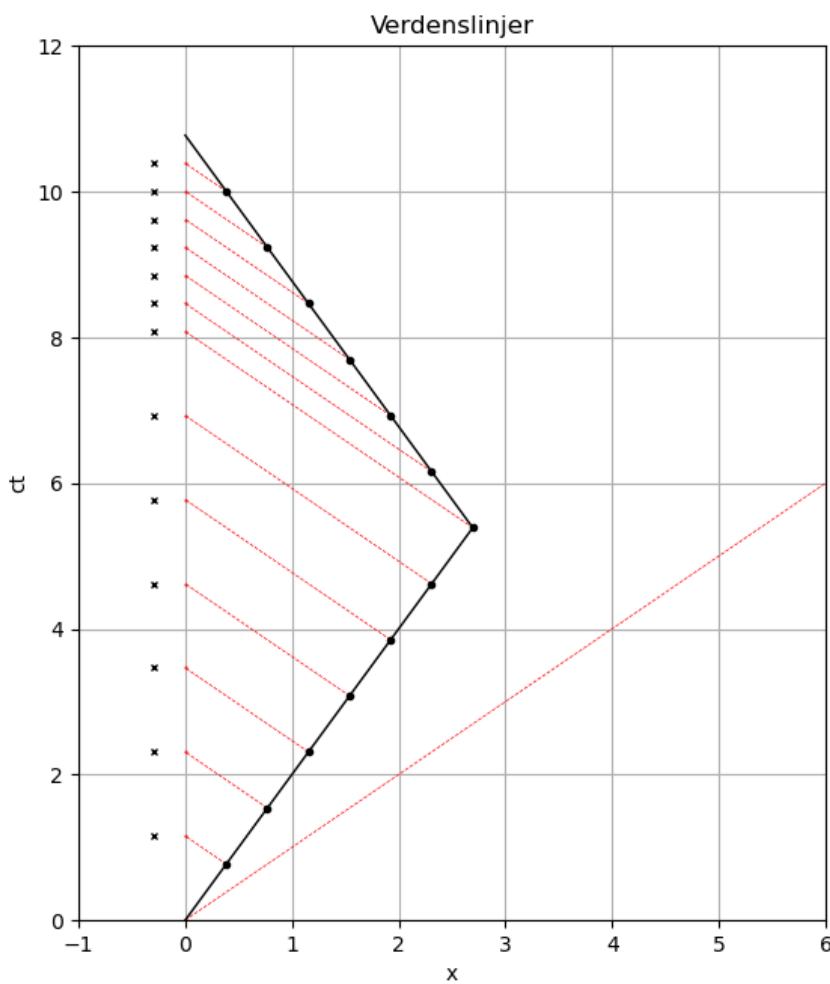
eller

$$f = \frac{c_l}{c_l - v} f_0$$

Dette er Dopplereffekten for lyd og andre ikke-relativistiske bølger. Her har vi antatt at tiden går likt for lydkilden i bevegelse og en observatør i ro. Tiden i laboratoriet er bare tiden det tar for en bølgetopp å reise litt kortere enn en hel opprinnelig bølgelengde.

Men i relativitetsteorien må vi Lorentztransformere tiden $T = \gamma T_0$, så isteden for f_0 må vi sette inn $1/(\gamma T_0)$, så

$$f = \frac{c}{c - v} \frac{\sqrt{1 - (v/c)^2}}{T_0} = \frac{1}{1 - v/c} \sqrt{1 - (v/c)^2} f_0$$



Figur 1.3: En verdenslinje i tidrommet for et objekt med hastighet $\beta = 0,5$, og linjer for lyssignaler som sendes 'hjem' med jevne mellomrom. Kryssene til venstre viser tidspunkt for mottak av signalene som beregnet med formel 1.8. Linja for lyssignal, $ct = x$ er også vist

$$f = \sqrt{\frac{1 - (v/c)^2}{(1 - v/c)^2}} f_0 = \sqrt{\frac{1 - v/c}{1 + v/c}} f_0$$

så vi får

$$f = \sqrt{\frac{1 + \beta}{1 - \beta}} f_0 \quad (1.8)$$

for frekvensen til en lyskilde som nærmer seg observatøren. Lyset er altså forskjøvet mot høyere frekvenser. Dette kalles *blåskift*. Lyskilder som fjerner seg har motsatt fortegn på v . Disse gir et observert *rødskift*.

1.4 Tvillingparadokset

Peer reiser ut til en stjerne som er 20 lysår borte med hastighet $v = 0,8c$. (1 lysår er den distansen som lyset tilbakelegger i løpet av ett år.) Her er altså $x = ct_l$ med $t_l = 20$ år). Solveig mener at reisen tar $t = x/v = x/v = (ct_l)/(0,8c) = 20/0,8 = 25$ år.

Men det er full ekvivalens mellom referansesystemene. I romskipet sitt system har Peer egentid, og han har reist i $t_0 = t/\gamma = \sqrt{1 - 0,8^2}t = 15$ år. Avstanden er kortere når utgangspunkt og destinasjon beveger seg enn når det er i ro, og på 15 år har Peer tilbakelagt $0,8c \times 15$ år = 12 lysår. Men de er enige om at situasjonen er asymmetrisk. To tidspunkt som måles på en klokke som beveger seg må naturligvis forgå på to forskjellige steder. Og tidsdilatasjon forteller oss at klokker som beveger seg går fortare enn klokka i ro.

Men hva hvis Peer returnerer, slik at begge tidsmålingene hans foregår på samme sted som Solveigs klokke? Peer bråsnur og kommer hjem, Da er han altså 30 år eldre enn da han dro. Men Solveig er blitt 50 år eldre! At alderen er forskjellig også når de befinner seg på samme sted etter at en av dem har reist, kalles tvillingparadokset.

Forklaringen er at det fortsatt er en asymmetri. Peer har ikke beveget seg jevnt og rettlinjet hele tiden. Han har blitt akselerert, først for å komme i fart, deretter for å snu, og til slutt for å stoppe. Det er derfor ingen symmetri mellom systemene. En full forklaring på paradokset krever bruk av den generelle relativitetsteorien på det akselererte systemet. Da finner man at tiden til Peer faktisk har gått langsommere enn tiden til Solveig. (og ikke motsatt)

Eksperiment med klokker som sendes rundt jorden bekrefter at Peer faktisk vil være yngre enn Solveig når han kommer tilbake (om de var like gamle ved reisens begynnelse).

1.5 Addisjon av hastigheter

Hvordan skal vi legge sammen hastigheter, når resultatet *aldri* skal bli større enn lyshastigheten? Vi kan f.eks. lure på hva hastigheten til en pistolkule blir hvis den er skutt rett framover av en rytter til hest. Klassisk er hastigheten sett fra bakken gitt som $V_x = V'_x + u$ der u er hastigheten til hesten/pistolen¹ og V'_x er hastigheten til kula ut fra pistolåpningen. Vi vil altså finne

$$V_x = \frac{dx}{dt}$$

når vi kjenner utskytningshastigheten til kula

$$V'_x = \frac{dx'}{dt'}$$

De inverse lorentztransformasjonene sier

$$dx = \gamma(dx' + u dt')$$

med $\gamma = 1/\sqrt{1 - (u/c)^2}$ og

$$dt = \gamma(dt' + \frac{u dx'}{c^2})$$

Faktoren γ kansellerer i forholdet og vi får:

$$V_x = \frac{dx}{dt} = \frac{dx' + u dt'}{dt' + \frac{u dx'}{c^2}} = \frac{\frac{dx'}{dt'} + u}{1 + \frac{u}{c^2} \frac{dx'}{dt'}} = \frac{V'_x + u}{1 + \frac{u V'_x}{c^2}}$$

Om kan kjenner V_x og vil finne V'_x så tar man utgangspunkt i Lorentztransformasjonen fra umerket til merket system og får

$$V'_x = \frac{V_x - u}{1 - \frac{u V_x}{c^2}}$$

Dersom det er hastighetskomponenter på tvers av retningen til hesten, så må vi transformere disse hastighetskomponentene også. Vi har $dy = dy'$ så

$$V_y = \frac{dy}{dt} = \frac{dy'}{\gamma(dt' + \frac{u dx'}{c^2})} = \frac{V'_y}{\gamma(1 + \frac{u V'_x}{c^2})} = \frac{V'_y \sqrt{1 - (u/c)^2}}{(1 + \frac{u V'_x}{c^2})}$$

Vi oppsummerer:

¹Jeg har byttet notasjon på hastigheten mellom referansesystemer fra v til u for å slippe i si 'liten v' og 'stor v' i forelesning

$$V_x = \frac{V'_x + u}{1 + \frac{u}{c^2} V'_x} \quad (1.9)$$

$$V_y = \frac{V'_y}{\gamma(1 + \frac{u}{c^2} V'_x)} \quad (1.10)$$

Eksempel: Hvis personen på hesten har en laserpistol med stråle skutt rett fram så har vi, $V'_x = c$ og:

$$V_x = \frac{c + u}{1 + \frac{uc}{c^2}} = c \frac{1 + \frac{u}{c}}{1 + \frac{u}{c}} = c$$

Hvis laserpistolen isteden blir fyrt av på tvers har vi $V'_x = 0$ og $V'_y = c$, så fra ligning 1.9 og 1.10:

$$V^2 = V_x^2 + V_y^2 = u^2 + \frac{c^2(1 - (\frac{u}{c})^2)}{1} = u^2 + c^2 - u^2 = c^2$$

1.6 Invarianter, firervektorer

For Galileitransformasjoner fra ett system til et annet, så vil alltid en avstand, et lengdestykke, være uendret, *invariant*:

$$d^2 = (x'_2 - x'_1)^2 + (y'_2 - y'_1)^2 + (z'_2 - z'_1)^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2$$

Har vi noe tilsvarende for Lorentztransformasjoner? Svaret er ja, og man får en idé om hva det er ved å se på utbredelsen av en lysstråle som sendes ut ved $t = t' = 0$ og som beveger seg langs x-aksen. Vi vil alltid ha $x = ct$ og $x' = ct'$, eller

$$x - ct = 0 = x' - ct'$$

Vi kan godt begynne med vilkårlige startsted og tid, x_1, x'_1, t_1, t'_1 og se at generaliseringen blir:

$$\begin{aligned} & (x'_2 - x'_1)^2 + (y'_2 - y'_1)^2 + (z'_2 - z'_1)^2 - c^2(t'_2 - t'_1)^2 \\ &= (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2 - c^2(t_2 - t_1)^2 \end{aligned}$$

men notasjonen er litt enklere når vi velger å la de to systemene falle sammen i origo ved $(\vec{x}_1, ct_1) = (\vec{x}'_1, ct'_1) = 0$. Man kan ordne rom og tidkoordinater i *firervektorer*, slik

$$(x, y, z, ict)$$

Her er $i = \sqrt{-1}$, slik at

$$(x, y, z, ict)^2 = x^2 + y^2 + z^2 - (ct)^2$$

er invariant m.h.p. Lorentztransformasjoner. Denne notasjonen virker fint i spesiell relativitetsteori, og det er veldig nyttig å vite at beregningene kan gjøres med vanlig vektor-regning, bare man husker at tidskomponenten skal være imaginær. Men vi skal se at det er ønskelig at kvadratet av tidsdelen er positiv, slik at skalarproduktet ofte defineres som $(ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2$, spesielt når vi nedenfor skal diskutere energi og bevegelsesmengde. I generell relativitetsteori er bruken av imaginær tidskomponent heller ikke hensiktsmessig. Vi innfører derfor ny notasjon, slik man vanligvis finner i litteraturen. Man betegner en firervektor med gresk indeks som løper fra 0 til 3, og sier at:

$$x^\mu = (ct, x, y, z)$$

er en 'kontravariant' vektor, mens den 'kovariante' versjonen av samme vektor defineres som:

$$x_\mu = (ct, -x, -y, -z)$$

Invarianten defineres ved *Einstiens summekonvensjon over like indekser*.

$$x_\mu x^\mu = x^\mu x_\mu \equiv (ct)^2 - (x^2 + y^2 + z^2)$$

Det er vanlig å skrive tidskomponenten med indeks 0, slik at $x_0 = ct$, og skalarproduktet skal skrives

$$x_\mu x^\mu = x_0^2 - \sum_{i=1}^3 x_i^2$$

Man skriver altså indreproduktet mellom en kovariant vektor a_μ og en kontravariant vektor b^μ slik:

$$a_\mu b^\mu \equiv a_0 b_0 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3 \quad (1.11)$$

Kortformen til venstre angir som sagt *Einstiens summekonvensjon*. Denne konvensjonen sier at man skal *summere over like indekser*. Om man vil skrive dette på matriseform, så må det se slik ut:

$$(\mathbf{a}_\mu)(\mathbf{b}^\mu)^T$$

Den kontravariante vektoren er her transponert til en søylevektor.

Hvis vi vil Lorentztransformere vår 4-vektor, så kan vi alltid velge å legge x-aksen parallelt med fartsgrenningen til det merkede systemet, slik at vi får

$$x'^\mu = (ct', x', y', z') = (\gamma(ct - \beta)x, \gamma(x - c\beta t), y, z)$$

1.7 Dynamikk

Nå må vi studere hvordan objekter med masse beveger seg. Hva med en partikkel med masse m og hastighet v ? Ikke-relativistisk har vi

$$p = mv = m \frac{dx}{dt}$$

Vi får vanskeligheter med bevegelsesmengdebevaring fordi tiden der partikkelen er i ro løper langsommere enn tiden der hastigheten er v .

Tiden løper fortare når partikkelen er i bevegelse med konstant hastighet, og vi har sett ut at det er vanskeligere å transformere hastigheter enn lengdestykker, ettersom vi må transformere både dx og dt .

Men vi kan unngå å transformere tiden, hvis vi isteden benytter *egentiden* $t = \gamma\tau$!

Da kan vi definere *egenhastighet* som:

$$\eta = \frac{dx}{d\tau}$$

Dette vil være en størrelse med de samme transformasjonsegenskaper som linjestykker i tidrommet. Den fjerde (eller nullte) komponenten av 4-vektoren vil være $\eta_0 = c\frac{dt}{d\tau}$, med

$$\frac{dt}{d\tau} = \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

De tre andre komponentene gir **relativistisk bevegelsesmengde**:

$$p = m\eta = m \frac{dx}{d\tau} = m \frac{dx}{dt} \frac{dt}{d\tau} = m\gamma v$$

(1.12)

Dette danner tre komponenter av en 4-vektor. Den fjerde (eller nullte) komponenten er

$$p_0 = mc \frac{dt}{d\tau} = mc\gamma = \frac{mc}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \equiv \frac{E}{c}$$

Vi kan kalle størrelsen $m\gamma$ for relativistisk masse, og vi har

$$E = m\gamma c^2$$

(1.13)

som blir til $E = mc^2$ for en partikkel i ro. Når vi definerer relativistisk bevegelsesmengde og energi på denne måten, så vil bevaringsreglene for bevegelsesmengde og energi gjelde! (f.eks. i kollisjoner mellom partikler).

1.7.1 Newtons 2. lov

Newtons kraftlov skal skrives

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d}{dt}(m\gamma\vec{v}) \quad (1.14)$$

Vi dekomponerer i en komponent langsmed bevegelsesretningen ($F_{||}$), og en på tvers (F_T). Langsmed bevegelsesretningen endres hastigheten, og dermed også γ -faktoren.

Mellomregning:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{v}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} \right) &= \frac{d}{dv} \left(\frac{v}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} \right) \frac{dv}{dt} \\ &= \frac{-1}{2} \frac{v}{(1 - (\frac{v}{c})^2)^{3/2}} (-2v/c^2) \frac{dv}{dt} + \frac{1}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} \frac{dv}{dt} \\ &= \frac{(\frac{v}{c})^2 + 1 - (\frac{v}{c})^2}{(1 - (\frac{v}{c})^2)^{3/2}} \frac{dv}{dt} \\ &= \frac{1}{(1 - (v/c)^2)^{3/2}} \frac{dv}{dt} = \gamma^3 \frac{dv}{dt} \end{aligned}$$

Altså

$$F_{||} = m\gamma^3 \frac{dv}{dt} \quad (1.15)$$

Akselerasjonen er dermed

$$a = \frac{F_{||}}{m} (1 - (v/c)^2)^{3/2} = \frac{F_{||}}{m\gamma^3}$$

Kraften på tvers av bevegelsesretningen fører ikke til endring i hastighetens absoluttverdi. Dermed har vi

$$F_T = m\gamma \frac{d\vec{v}}{dt} = m\gamma \frac{\vec{v}^2}{r} \quad (1.16)$$

siden denne kraften gir sentripetalakselerasjon, og sirkel (evt. heliks)-bane.

I en partikkelakselerator, som LHC, så er de ladde partiklene vekselvis avbøyd av magnetfelt, $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$ slik at $|F| = F_T = qvB$, og akselerert av elektriske felt, $\vec{F} = q\vec{E}$, slik at $|F| = F_{||} = qE$. Her må vi sette inn de relativistiske uttrykkene for kraften.

Eksempel: Finn radien i sirkelbanen til et proton med energi 7 TeV som beveger seg i et magnetfelt på 8 Tesla.

Svar: Vi får $r = \frac{m\gamma v}{qB}$. Vi bruker resultatet fra forrige side, $E = mc^2\gamma$ til å bestemme $\gamma = \frac{E}{mc^2}$. Protonet har hvileenergi $mc^2 = 0,938\text{GeV}$, så $\gamma = 7000/0,938 = 7462$. Her kan vi sette $v = c$ og sette inn i SI enheter

$$r = \frac{1,673 \times 10^{-27} \times 7462 \times 3 \times 10^8}{1,602 \times 10^{-19} \times 8} = 2922$$

Verdiene brukt her svarer til LHC ved Cern. Den er 27 km lang, med 8 sirkelbuer som hver er 2450 m lange, og 8 rette deler for akselerasjon og eksperimenter.

1.7.2 Arbeid og hvorfor $E = mc^2$

Vi har innført størrelsen $E = m\gamma c^2$. Nå skal vi forklare at det faktisk er energi vi snakker om.

Arbeid er endring i kinetisk energi:

$$W = \Delta E = \int_0^{x_1} F dx = \int_0^{x_1} m\gamma^3 \frac{dv}{dt} dx = \int_0^{v_1} m\gamma^3 v dv$$

når vi bruker at $\frac{dv}{dt} dx = \frac{dv}{dx} \frac{dx}{dt} dx = v dv$

Integrering er ganske enkelt ved substitusjon ($u = (\frac{v}{c})^2$, $du = 2v/c^2 dv$)

$$\int_0^{v_1} m\gamma^3 v dv = \int_0^{v_1} \frac{mv}{(1 - (\frac{v}{c})^2)^{3/2}} dv = \left[\frac{mc^2}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} \right]_0^{v_1}$$

Så

$$E_k = \Delta E = m\gamma c^2 - mc^2 \quad (1.17)$$

med h.h.v. $v = v_1$ og $v = 0$ innsatt i γ . Vi har altså en hvileenergi

$$E = mc^2$$

og den totale energien blir hvileenergi + kinetisk energi

$$E = m\gamma c^2$$

For lave hastigheter har vi, siden $(1 + x)^n \approx 1 + nx = 1 - \frac{1}{2}x$ for $n = -\frac{1}{2}$
Dermed

$$\gamma = \left[1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \approx 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v}{c} \right)^2$$

$$mc^2\gamma \approx mc^2\left(1 + \frac{1}{2}\left(\frac{v}{c}\right)^2\right) = mc^2 + \frac{1}{2}mv^2$$

sa

$$\boxed{\Delta E \approx \frac{1}{2}mv^2} \quad (1.18)$$

som er endring i kinetisk energi.

1.7.3 Energi - bevegelsesmengde - Invariant masse, Mandelstamvariabelene s og t

En partikkel har altså total energi

$$E = m\gamma c^2$$

og bevegelsesmengde

$$\vec{p} = m\gamma\vec{v}$$

Disse fire størrelsene (energi og tre bevegelsesmengdekomponenter) kan også ordnes i en 4-vektor, på samme måte som tid og koordinat. Vi passer på at alle fire størrelsene har samme dimensjon og her velger vi å definere 4-bevegelsesmengden slik:

$$p^\mu = (E, p_x c, p_y c, p_z c) \equiv (p_0, p_1 c, p_2 c, p_3 c)$$

Da skal vi ha (pr. definisjon)

$$p_\mu \equiv (p_0, -p_1 c, -p_2 c, -p_3 c)$$

Den invariante 'lengden' av en 4-bevegelsesmengde blir (kvadrert):

$$\begin{aligned} p_\mu p^\mu &= p^\mu p_\mu \\ &= p_0^2 - (p_1 c)^2 - (p_2 c)^2 - (p_3 c)^2 \\ &= E^2 - p^2 c^2 \\ &= m^2 \gamma^2 c^4 - m^2 \gamma^2 c^2 v^2 \\ &= m^2 c^4 \left[\gamma^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) \right] = (mc^2)^2 \frac{1 - (v/c)^2}{1 - (v/c)^2} \\ &= (mc^2)^2 \end{aligned}$$

Altså energien til en partikkel i ro, *hvileenergien*. Vi kan dermed skrive

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2 \quad (1.19)$$

Denne relasjonen gjelder også for masseløse partikler (der energien således blir $E = pc$). Hvileenergien er invariant under Lorentztransformasjoner. (Dette er noe annet enn energibevaring)

Vi må nevne at denne invarianten også gjelder for et *system* med flere partikler med energi og bevegelsesmengde. Systemets **invariante masse** er

$$(m_{inv}c^2)^2 = \left(\sum p_i\right)_\mu \left(\sum p_i\right)^\mu = (\sum E_i)^2 - (\sum \vec{p}_i c)^2 \quad (1.20)$$

Eksempel med to partikler som kommer ut med åpningsvinkel θ mellom seg.

$$\begin{aligned} (m_{inv}c^2)^2 &= (E_1 + E_2)^2 - (\vec{p}_1 c + \vec{p}_2 c)^2 \\ &= E_1^2 + E_2^2 + 2E_1 E_2 - [p_1^2 + p_2^2 + 2p_1 p_2 \cos \theta] c^2 \end{aligned}$$

Hvis massene til de to utgående partiklene er små sammenlignet med bevegelsesmengde/energi (eller 0), så kan vi skrive $E_1 \approx p_1 c$ og $E_2 \approx p_2 c$, slik at vi får

$$(m_{inv}c^2)^2 \approx 2E_1 E_2 (1 - \cos \theta)$$

Når det snakkes om kollisjoner, så betegnes den totale invariante energi med *Mandelstam*-variabelen s . To partikler har totalenergi kvadrert s

$$s = (p_1 + p_2)_\mu (p_1 + p_2)^\mu = (E_1 + E_2)^2 - c^2 (\vec{p}_1 + \vec{p}_2) \cdot (\vec{p}_1 + \vec{p}_2)$$

Verdien av s er den samme i alle referansesystemer.

I en kollisjon mellom to partikler, 1 og 2 som blir til to nye som blir til to nye partikler 3 og 4; $1 + 2 \rightarrow 3 + 4$ så kan energi-bevegelsesmengdebevaring uttrykkes ved å skrive

$$p_1^\mu + p_2^\mu = p_3^\mu + p_4^\mu$$

eller ved bruk av s :

$$s = (p_1 + p_2)_\mu (p_1 + p_2)^\mu = (p_3 + p_4)_\mu (p_3 + p_4)^\mu$$

Vi kan også flytte over på dette for å skrive ned firerbevegelsesmengde overført til partikkelen 3:

$$p_1^\mu - p_3^\mu = p_4^\mu - p_2^\mu$$

Dette gir oss Mandelstamvariabelen t . Se hvordan t kan brukes i omtalen av Comptonspredning (seksjon 1.8).

$$t = (p_1 - p_3)_\mu (p_1 - p_3)^\mu = (p_4 - p_2)_\mu (p_4 - p_2)^\mu$$

Vi slutter omtalen av notasjon ved å definere den metriske tensor (*ikke pensum*):

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Bruker man denne så kan vi, ved bruk av summekonvensjonen, si at

$$p_\mu = g_{\mu\nu} p^\nu$$

og invarianten er

$$p^\mu p_\mu = p^\mu g_{\mu\nu} p^\nu$$

Man kan også merke seg at

$$g_\mu^\nu = g_{\mu\alpha} g^{\alpha\nu} \equiv \sum_{\alpha=0}^{\alpha=3} g_{\mu\alpha} g^{\alpha\nu} = \delta_\mu^\nu$$

δ_μ^ν er enhetsmatrisen. Den metriske tensor er av stor viktighet i generell relativitetsteori, ettersom krumming av rommet p.g.a. masse beskrives ved å modifisere den.

1.7.4 Lorentztransformasjon av energi og bevegelsesmengde

Størrelser som kan ordnes som 4-vektorer vil transformere på samme måte under Lorentztransformasjon. Man kan erstatte ct og x med E og pc i de opprinnelige transformasjonene av tid og posisjon.

$$\begin{pmatrix} E' \\ (pc)' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta \\ -\gamma\beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ pc \end{pmatrix}$$

Altså

$$E' = \gamma(E - \beta pc) = \gamma(E - vp)$$

og

$$(pc)' = \gamma(pc - \beta E) = \gamma\left(pc - \frac{v}{c}E\right)$$

Dette er ved transformasjon *fra* et system med hastighet $\beta = v/c$. Ofte så vil vi vite energi og bevegelsesmengde til en partikkelen med hvilemasse m , når den beverger seg med hastighet β . Vi vil altså *fra* partikkelen hvilesystem

og til systemet der partikkelen har hastighet. Da skifter β fortegn. Setter vi $p = 0$ og $E = mc^2$ så får vi tilbake

$$E' = \gamma E = \gamma mc^2$$

og

$$(pc)' = \gamma \beta mc^2 = \gamma vmc$$

som forventet.

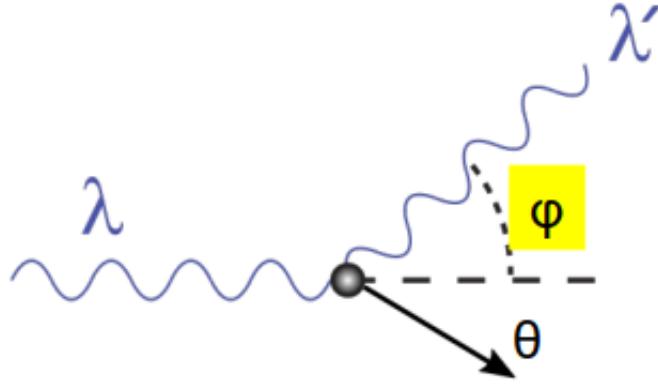
Komponenter på tvers av bevegelsesretningen forblir uendret ved Lorentz-transformasjon, og den firedimensjonale versjonen er:

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

En Lorentztransformert 4-vektor kan skrives

$$p'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu p^\nu$$

Vi skal ikke få bruk for denne versjonen av Lorentztransformasjonen i dette kurset. Men 2x2 versjonen er svært nyttig.



Figur 1.4: Figur som viser Comptonspredning.

1.8 Comptonspredning

Comptonspredning er elastisk spredning mellom et foton og et elektron (figur 1.4). Effekten er en av de tidlige indikasjonene på at lys kan opptrer som partikler, fotoner. Når fotonene skifter retning etter å ha truffet et elektron så endres energien, og dermed også bølgelengden på fotonet. Compton beregnet hva den nye bølgelengden skulle bli ved bruk av bevaringslover for energi og bevegelsesmengde. Når vi har lært om 4-vektorer så kan vi bruke disse til beregning av formelen for bølgelengder. Her er situasjonen og spørsmålet: Et foton med energi $E_\gamma = hf = hc/\lambda$ treffer et elektron med masse m i ro og spres med en vinkel ϕ . Hva er energi (og bølgelengde) til det spredte fotonet? La oss huske på følgende med en gang:

Nullte komponent av en fire-vektor

$$p^0 = E/c = \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2}/c$$

For fotonet blir dette til $E_\gamma = pc$.

Størrelsene i 4-vektoren bevares komponentvis:

$$p_\gamma^\mu + p^\mu = p'_\gamma^\mu + p'^\mu$$

Her betegner p_γ^μ energi-bevegelsesmengde til innkommende foton, p^μ innkommende elektron (i ro), mens p'_γ^μ og p'^μ er utgående foton og elektron. Vi ordner elektronet til venstre og fotonet til høyre, og lager en invariant

$$(p - p')_\mu (p - p')^\mu = (p'_\gamma - p_\gamma)_\mu (p'_\gamma - p_\gamma)^\mu$$

Vi må summere først, helt definisjonsmessig har vi

$$(p - p')_\mu (p - p')^\mu \equiv (p^0 - p'^0)^2 - (\vec{p} - \vec{p}')^2$$

Denne invarianten kalles for Mandelstam- t i litteraturen, og forteller noe om overføring av bevegelsesmengde, f.eks til et foton fra et spredningssenter.

La oss sette inn og regne ut:

Venstre side: Sett $E = mc^2$ og $E' = \sqrt{(mc^2)^2 + (p'c)^2}$

$$\begin{aligned} (p - p')_\mu (p - p')^\mu &= \frac{1}{c^2} (E - E')^2 - (\vec{p}')^2 \\ &= \frac{1}{c^2} \left((mc^2)^2 - \sqrt{(mc^2)^2 + (p'c)^2} \right)^2 - p'^2 \\ &= \frac{1}{c^2} \left((mc^2)^2 - 2mc^2 E' + (mc^2)^2 + (p'c)^2 \right) - p'^2 \\ &= 2(mc)^2 - 2mE' \end{aligned}$$

Høyre side: Sett $E_\gamma = p_\gamma c$, og husk fra vektorregning at $(\vec{a} + \vec{b})^2 = a^2 + b^2 + 2\vec{a} \cdot \vec{b}$

$$\begin{aligned} (p'_\gamma - p_\gamma)_\mu (p'_\gamma - p_\gamma)^\mu &= \frac{1}{c^2} (E'_\gamma - E_\gamma)^2 - (\vec{p}'_\gamma - \vec{p}_\gamma)^2 \\ &= \frac{1}{c^2} \left((E'_\gamma - E_\gamma)^2 - E'^2_\gamma - E^2_\gamma + 2E_\gamma E'_\gamma \cos \phi \right) \\ &= -\frac{2}{c^2} E_\gamma E'_\gamma (1 - \cos \phi) \end{aligned}$$

Vi kan benytte energibevaring $E' = E_\gamma + mc^2 - E'_\gamma$ til å eliminere elektronenergien når vi setter høyre side lik venstre side:

$$\begin{aligned} 2(mc)^2 - 2m(E_\gamma + mc^2 - E'_\gamma) &= -\frac{2}{c^2} E_\gamma E'_\gamma (1 - \cos \phi) \\ -2m(E_\gamma - E'_\gamma) &= -\frac{2}{c^2} E_\gamma E'_\gamma (1 - \cos \phi) \end{aligned}$$

Hvis vi setter inn $E_\gamma = hc/\lambda$ så får vi

$$mc^2 hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \frac{h^2 c^2}{\lambda \lambda'} (1 - \cos \phi)$$

eller

$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \phi)$

(1.21)

1.9 Postulat i generell relativitetsteori

Newton s teori for gravitasjon sier at kraften mellom to legemer med masse M og m er gitt som

$$F = -G \frac{Mm}{r^2}$$

der G er Newtons gravitasjonskonstant. Minustegnet er med fordi kraften virker i motsatt retning av retningen på en enhetsvektor, \vec{u}_r valgt i retning fra massen, M , som f.eks. kan være massen av jorda til objektet med masse m . Vi kan bruke Newtons andre lov for kraften sammen med uttrykket for sentripetalakselerasjon for å finne radier i satelittbaner osv.

$$F = ma = -m \frac{v^2}{r} = -G \frac{Mm}{r^2}$$

Når man løfter legemet, m , ut av gravitasjonsfeltet får det økt potensiell energi. Vi kan velge den potensielle energien lik null for $r = \infty$, og skrive gravitasjonspotensialet, potensiell energi pr. masse-enhet som

$$\Phi = -\frac{GM}{R}$$

der R er avstand til sentrum av massen, M (for eksempel jorda) Om legemet løftes med liten høyde L over bakken så er potensiell energi pr. masseenhet

$$\Phi = -\frac{GM}{R_{jord} + L}$$

Endring i potensiell energi kan lett vises at blir tilnærmet

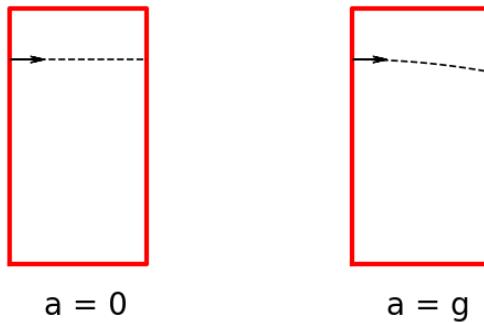
$$m\Delta\Phi = mgL$$

når vi velger $g = \frac{GM}{R_{jord}^2}$.

Newton s gravitasjonskonstant er justert slik at verdien av m er den samme på begge sider av ligningen. Det antas at masse i betydningen 'treghet' som formulert i Newtons andre lov er lik masse i betydningen 'gravitasjonell masse'. Dette postuleres av Einstein i den generelle relativitetsteori også. Einstein selv foreslo at man burde gjøre eksperimenter for å teste dette. Ingen eksperimenter har funnet avvik fra hypotesen ennå.

Videre postuleres det at:

Fysikklovene i et *akselerert* referansesystem skal være de samme som fysikklovene i et referansesystem som befinner seg i et *gravitasjonsfelt*.



Figur 1.5: Ekvivalensprinsippet. En horisontal lysstråle endrer ikke retning i et system som ikke er akselerert. Men når vi observerer fra et akselerert system så ser det ut som at lysstrålen avbøyes. Da skal det også avbøyes i et gravitasjonsfelt.

I Newtonsk fysikk så kan vi jo behandle fall-lover osv. i jordens gravitasjonsfelt som om vi befant oss i et akselerert referansesystem, men vi sier ikke at vi befinner oss i et referansesystem som akselererer oppover. Istedet sier vi at vi er i et gravitasjonsfelt som virker nedover. Det nye er at postulatet krever fullstendig ekvivalens av de to situasjonene.

Denne antakelsen har dermed konsekvenser i relativitetsteorien som man ikke ser i Newtons fysikk, noe som enkelt kan forstås i følgende tankeeksperiment: Om en lysstråle sendes ut horisontalt i en heis er som i ro (eller konstant fart), så vil strålen treffe motstående vegg i samme høyde som den ble sendt ut fra. Lysets vertikale hastighetskomponent er lik heisens vertikale hastighet. Men hvis heisen *akselererer*, så vil altså heisen ha beveget lengre i vertikal retning enn lyset i det lyset treffer veggen, så inni heisen ser det ut som at lyset har en krum bane. Figur 1.5 illustrerer dette.

Ekvivalensprinsippet til Einstein sier fysikklovene skal være de samme når heisen er plassert i et gravitasjonsfelt. *Dermed må lyset avbøyes i et gravitasjonsfelt!* Dette ledet altså til at Einstein modifiserte det fysiske rommet, til å krumme rundt objekter med masse! Han fiklet med den metriske tensoren $g_{\mu\nu}$ for å konstruere sin generelle teori.

Til slutt nevner vi at tiden også løper langsommere i et tyngdefelt sammenlignet med i et inertialsystem (uten akselerasjon/tyngde). Man kommer

fram til et uttrykk for korreksjonen ved å benytte at en klokke skal oppføre seg på samme måte som om den var akselerert. La oss tenke oss at et lyssignal sendes rett opp fra bunnen av en akselererende raket, og at det mottas øverst i raketten etter å ha reist en lengde, L i raketten, noe lyset har gjort i løpet av tiden $t = L/c$ [4]. Men da har altså raketten oppnådd en hastighet $v = at = aL/c$. Mottakeren fjerner seg fra kilden og formel 1.8 (Doppler) gir en endring av klokkefrekvens

$$\frac{f - f_0}{f_0} = \sqrt{\frac{1 - \beta}{1 + \beta}} - 1 = \sqrt{\frac{1 - 2\beta + \beta^2}{1 - \beta^2}} - 1 \approx \sqrt{1 - 2\beta} - 1$$

Tilnærmingen gjelder for små hastigheter der vi har strøket β^2 . Så kan vi rekkeutvikle kvadratroten ($(1 + x)^n \approx 1 + nx$), så

$$\frac{\Delta f}{f_0} \approx -\beta = -v/c = -\frac{aL}{c^2}$$

Akselerasjonen tilsier at klokkefrekvensen er litt lavere enn hvis det ikke hadde vært noen akselerasjon. Nå skal vi kunne erstatte akselerasjonen med jordas tyngdefelt, og vi skal få de samme fysikklovene iflg. ekvivalensprinsippet. Klokka må gå langsommere i tyngdefeltet! Vi kan sette inn forskjellen i gravitasjonspotensial mellom sender og mottaker $\Delta\Phi = gL$, altså sette inn tyngdens akselerasjon også i formelen for Dopplerskift. Men vi vil beregne skiftet over store avstander, så vi må uttrykke gL med Newtons gravitasjonslov som sier at et objekt på jorda befinner seg i gravitasjonspotensialet

$$\Phi = -\frac{GM}{R_{jord}}$$

sammelignet med $\Phi = 0$ langt borte fra jorda. Observatøren i gravitasjonsfeltet er interessert i endringen av klokkefrekvensen som observert i gravitasjonsfeltet. Da snur vi fortegnet på potensialet og får

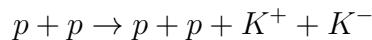
$$\frac{\Delta f}{f} = -\frac{GM}{R_{jord}c^2} \tag{1.22}$$

på grunn av jordas gravitasjon, sammelignet med frekvensen til en klokke langt fra jorda.

1.10 Oppgaver

1. Anta at de to lysglimtene i fig. 1.2 a) er samtidige som observert av Peer på toget. Hvilket glimt kommer først for en observatør på bakken (Solveig)?
2. Høyt opp i atmosfæren skapes det mange myoner som følge av kosmisk stråling. Myoner har en gjennomsnittlig levetid på $2,2 \mu\text{s}$. Anta at det skapes et myon 10000 meter over bakken med hastighet $\beta = 0,999$.
 - a) Hvor langt ville det flydd iflg. en beregning som ikke tar hensyn til relativitistiske effekter.
 - b) Hvor langt vil dette myonet fly før det henfaller?
 - c) Hvor langt er det ned til bakken for dette myonet?
3. Hvor raskt må et romskip reise (relativt til jorda) for at tiden på romskipet skal gå halvparten så fort som tiden på jorda?
4. Stigen og garasjen: Solveig og Peer vil få en 5,05 meter lang stige inn i sin 5,00 meter lange garasje. 'Ta rennafart, så får du den inn p.g.a. lengdekontraksjon' sier Solveig. Hvilken hastighet må stigen ha for at den skal ha samme lengde som garasjen?
5. B-mesoner har en typisk levetid på $1,5 \times 10^{-12}$ sekunder (se tabell 10.4). Et eksperiment settes opp for å kunne observere en slik partikkel før den henfaller. Det kreves en flyvelengde på minst 0,5 cm for en god observasjon. Hvor stor hastighet må et B-meson med typisk levetid ha for å bevege seg så langt?
6. En sjåfør blir tatt av politiet for å kjøre på rødt lys og får en bot. Men sjåføren vedtar ikke boten fordi vedkommende hevder at lyset var grønt. Hvor fort må bilen ha kjørt for at rødt lys (bølgelengde 660 nm) skal se grønt ut (530 nm) for sjåføren? (Bruk ligning 1.8)
7. En stjerne sender ut stråling med frekvens $8,64 \times 10^{14} \text{ Hz}$. Den fjerner seg fra jorda med hastighet $v = 0,2c$. Hvilken frekvens har strålingen som observeres på jorda?
8. En superdrone fyker i lav høyde med hastighet $\beta = 0,8$ relativt til bakken. De avfyrer et prosjektil som har hastighet $0,2c$ relativt til dronen. Avfyringen foregår rett over Solveig, som står på bakken (i $x = 0$), og det lages samtidig et lysglimt av varighet på $60\mu\text{s}$ (i dronens hvilesystem).

- a) Hva er hastigheten til prosjektilet for en observatør på bakken i følgende tilfeller:
- Prosjektilet avfyres rett framover.
 - Prosjektilet avfyres rett bakover.
 - Prosjektilet avfyres vinklerett på dronens flygeretning.
- b) Hvor lenge varer lysglimtet på bakken?
- c) I hvilke posisjoner er dronen og prosjektilet når lysglimtet slukner (for de tre tilfellene)?
- d) Solveig observerer lysglimtet. Hvor lang tid går det fra hun ser glimtet kommer på til hun ser det slukner?
9. Hvor mye arbeid må utføres på en partikkel med masse m for at den skal
- endre hastighet fra $0,1c$ til $0,2c$?
 - endre hastighet fra $0,85c$ til $0,95c$?
10. a) Vis, ved hjelp av Lorentztransformasjon, at vi kan skrive
- $E = m\gamma c^2$ og $pc = mc^2\gamma\beta$
 - $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$
- for en partikkel med hvilemasse m og hastighet $\beta = v/c$.
- b) Hva betyr det at en størrelse er 'relativistisk invariant'? Gi eksempler på slike størrelser.
11. Sola brenner (med fisjonsenergi) med en effekt på $3,8 \times 10^{26}$ W. Hvor mye masse mister sola hvert sekund? Hvor lenge vil sola kunne brenne med denne effekten før all masse er brukt opp?
12. Kaoner er type elementræpartikler (mesoner) som kan lages i proton-proton kollisjoner. De lever relativt lenge, og kan observeres. Partiklene K^+ og K^- har en masse på $493,7 \text{ MeV}/c^2$.
- En proton-proton kollisjon gir reaksjonen



- a) Anta at de to protonene kolliderer med hverandre med lik hastighet, men motsatt retning. Hva er den minste kinetiske energien på hvert proton, nødvendig for at reaksjonen skal være mulig?

- b) Anta nå at det ene protonet treffer et proton i ro. Hva er den minste kinetiske energien til dette protonet som er nødvendig for at reaksjonen skal være mulig? (Hint: Mandelstam s)
13. Ved DESY i Tyskland har man studert kollisjoner mellom elektroner og protoner med totalenergier på h.h.v. 27 GeV og 820 GeV i laboratoriet, der partiklene kommer fra hver sin kant og kolliderer (vinkel mellom bevegelsesmengdene er 180 grader).
- Beregn:
 - størrelsen s , i kollisjonene. (Ofte betegnes \sqrt{s} som totalenergien i kollisjonene).
 - bevegelsesmengdene i massesentersystemet. Massesentersystemet er et referansesystem der summen av de relevante bevegelsesmengdene er lik null. (Anta her at $E \gg mc^2$ for begge strålene).

I en av kollisjonene ble det produsert en nøytral partikkel (sammen med mange andre partikler som vi ikke bryr oss om her). Det er observert at den har henfalt til to andre partikler 20 cm fra produksjonspunktet. De to henfallspartiklene har masser på henholdsvis $0,938 \text{ GeV}/c^2$ og $0,140 \text{ GeV}/c^2$. Absoluttverdiene av bevegelsesmengdene til disse partiklene er på henholdsvis $4,55 \text{ GeV}/c$ og $2,0 \text{ GeV}/c$, og det er en vinkel mellom dem på 30 grader.

- Beregn masse, bevegelsesmengde og hastighet, v , til den nøytrale partikkelen.
 - Hvor lenge har den nøytrale partikkelen levd, og hvor langt har den flydd, sett i referansesystemet som følger partikkelen (partikkens hvilesystem)?
14. Et proton fra verdensrommet har bevegelsesmengde på $p = 5 \text{ GeV}/c$ og treffer en (fri) oksygenkjerne ($O-16$) som kan antas å være i ro.
- Beregn energi og hastighet til protonet.
 - Beregn størrelsen s i kollisjonen, og total energi \sqrt{s} .

Etter kollisjonen sendes kjernefragmenter i flere retninger, blant annet to He-4 kjerner. Den ene har bevegelsesmengde $1,5 \text{ GeV}/c$ og den andre har bevegelsesmengde $2 \text{ GeV}/c$. Vinkelen mellom dem er 30 grader.

- Hva er den invariante massen som systemet av de to He-4 kjernene danner?

15. Satellittbasert posisjonering (som brukes bl.a. i mobiltelefoner) baserer seg på mottak av klokkesignaler for å beregne avstand mellom sender og mottaker, og dermed posisjon. Satellittene beveger seg i en høyde på 20 000 km over jordoverflata, og går to ganger rundt jorda på ett døgn. Jordradien kan antas lik 6400 km. Se bort fra eventuelle effekter på grunn av at banene er krumme. Anta at mobiltelefonen befinner seg på ekvator, og at satellitten går i bane rett over ekvator.
- Finn hastigheten til satellitten relativt til mobiltelefonen. Her tillater vi oss å regne ikke-relativistisk.
 - Hvor fort går tiden på satellitten sammenlignet med tiden på jorda? (her er det lurt å rekkeutvikle γ -faktoren til første orden i β , om du ikke har en god elektronisk kalkulator)
 - Hvor stor forskjell er det mellom tiden på satellitten og tiden på jorda etter ett døgn.
 - Mobiltelefonen beregner avstanden til satellitten ved å logge tidspunkt for mottak av et signal fra satellitten som inneholder klokkeslett for utsendelse. En dag er avstanden korrekt beregnet til 21 000 km. Hva vil avstandsberegningen bli ett døgn senere om det ikke korrigeres for tidsdilatasjon?
 - Gravitasjonsfeltet gir også korrektsjoner på grunn av forskjellig klokkehastighet på jorda og i satellitten. Anta at klokken i satellitten går som om den ikke befinner seg i et gravitasjonsfelt (dette skal være veldig rimelig siden banen er stabil). Hva blir korrektsjonene , punkt c) og d), som følge av jordas gravitasjon (bruk formel 1.22).

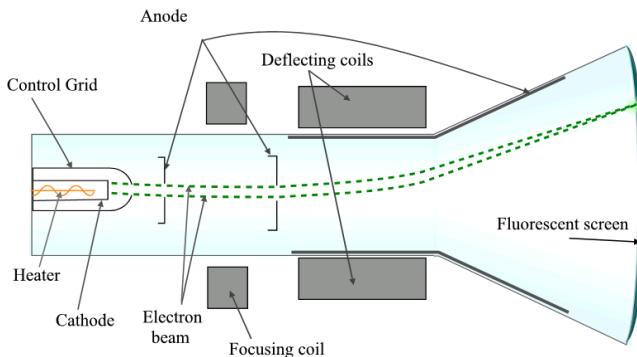
Kapittel 2

Mot kvantemekanikken

På slutten av 1800-tallet hadde man kommet langt i forståelsen av fenomenene i naturen, basert på Newtons mekanikk, Maxwells ligninger og termodynamikken med sin kinetiske gassteori. Men hvordan så partiklene i den kinetiske gasstteorien ut? Kjemikerne hadde på sin side klart å ordne grunnstoffenes kjemiske egenskaper i et periodisk system, og følte det naturlig å forklare grunnstoffene som bestående av udelelige atomer. Dette var på ingen måte noen ny idé . Demokrit (ca. år 400 før vår tidsregning) mente at dette var en logisk konsekvens av at dyr om planter kunne vokse i naturen [3]. Døde dyr og planter råtner og smuldrer opp. Men vil oppsmuldringsprosessen foregå i det uendelige? Tvisomt, for nye planter og dyr oppstår fra jorda. Jord måtte bestå av noen minste udelelige evig eksisterende objekter, *atomer* som ville være byggestenene for nye planter og dyr.

Mye tydet på at atomteorien var fornuftig. Men hvordan så atomene ut? Består elektrisk strøm av atomer? Benjamin Franklin (1706-1790), Michael Faraday ((1791-1867) og mange andre gjorde mange oppdagelser og inngående studier av elektrisitet, for å finne ut hva det, og gnister som lyn, er. Etter at vakuumpumpa ble oppfunnet, så satte man elektroder i en lufttom glasskolbe. På 1870-tallet fant William Crookes ut at det kunne gå elektrisk strøm gjennom vakuumrørene. Etterhvert oppdaget man *katodestråler*, som var partikler med elektrisk ladning. Ved å sette en varm flate på negativt potensial i et vakuumrør, så kunne man studere egenskapene til strålingen. Strålingen ble støtt fra katoden og trukket mot en anode. Dermed kunne man konkludere at det var snakk om negativt ladde partikler. Videre kunne man sette katoderøret i et magnetfelt og måle avbøyningsradius: Avbøyningskraften er gitt som $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$ slik at vi har

$$q\vec{v} \times \vec{B} = m \frac{v^2}{r} \vec{u}_T$$



Figur 2.1: Katoderør. Fra wikipedia. Dette bildet viser hvordan elektronene styres mot en skjerm. Styringen kan være hurtig og gjøres med høy presisjon. Fjernsynsapparater, dataskjermer og oscilloskop var bygd opp rundt slike rør fram til slutten av 1990-årene

og radien er gitt som

$$r = \frac{mv}{qB}$$

Med dette fant man ut at forholdet q/m hadde samme verdi for katodestråler fra alle materialer man studerte. Figur 2.1 viser skjematiske hvordan et slikt rør er bygd opp.

2.1 Sort stråling

Det skal være en pottemaker og produsent av porselen, Thomas Wedgwood som først la merke til at det kun var temperaturen som var bestemmende for fargen til en rødglødende substans, i 1793. Hva substansen var laget av hadde ingenting å si. Etterhvert forsto man at også kalde legemer sendte ut stråling, og man begynte å studere denne strålingen. Studiene begynte midt på 1850-tallet, og ble utført ved hjelp av den termoelektriske effekt, som kan beskrives slik: Om to forskjellige metaller presses sammen, så vil det genereres en spenningsforskjell mellom dem dersom det er en temperaturforskjell mellom metallene. Dette vil føre til at det går en liten strøm som kan måles i en lukket krets. Om den ene siden utsettes for strålingen fra det sorte legeomet, vil strålingsenergien føre til en temperaturøkning i forhold til den andre siden. Denne økningen ble målt og studert.

Strålingsintensiteten til sorte legemer er nå en svært godt kjent funksjon av temperaturen. Moderne instrumenter for målingen av temperatur til legemer som ligger langt unna, utnytter kunnskapen. Måleprinsippet er

ikke lenger termo-koblinger. Istedent benyttes halvledersensorer av forskjellige slag. Disse sensorene genererer en elektrisk strøm som er proporsjonal med strålingsintensiteten. Det står mer både om sort stråling og halvledersensorene i kapittlene 7 og 8.

Da studiene av sort stråling begynte, var det en eksperimentell utfordring å skjerme objektene for alt lys som kunne reflekteres, slik at man var sikker på at fundne intensitetsspektere (i W/m^2 pr. enhet bølgelengde) kun skyldtes stråling sendt ut av legemet selv. Det måtte være en termodynamisk likevekt mellom emisjon og absorpsjon av denne elektromagnetiske strålingen. Rayleigh beregnet formen og intensiteten av strålingsspekteret på grunnlag av klassisk elektromagnetisme, når man antar likevekt mellom absorbert og emittert stråling. Han tenkte seg at det var stående elektromagnetiske bølger inni hulrommet. Fra statistisk fysikk var det generelle *ekvipartisjonsprinsippet* godt kjent: Hver bevegelsesmodus svarer til en *frihetsgrad* med tilordnet energi som er bestemt av temperaturen:

$$\epsilon = \frac{1}{2}kT \quad \text{med} \quad k = 1,381 \times 10^{-23} \text{J/K}$$

Konstanten, k , er Boltzmanns konstant. Temperaturen i en beholder henger altså nøy sammen med energi-innholdet.

I klassisk elektromagnetisme er det ingen frekvensavhengighet av energien i bølgen, den er isteden gitt av bølge-amplituden (kvadrert). Dermed skulle hver svingemodus bidra med 1 frihetsgrad med energi lik $\frac{1}{2} kT$. Totalenergien skulle dermed være gitt av dette multipisert med antall svingemodi. Jo høyere frekvens jo flere mulige svingemodi har bølgene, og antall svingemodi i en lukket boks ble beregnet til å være proporsjonal med kvadratet av frekvensen (ν^2). Uttrykt som funksjon av bølgelengde fikk man:

$$I(\lambda) = \frac{2\pi c k T}{\lambda^4}$$

For lange bølgelengder stemte resultatet nokså bra med eksperiment, men for korte bølgelengder fyker intensiteten mot uendelig, og det på en slik måte at totalintensiteten er uendelig. Dette ble kalt den ultrafiolette katastrofe.

Max Planck og Albert Einstein innførte kvantiserte energipakker i sin beregning av likevekten, $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$, der h er en ny konstant, Planck's konstant. Mens Planck snakket om 'resonatorer' i veggene, innførte Einstein *fotoner* med frekvensavhengig energi. Med dette forklarte han også den fotoelektriske effekt (mer om dette nedenfor). Her er ν frekvensen på lyset (ν er gresk n og uttales 'ny'). Da vil antall frihetsgrader svare til antall fotoner. Dette antallet har samme frekvensavhengighet som før, men siden frekvensen også gir energien til fotonet, så er det ikke gitt at alle frihetsgrader er like

sannsynlig lenger. Fotoner med høy energi har en mindre sannsynlighet til å finnes i boksen enn de med lavere energi. Iflg. Boltzmann er antall fotoner med gitt energi også proporsjonal med *Boltzmannfaktoren*:

$$e^{-E/(kT)}$$

For at de observerte spektrene skulle få en teoretisk forklaring foreslo også Planck motvillig at utvekslingen av energi foregikk gjennom slike kvanter, og ikke på en kontinuerig måte. Han antok at det var resonanseffekter i materialet, resonatorer som gav kvantisert energiutveksling. Einstein kom også fram til samme frekvensavhengighet, men han antok isteden at det var selve lyset som er kvantisert.

Dagens utledninger av resultatene om sort stråling er basert på at lyset kan ses på som en samling fotoner, og krever kjennskap til statistisk fysikk. De finnes i kap. 7. Vi gjengir likevel de viktigste resultatene her:

SORT STRÅLING

Alle legemer med temperatur over null sender ut elektromagnetisk stråling. Intensitet og bølgelengdespekter avhenger av temperaturen. Energitettheten av strålingen er:

$$I(\lambda) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5(e^{\frac{hc}{kT\lambda}} - 1)} \quad (2.1)$$

eller som funksjon av frekvensen:

$$I(\nu) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)} \quad (2.2)$$

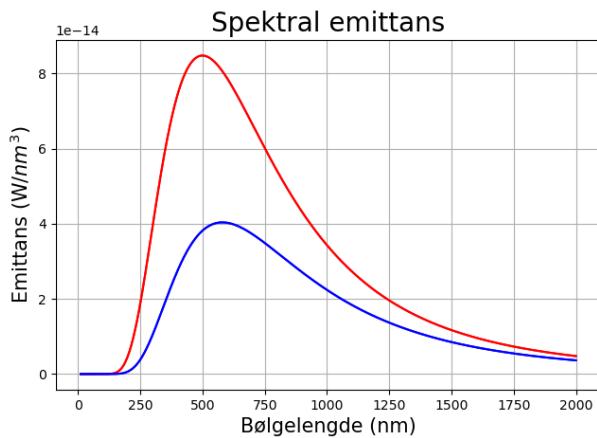
Stefans lov (ligning 7.77) gir intensitet på utsendt stråling pr. flateenhett.

$$\eta = \frac{\pi^2 k^4}{60 h^3 c^2} T^4 = \sigma T^4$$

Konstanten σ kalles Stefans konstant og har verdi

$$\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$$

Fig 2.2 viser formel 2.1 for to temperaturer nær solas temperatur. Vi ser at store deler av intensiteten faller innenfor det synlige spekteret mellom 400nm og 700nm. En detaljert utledning av ligning 2.1 krever også kjennskap til statistisk fysikk og fins i seksjon 7.9.4. Einsteins utledning er også gjengitt i seksjon 7.9.4.



Figur 2.2: Plancks fordelingslov for to temperaturer, 5000K og 5800K. Legg merke til at den utstrålte effekten ved 5800K er mye større enn ved 5000K. Solas overflate har en temperatur på ca 5780 grader.

Formene på intensitetsfordelingene som funksjoner av h.h.v. bølgelengde og frekvens ligner hverandre (se fig. 7.9), så vær nøyne med å sjekke hvilken funksjon som plottes!

2.2 Lysets partikkelnatur

Som nevnt forutsier Maxwells ligninger elektromagnetiske bølger. Alle bølgefenomener som var kjent på den tiden (i luft, vann, strenger osv.) ble beskrevet som perturbasjoner som bredte seg utover i et medium. Man regnet dermed med at lyset også var perturbasjoner i et medium og bredte seg utover i dette. Mediet ble kalt *eteren*. Radio og andre apparater som mottar elektromagnetiske signaler blir fortsatt kalt for 'etermedier' (der 'medier' nå betyr noe slikt som 'informasjonskilder'). Men eterens egenskaper og stofflighet var det vanskelig å få tak på. I det følgende skal vi se på fenomener som tyder på at de elektromagnetiske bølgene ikke riktig er som andre bølger, men ofte må ses på som en samling bitte små bølgepakker, *fotoner*. Einstein gav svært viktige bidrag her også, og det han fikk Nobelprisen for var den fotoelektriske effekt.

2.2.1 Den fotoelektriske effekt

Det som kalles *den fotoelektriske effekt* ble oppdaget gjennom studiet av katodestråler (elektroner) som ble frigjort fra metalloverflater under belys-

ning. Man fant at sollys kunne generere elektriske strømmer gjennom et vakuumsrør, først kalt den fotovoltaiske effekt. Etterhvert fant man at det var ultrafiolett lys som materialene måtte blyses med for at det skulle gå strøm. Figur 2.3 viser en skjematiske skisse av apparatur som ble brukt i studiene. Det viste seg at ikke alle bølgelengder gav katodestråler, uansett intensitet på lyset. For gitt katodemateriale måtte bølgelengden på lyset være under en gitt terskel, λ_{min} for at katodestråler kunne genereres. Om man plottet strøm i kretsen mot potensialforskjellen mellom anode og katode, så fikk man kurver som vist til venstre i fig. 2.4. Det viste seg at det var meningsfullt å heller definere terskelen gjennom lysets frekvens, ($\nu = c/\lambda$). Den maksimale energien på katodestrålene (altså elektronene som ble emittert) ble målt for mange typer katodemateriale, og for mange frekvenser på lyset, og man fikk lineære sammenhenger som antydet til høyre i fig. 2.3.

Einstein foreslo eksistensen av fotoner som forklaring på disse kurvene. Forslaget gikk ut på at et enkeltfotoner med energi $E = h\nu$, der h er en konstant og ν er lysets frekvens, ble absorbert av ett elektron, slik at elektronet fikk en tilsvarende kinetisk energi. Det er denne prosessen som man kaller den fotoelektriske effekt (selv om andre prosesser mellom fotoner og elektroner også gir opphav til frigjorte elektroner). For at elektronene skulle frigjøres fra katodeoverflaten vil de måtte tilføres en materialavhengig mengde energi ϕ , slik at den maksimale kinetiske energien som er mulig å observere for de frigjorte elektronene er

$$K_{max} = eV_0 = h\nu - \phi \quad (2.3)$$

ϕ kalles for *arbeidsfunksjonen* for materialet, altså det mekaniske arbeidet elektronet må utføre for å unnsinne materialet. Det skulle vise seg at konstanten som er betegnet med h i ligningen 2.3 er den samme som den i 2.1, altså *Plancks konstant* med verdi

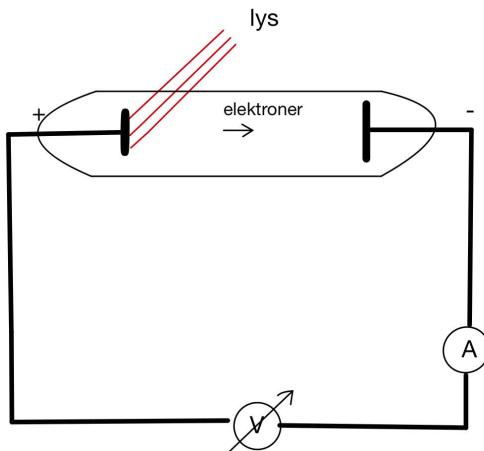
$$h = 6,62607015 \times 10^{-34} \text{ Js} \approx 4,136 \times 10^{-15} \text{ eVs} \quad (2.4)$$

Svært ofte har man bruk for $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$$\hbar = 1,05457 \times 10^{-34} \text{ Js} = 6,58212 \times 10^{-16} \text{ eVs} \quad (2.5)$$

I den nyeste versjonen av SI enhetssystemet tas verdiene naturkonstantene h og c som *eksakte*. Definisjonen av masse (1 kg), og lengde (1 meter) er avledet fra disse, slik at meter og kilogramsprototyper kan verifiseres ved hjelp av disse konstantene.

Fotoabsorbsjon kan ikke foregå når fotonene treffer frie elektroner. Dette ville bryte energi/bevegelsesmengde-bevaring. I systemet der elektronet er i



Figur 2.3: Skjematisk tegning av apparatur til å måle stoppepotensialet til elektroner som frigjøres når lys treffer et materiale (en fotokatode). Lyset forårsaker en strøm av elektroner mot den negative terminalen. Det går strøm så lenge det fins elektroner med nok energi til å nå fram til anoden (som i dette eksperimentet er lagt på et negativt potensial). Man justerer spenningen inntil det slutter å gå strøm. Denne spenningen gir da den maksimale elektronenergien (i elektronvolt)

ro vil bevegelsesmengdebevaring gi

$$\frac{E_\gamma}{c} = p_e$$

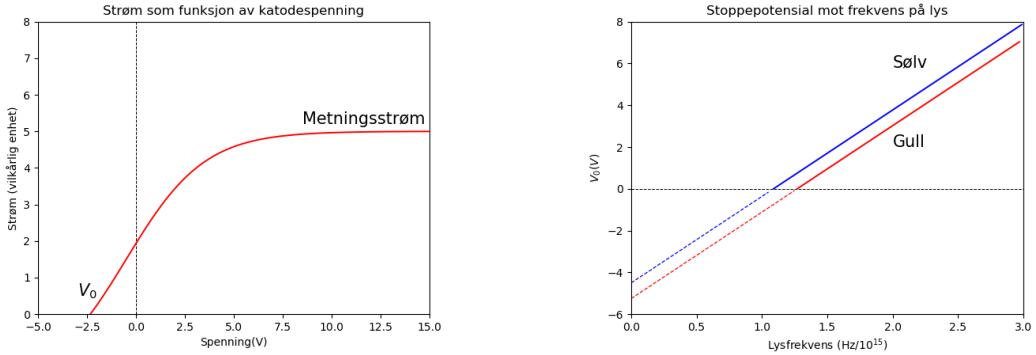
der p_e er bevegelsesmengden elektronet har fått i prosessen. Energibevaring gir

$$E_\gamma + m_e c^2 = \sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_e c)^2}$$

Hvis vi setter inn for p_e (som ikke kan være null) så ser vi at venstre side aldri kan bli lik høyre side. Inni et materiale finns det imidlertid både elektroner og kjerner som kan ta opp bevegelsesmengden slik at bevaringslovene er oppfylt. Men elastisk spredning av fotonet på et fritt elektron kan inntreffe. Denne prosessen kalles Comptonspredning.

2.2.2 Comptonspredning

Figur 2.5 viser et spekter av energioverføringer fra fotoner til elektroner i et materiale. Når hele fotonets energi overføres til ett elektron, har vi altså det



Figur 2.4: Venstre: Strøm mot anodespenning. Økt lysintensitet av gitt frekvens gir økt strøm, men stoppepotensialet V_0 endres ikke. Høyre: Stoppepotensial, $|V_0|$, mot lysfrekvens for to forskjellige katodematerialer. (Linjene må ekstrapoleres i området $V_0 < 0$ for at man skal finne arbeidsfunksjonen der linja krysser y-aksen.)

vi kaller kaller den fotoelektriske effekt, med elektronenergi som gitt i ligning 2.3.

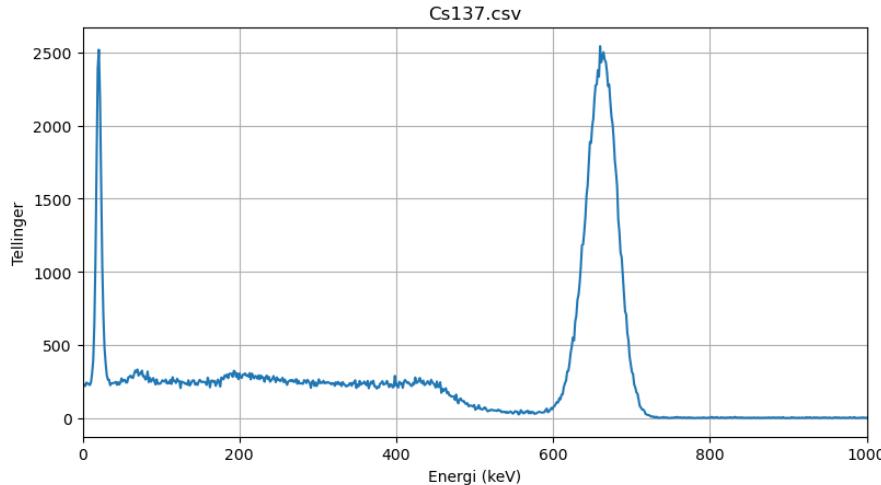
I fig. 2.5 er det svært energetiske fotoner fra kjernefysisk stråling som har blitt absorbert, nesten en million ganger høyere enn typiske verdier av arbeidsfunksjonen for materialet (ϕ i ligning 2.3).

Comptonspredning er navnet på prosessen der et foton treffer et elektron, men overlever. Det overfører noe av sin energi til elektronet og endrer dermed retning. Vi har hatt *elastisk spredning* mellom elektronet og fotonet. Mengden energi som overføres er en funksjon av spredningsvinkelen, og er behørig beskrevet i seksjon 1.8 (som det passer å repetere nå), der vi kom fram til ligning 1.21. Ved bakoverspredning har vi en maksimal energioverføring til elektronet, karakterisert ved

$$\lambda' - \lambda = \frac{2h}{m_e c} = \frac{2hc}{m_e c^2} = \frac{2 \times 1240\text{eVnm}}{511\text{keV}} = 4,8 \times 10^{-12}\text{m}.$$

Synlig lys har bølgelengder som typisk er $500\text{nm} = 5 \times 10^{-7}\text{m}$, slik at bølgelengde-endringen er ubetydelig. Rødt lys forblir altså rødt når det reflekteres på en metallisk overflate (som stort sett kan ses på en samling frie elektroner). Men for fotoner med energi 662 keV, altså slike som har forårsaket spekteret i figur 2.5 så stiller det seg annerledes: Dette fotonet har en bølgelengde på $\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{1240\text{eVnm}}{662\text{keV}} = 1,8 \times 10^{-12}\text{m}$. Ved bakoverspredning ($\phi = 180^\circ$) endres bølgelengden altså til

$$\lambda' = \lambda + \frac{2h}{mc} = (4,8 + 1,8) \times 10^{-12}\text{m} = 6,6 \times 10^{-12}\text{m}$$



Figur 2.5: Mange av prosessene som fotoner har i vekselvirkning med materie kan oppsummeres i denne figuren. Fotonene selv lager ikke signaler, de må først vekselvirke i skyen av elektroner i materialet; overføre hele, eller deler av sin energi til ett elektron, som i sin tur lager ionisasjonsenergi som kan observeres. Figuren viser energiavsetningen fra slike elektroner i et krystall når høyenergetiske fotoner på 662 keV treffer materialet. Mange fotoner med denne energien har truffet materialet, og plottet viser fordeling av antall fotoner som funksjon av energiavsetting. Den fotoelektriske effekt forårsaker at all energien overføres til materialet og ses som en topp ved 662 keV. Toppens bredde skyldes apparaturens oppløsningsvne. Det er unøyaktighet i energimålingen som gir en spredning i utfall av energimålingen. Den relativt flate fordelingen av energier kommer av Comptonspredning med et spekter av spredningsvinkler fra 0 til 180 grader. Ved 180 grader spredning går altså fotonet tilbake der det kom fra, og energieoverføringen til elektronet er maksimal, ca 475 keV (se ligning 1.21). Den skarpe toppen til venstre skyldes røntgenstråling som har oppstått i forbindelse med den radioaktive prosessen som genererer strålingen. Materialene brukt til å innkapsle den radioaktive kilden kan være bestemmende for nøyaktig posisjon av denne toppen, og hvor mange topper det er.

svarende til en fotonenergi på $\frac{1240\text{eVnm}}{6,6 \times 10^{-12}\text{m}} = 187\text{keV}$. Det kan gi en maksimal overført energi til elektronet på omtrent $(662 - 187)\text{keV} = 475\text{keV}$. Vi ser at dette svarer godt til kanten i spekteret av ionisasjonsenergier i fig 2.5.

2.2.3 Pardannelse

I tillegg til fotoabsorbsjon og Compton-spredning kan enkeltfotoner forsvinne, og omdannes til et elektron-positron par når det vekselvirker i et elektromagnetisk felt, for eksempel når det kommer nær en tung positiv atomkjernen. Dett er et eksempel på at energi blir til masse, og energibevaring tilsier at denne prosessen ikke kan skje dersim fotonenergien er lavere enn summen av massen til positronet og elektronet, altså $2m_e c^2 = 1022\text{ keV}$.

2.2.4 Fotondiffraksjon gjennom spalte.

Det blir virkelig mystisk når man skal forklare bølgefenomener som interferens og diffraksjon ved hjelp av fotoner. Hva skjer når ett foton passerer gjennom spalten(e)? I figur 2.6 ser vi et diffraksjonsmønster for lys som passerer en spalte med bredde på henholdsvis det dobbelte og fire ganger bølgelengden, slik det er forklart fra diffraksjonsteori. Hvis dette er forårsaket av en samling fotoner så kan hvert foton endre retning. Og retningsendringen er større jo mindre spalten er. Hva blir den gjennomsnittlige retningsendringen? Den avhenger faktisk av bredden på spalten!

Vi kan se på spaltebredden som et forsøk på å lokalisere fotonets posisjon. Vi tenker oss at vi gjør gjentatte målinger av posisjonen. Istedet for å telle opp, slik det er beskrevet i tillegg B diskuterer vi en underliggende sannsynlighetsfordeling, som i dette tilfellet ikke er gaussfordelt, men en spalte med skarpe kanter. Usikkerheten i posisjonen kan karakteriseres ved hjelp av standardavviket, det gjennomsnittlige avviket fra middelverdien av posisjonen. La oss sette middelverdien lik 0, slik at en spalte med bredde L har åpning fra $-L/2$ til $L/2$. Om fotonet er en klassisk partikkkel kan det passere hvor som helst i spalten med samme sannsynlighet. Sannsynlighetstettheten er $p(x)dx = dx/L$ slik at vi får normert sannsynlighet til 1 når vi legger sammen alle bidragene:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{dx}{L} = 1$$

Middelverdien, eller forventningsverdien av hvor fotonet passerer er gitt som

$$\bar{x} = \int_{-L/2}^{L/2} xp(x)dx = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{x}{L} dx = 0$$

Det gjennomsnittlige avviket fra middelverdien kalles standarddavviket. Det kommer fram ved å legge sammen kvadratet av avvikene vektet med sannsynligheten for et slikt avvik, og ta kvadratrotten til slutt. Man får da standardavviket. På engelsk kalles dette Root Mean Square deviation, RMS. Kvadratet kalles for variansen.

$$Var = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 p(x) dx$$

Vi ser at

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 p(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx - \int_{-\infty}^{\infty} 2x\bar{x}p(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \bar{x}^2 p(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx - 2\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} xp(x) dx + \bar{x}^2 \int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx - 2\bar{x}^2 + \bar{x}^2 \int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x) dx - \bar{x}^2 \int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx \\ &= \bar{x}^2 - \bar{x}^2 \end{aligned}$$

Her er $\bar{x}^2 = 0$. Standardavviket til posisjon av fotonet som kommer gjennom spalten er dermed

$$\Delta x = s = \sqrt{Var} = \sqrt{\int_{-L/2}^{L/2} \frac{x^2}{L} dx} = \frac{L}{\sqrt{12}} \quad (2.6)$$

2.2.5 Heisenbergs usikkerhetsrelasjon

Men spalten har ført til en uforutsigbar *endring i fotonretning* fra $\theta = 0$. Det må ha oppstått en transvers komponent i fotonbevegelsesmengden. Fotonenergien som ble introdusert for å forklare den fotoelektriske effekt er $E_\gamma = h\nu$, noe som gir fotonbevegelsesmengde:

$$p_\gamma = E_\gamma/c = \frac{h}{\lambda}$$

For å få en følelse av størrelsen på den transverse komponenten beregner vi den gjennomsnittlige retningsendringen i de to figurene i figur 2.6 numerisk. For enkelthets skyld tar vi bare med alle fotoner ned til første intensitetsminimum (da har vi fått med de aller fleste av dem). Intensitetsminimum er, iflg. teori for diffraksjon, ved vinkelen

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{L}$$

som altså befinner seg ved h.h.v. $\sin \theta = \pm \frac{1}{4}$ og $\pm \frac{1}{2}$ for de to spaltebreddene (4λ og 2λ). Man kan gi et omtrentlig anslag av gjennomsnittlige retningsendringen ved å se på figuren. Den er nemlig omtrent halvparten av bredden til disse toppene, som målt der intensiteten er redusert til det halve (Se appendiks om statistikk). Vi beregner dette mer eksakt numerisk.

$$s_\theta = \sqrt{\bar{\theta^2}} = \sqrt{\int_{-\theta_{min}}^{\theta_{max}} \theta^2 I(\theta) d\theta}$$

Vi får verdier for $s_\theta = \sqrt{\bar{\theta^2}}$ på henholdsvis 0,084 (for $L = 4\lambda$) og 0,172 (for spaltebredde $L = 2\lambda$) fra de to fordelingene i fig. 2.6. Dette passer omtrent med å anta et standarddavik for retningendringens transverse komponent gitt som:

$$\sin \Delta\theta = 0,35 \times \frac{\lambda}{L}$$

Dette kan oversettes til en spredning i transvers fotonenergi *introduisert med forsøket på å lokalisere fotonet*. Når et foton med bevegelsesmengde $p = \frac{h}{\lambda}$ passerer en åpning med bredde L så får vi nemlig en gjennomsnittlig transvers komponent av bevegelsesmengden på

$$\Delta p = p \sin \Delta\theta = \frac{h}{\lambda} \times 0,35 \times \frac{\lambda}{L}$$

Men usikkerheten i posisjon er $L/\sqrt{12} = 0,29L$ fra formel 2.6 For fotonene har vi dermed

$$\Delta p \Delta x = h \times 0,350,29 \approx 0,1h$$

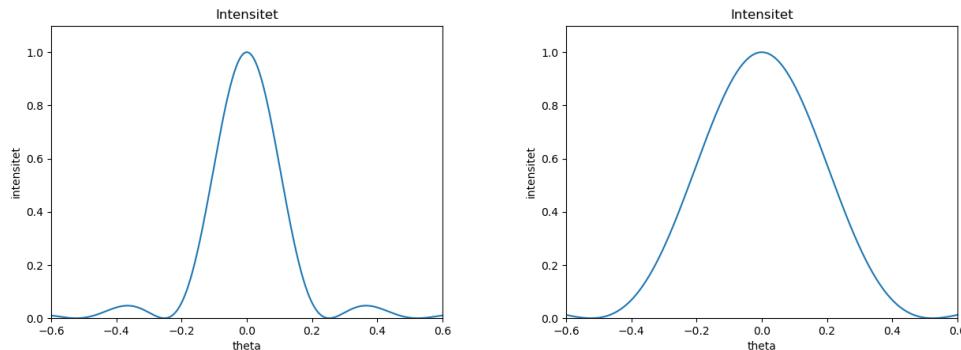
Vi har funnet det samme som Heisenberg formulerte: *Vi kan aldri presist bestemme både posisjon og bevegelsesmengde til en kvantemekanisk partikkel*. Han utledet sin usikkerhetsrelasjon som gjelder for fotoner såvel som partikler med masse. Den lyder

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{h}{4\pi} \approx 0,08h \quad (2.7)$$

Vi ser at våre anslag for diffraksjon av fotoner er i overenstemmelse med denne ulikheten.

2.2.6 Dobbeltspalte

Enda mer forvirrende er det at enkeltfotoner skal oppføre seg som bølgepakker når de treffer en dobbeltspalte. En typisk intensitetsfordeling kan være slik det er observert i figur 2.7 (venstre del) for en monokromatisk lysstråle. Hva

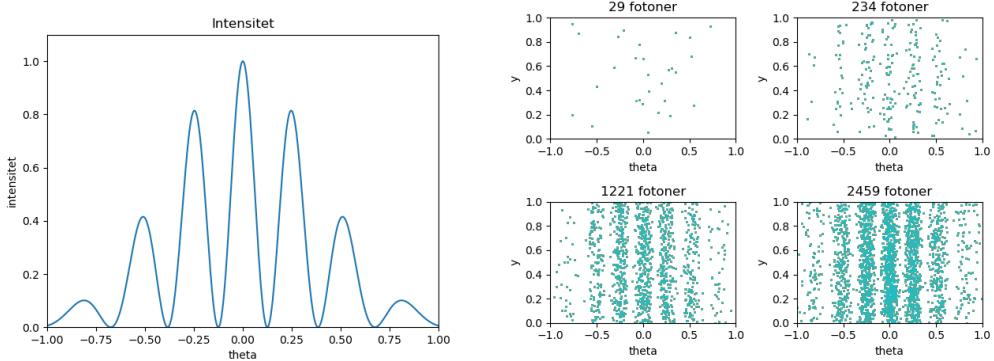


Figur 2.6: Diffraksjonsmønster for lys gjennom en spalte med åpninger på h.h.v. $L = 4\lambda$ og $L = 2\lambda$. Om vi projiserer strålen på en plate bak spalten så vil intensitetsfordelingen være svært forskjellig fra en firkantet boks bak spalten, slik det hadde vært uten diffraksjon. De gjennomsnittlige retningsendringene for fotoner innenfor første intensitetsminimum er numerisk beregnet til henholdsvis $s_\theta = \sqrt{\theta^2} = 0,084$ og $0,172$.

skjer om ett og ett foton passerer spaltene? Kan fotonet *velge* spalt? Det viser seg at så lenge vi ikke prøver å finne ut hvilken spalt som er passert (f.eks. ved å lukke en av spaltene), så vil mønsteret som bygger seg opp bli slik man forventer fra en kontinuerlig lysbølge. Fig. 2.7 (høyre) viser en simulering av hva som kan skje om man setter opp et eksperiment for å måle enkeltfotoner. Dette har vært verifisert gjennom mange eksperimenter både med fotoner og elektroner. I kvantemekanikken må man postulere at man ikke kan vite hvilken bane partikkelen har valgt, man kan bare definere en sannsynlighetsamplitude for den. Den kjente fysikeren Richard Feynman har kommet med en formulering av kvantemekanikken basert på slike amplituder. [8]

2.3 Røntgenstråling

Wilhelm Røntgen oppdaget at stråling med svært kort bølgelengde kunnne oppstå når elektroner bombarderte flater av forskjellig typer. Figur 2.8 viser skjematiskt hvordan et røntgenrør er satt opp. Når elektronene treffer targetmaterialet, vil de bremses ned i det elektriske feltet de kommer inn i på grunn av elektronskyen i materialet. Oppbremsingen skjer ved at elektronet sender ut fotoner, kalt *Bremsestråling*. Energispekteret til bremsestrålingsfotoner er kontinuerlig, med maksimumsenergi lik den kinetiske energien, $E_{kin} = eV$,



Figur 2.7: Intensitetsfordeling for lys gjennom en dobbeltspalte (til venstre). Til høyre er enkeltfotoner simulert i henhold til intensitetsfordelingen med treffpunkt i en tenkt skjerm. Etterhvert som antall fotoner øker ser man at interferensmønsteret trer fram.

som det innkommende elektronet treffer materialet med når det er akselerert over en potensialforskjell V . Om man plotter strålingsspekteret som funksjon av bølgelengde, så har det altså et endepunkt, en korteste bølgelengde. Vi har

$$h\nu_{max} = \frac{hc}{\lambda_{min}} = eV \quad (2.8)$$

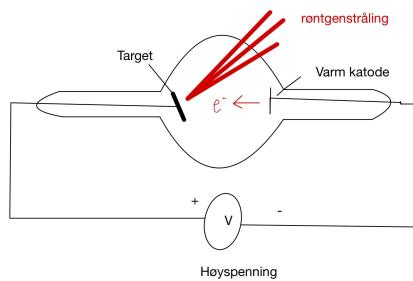
Formen og intensiteten av bremsestrålingsspekteret kan beskrives fenomenologisk med 'Kramers lov':

$$\frac{dI}{d\lambda} = K \left(\frac{\lambda}{\lambda_{min}} - 1 \right) / \lambda^2 \quad (2.9)$$

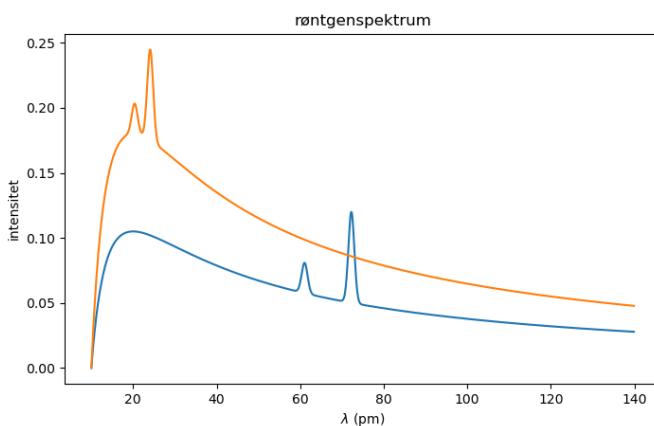
Her er konstanten K proporsjonal med atomnummeret til materialet i anoden.

Om energien på elektronene er høy nok så vil også skarpe topper i framkomme i spekteret. Bølgelengden til disse toppene vil avhenge av materialet i anoden. Den svenske fysikeren Manne Siegbahn er opphav til klassifiseringen av de skarpe linjene, kalt bl.a. K_α og K_β . Toppene skyldes at de energetiske elektronene ofte treffer og skyter ut elektroner fra det innerste elektronskallet i atomet, 'K-skallet'. Iflg. både kvantemekanikken og Bohr's atommodell (som omtales i neste seksjon) er energinivåene til ett elektron bundet til en kjerne med ladning Ze , der Z er antall protoner i kjernen, gitt som:

$$E_n = -\frac{m_e c^2}{2(\hbar c)^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{Z^2}{n^2} = -13,6 \text{ eV} \frac{Z^2}{n^2} \quad (2.10)$$



Figur 2.8: Skjematisk oppsett av et røntgenrør. Fotoner med energi opptil den kinetiske energien til elektronene som treffer anoden vil sendes ut.



Figur 2.9: Intensitetsfordelinger, (spektre) fra røntgenstråling, skjematisk for Molybden (Z=42) og Wolfram (Z=72) ut fra formlene 2.9 og 2.12. Høyden og bredden av de skarpe toppene vil avhenge av oppløsningsevnen til registreringssystemet.

Energiforskjellen mellom energinivåene gir de mulige energiene til fotone ne om det skulle være kun ett elektron bundet til kjernen:

$$\Delta_E = E_n - E_m = 13,6Z^2\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)\text{eV} \quad (2.11)$$

Men det er mange elektroner bundet til kjernen, i *skall*. Vi skal komme tilbake til denne modellen i et senere kapittel, og gi en forklaring på at det er plass til nøyaktig 2 elektroner i det innerste skallet ($n=1$). Det viser seg at energien til toppene er godt modellert om vi antar at elektroner i i høyereleggende skal opplever skjerming fra elektroner i lavereliggende skall. Når ett elektron er skutt ut fra det innerste skallet, så vil elektronene i skallet utenfor føle kraften fra kjerneladningen + ladningen til ett elektron, altså en effektiv ladning på $(Z - 1)e$. Dermed kan man forutsi at de skarpe toppene svarer til fotonenergier på

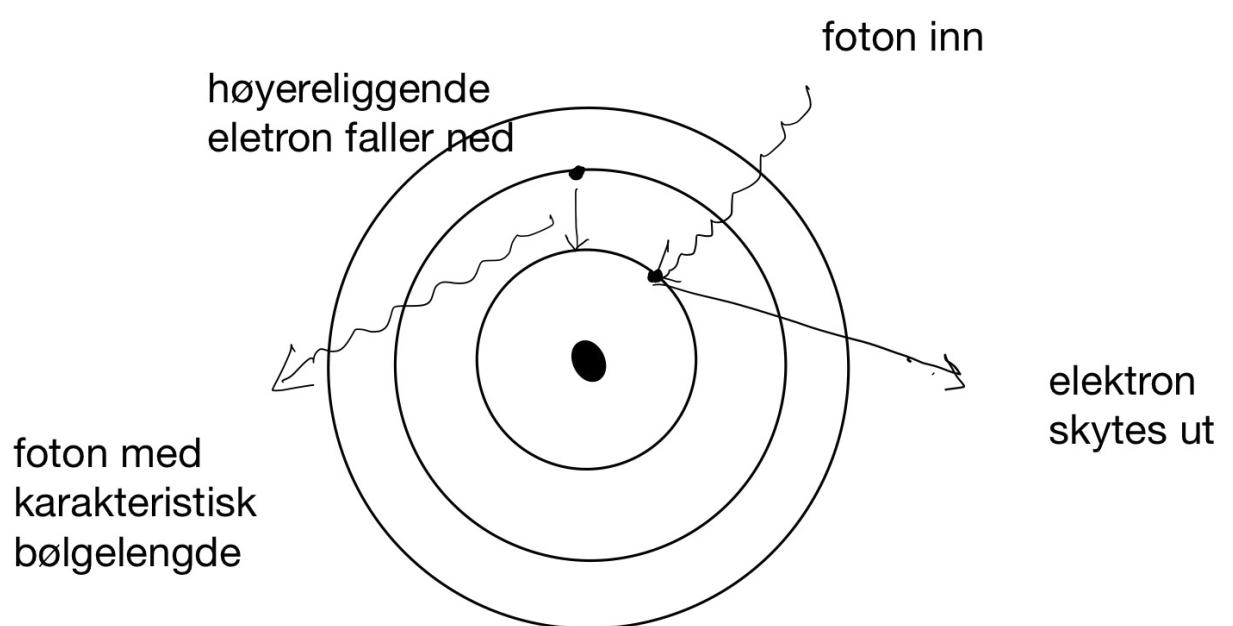
$$E_\gamma = h\nu = 13,6(Z - 1)^2\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)\text{eV} \quad (2.12)$$

Denne modellen viser seg å passe veldig godt med observasjoner! Dette er ikke spesielt opplagt. Vi skal se at en kvantemekanisk beskrivelse av elektromskyene til de forskjellige elektronene gir stort overlapp i avstander, Kun delvis skjerming av kjerneladningen må antas i mange andre samanhenger. Dette skulle tale imot at en modell som antar fullstendig skjerming passer godt med observasjon.

2.4 Radioaktivitet og Rutherford eksperimenter

Radioaktivitet ble oppdaget av Henri Bequerel i 1896¹. Det viste seg fort at den utsendte strålingen fra radioaktive henfall, α , β og γ -stråling, var nyttige som prosjektiler til å studere materiens oppbygging. α -strålingen er helium-kjerner, tunge kjerner med to protoner og to nøytroner. β -stråling er elektroner eller positroner, mens γ -stråling er høyenergetiske fotoner, med typiske energier som er over en million ganger høyere enn fotonene i synlig lys. Den kinetiske energien til α og β partiklene er også typisk fra 0,1 til 5 MeV. Tar man utgangspunkt i formelen $E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mc^2\beta^2$ vil en kinetisk energi på 2 MeV gi $\beta^2 = 0,001$ for α -partikler ($mc^2 \approx 4000$ MeV). Elektronets hvileenergi er på 0,5 MeV, og en relativistisk hastighetsberegnning er nødvendig ($E_k = mc^2(\gamma - 1)$).

¹Radioaktivitet blir omtalt i detalj i kapittel 9



Figur 2.10: Karakteristisk stråling

Hans Geiger, Ernest Marsden og Ernest Rutherford beskjøt tynne folier med α -partikler. Rekkevidden til α -partikler er bare et par centimeter i luft, så kilden, folien og detektorapparatur måtte stå i vakuum for at α -partiklene skulle kunne nå fram til folien og detektoren. Først satte de detektoren bak folien. De fant ut at de aller fleste α -partiklene gikk rett igjennom folien. Dette var rimelig konsistent med Thomson sin atommodell, som gikk ut på at foliene består av en pudding av positiv ladning med elektroner som rosiner i puddingen. Men så plasserte de detektoren på samme side av folien som den radioaktive kilden. De forventet ikke å se noen α -partikler i det hele tatt. Men det viste seg at innimellom så fikk de faktisk signaler i detektoren sin. Det kom svært overraskende på Rutherford og medarbeidere. Ifølge deres forestillinger skulle ikke dette være mer sannsynlig enn at et papirark skulle kunne reflektere en kanonkule. Etterhvert førte dette til at Rutherford, i 1911, laget en planetmodell for atomene som bygde opp materien. Atomene skulle bestå av en tung positivt ladet kjerne med elektroner i bane rundt kjernen. Ut fra eksperimentene med alfapartikler kunne det settes verdier eller grenser for masse, størrelse og ladning på kjernene. Massen og ladningen i kjernene kunne godt være samlet i punkter for eksperimentene kunne bare etablere at de var mindre enn omrent 10^{-12} m (se kapittel 9).

2.5 Bohrs atommodell

Grunnen til at Thomson lagde en grøtmodell for atomene var at elektronene burde være i ro i materien. Hvis de er i akselerert bevegelse, som i Rutherford's modell, så tilsier nemlig dette at elektronene mister energi gjennom bremsestråling. Dermed skulle elektronene gå i en spiral inn mot kjernen, og smelte sammen med den positive ladningen.

Niels Bohr skrev i 1911 en avhandling om elektroner i metaller. Etter dette fikk han stipend, og reiste til England, først til Cambridge for å delta i arbeidet i forskningsgruppen til Thomson. Men så ble han kjent med Rutherford, og dro til Manchester for arbeide med hans atommodell. Her utviklet han sin egen modell [5] som vi skal gjennomgå her. Rutherford/Bohr-modellen antar altså analogi med planetbaner. I likhet med gravitasjonskraften så avtar Coulombkraften som $1/r^2$. Et elektron i sirkulær bane rundt et proton føler Coulombkraften, som gir en sentripetalkraft

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (2.13)$$

Dette kan vi løse m.h.p. hastighet, $v = e/\sqrt{4\pi\epsilon_0 mr}$ og finne rotasjonsfre-

kvensen av elektronet (gresk n , ν for frekvens ligner dessverre mye på v):

$$\nu = \frac{v}{2\pi r} = \frac{e}{4\sqrt{\pi^3 \epsilon_0 m r^3}}$$

Den potensielle energien er gitt ved *Coulombpotensialet*.² Totalenergien til elektronet er

$$E = E_k + E_p = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Ionisasjonsenergien for et elektron i en slik bane er altså

$$W = -E = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Vi kan skrive formelen for frekvens ved hjelp av $r = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 W}$ og få

$$\nu = \frac{4\sqrt{2}\epsilon_0 W^{3/2}}{e^2 \sqrt{m}}$$

Niels Bohrs dristige antakelse gikk ut på å bruke Plancks energikvanter. Kun rotasjonsfrekvenser i atomet var tillatt om de oppfylte

$$W = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = N\hbar\nu/2$$

Denne antakelsen er eksplisitt skrevet inn i Bohr's publikasjon [5].³ Da kan vi sette inn for ν og løse for W

$$W_N = \frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 N^2 h^2} \quad (2.14)$$

Setter man inn for $N = 1$ får man energien til *grunntilstanden* til hydrogenatomet. Numerisk: $E = -13,6$ eV. De lovlige radiene er

$$r = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 W} = \frac{\epsilon_0 N^2 h^2}{\pi e^2 m}$$

(2.15)

²Dessverre er språkbruken litt unøyaktig: I kvantemekanikk mener man vanligvis den potensielle energien til en spesifisert ladning med denne betegnelsen, ikke antall Volt(som jo er antall Joule per. ladningsenhet)

³NB: I dette avsnittet har jeg valgt å bruke store bokstaver, N og M for energinivåene, for å unngå å blande med de andre symbolene. I oppgavene, bruker vi små bokstaver (n, m, \dots) for kvantetallene slik det er vanlig i litteraturen.

Setter man inn $N = 1$ får vi det vi kaller *Bohrradien*, som gjerne betegnes med $a_0 = 0,529 \times 10^{-10} m = 0,529$ Ångstrøm. Bohrradien er altså minste radien elektronet i bane rundt protonet i hydrogenatomet kan ha.

Hastigheten til elektronet i de lovlige banene gitt ved 2.15 blir

$$v = \frac{e}{2\sqrt{\pi\epsilon_0 mr}} = \frac{e^2}{2\epsilon_0 Nh} \quad (2.16)$$

Vi ser at det angulære momentet dermed blir

$$L = mrv = m \frac{\epsilon_0 N^2 h^2}{\pi e^2 m} \frac{e^2}{2\epsilon_0 Nh} = N \frac{h}{2\pi} = N\hbar \quad (2.17)$$

Bohrmodellen forutsier dermed at det angulære momentet til banene er kvantiserte som et helt tall multiplisert med \hbar . Ofte begynner lærebøkene med kvantisering av angulært moment som antakelse, og beregner så energinivåer osv. Her har vi isteden fulgt Bohrs publikasjon og endt opp med formelen for kvantisert angulært moment som forutsigelse. Vi skal senere forklare at dette er den rette kvantiseringssregelen for komponenten av romlig angulært moment inn på en valget akse (vanligvis benevnt med 'z-aksen'), men ikke for absoluttverdien av L .

Bohr postulerte i sin modell at overganger mellom disse banen skjedde i sprang mellom banene, der endringen i atomets energi ble kompensert ved utsendelse av ett foton med energi $E_\gamma = h\nu$, der altså frekvensen av fotonet var gitt gjennom energibevaring. Om en overgang finner sted mellom nivå N og M så sendes det ut eller absorberes et foton med

$$E_\gamma = h\nu = \frac{e^4 m}{8\epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{N^2} - \frac{1}{M^2} \right) \quad (2.18)$$

Dette resultatet var virkelig sensasjonelt i 1913. Man hadde nemlig studert absorpsjons- og emisjonsspektra av gasser, deriblant hydrogen, og Bohrs modell gav en helt korrekt prediksjon av bølgelengdene.

2.6 Materiebølger

Eksistensen av lys som partikler ble etterhvert godt etablert. Men hva om partikler har bølgeegenskaper? Louis de Broglie begynte å spekulere på dette, og leverte sin doktoravhandling om temaet i 1924. Utgangspunktet er å anta at relasjonen som gir bølgelengden til et foton skal gjelde universelt. Bevegelsesmengden til en masseløs partikkel kan man få fra den etterhvert godt kjente

relasjonen $E = h\nu$ som gjelder for fotoner. Vi har $p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$, og bølgehastigheten i vakuum er $c = \lambda\nu$.

Kan dette overføres til en partikkel med masse? Den har bevegelsesmengde $p = m\gamma v$, så om vi setter inn dette så kan vi tilordne en karakteristisk bølgelengde til en partikkel med masse:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\gamma v} \approx \frac{h}{mv} \quad (2.19)$$

der det siste uttrykket gjelder for $v \ll c$.

Hvis vi setter dette inn i ligning 2.17 så får vi

$$mvr = \frac{h}{\lambda}r = N \frac{h}{2\pi}$$

altså

$$N\lambda = 2\pi r$$

i Bohratomet. De tillatte banelengdene i Bohratomet er dermed de som gir resonansfrekvenser i de fleste vibrasjonsfenomener! (halve og kvarte bølgelengder gir ofte også resonanser i klassisk fysikk)

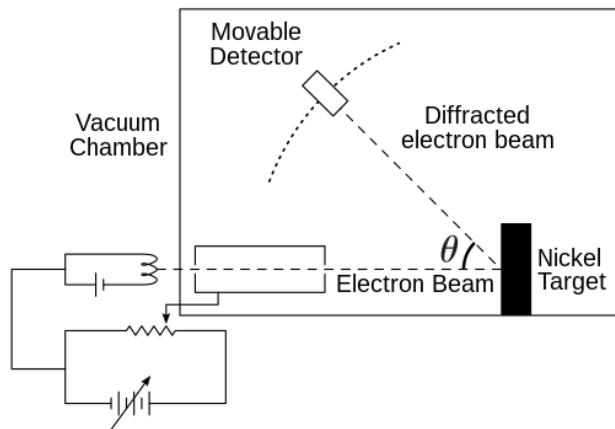
Elektronets bølgenatur ble bekreftet av en serie eksperimenter der det ble studert hvordan elektroner ble reflektert fra krystalloverflater av nikkel, kalt Davisson-Germer eksperimentet, som bekreftet at reflekterte elektroner viste et interferensmønster på samme måte som lys. Med kunnskap om gitteravstanden i nikkelkrystallen kunne man bekrefte at bølgelengden til elektronene passet med de Broglies hypotese. Effekten er idag utnyttet i elektronmikroskopi. Et typisk elektronmikroskop benytter elektroner med kinetisk energi på 100 keV som 'belyser' tynne prøver. Transmisjonsspekteret studeres. (Dette kalles et TransmisjonsElektronMikroskop, TEM). Oppløsningsevnen er gitt av bølgelengden til elektronene, som beregnes ikke-relativistisk slik utfra $E_k = \frac{1}{2}mv^2$ og formel 2.19. Man finner fort ut at det er nødvendig å benytte det relativistiske uttrykket for kinetisk energi, formel 1.17.

Om man vil relatere de Broglie bølgelengden til en oscillasjonsfrekvens, så er ikke dette så enkelt som for fotoner. Hvis vi prøver med uttrykket for energien til fotoner, men setter inn elektronenergien så har vi

$$E = h\nu = \gamma mc^2 \quad \text{d.v.s} \quad \nu = \frac{\gamma mc^2}{h}$$

Av dette får vi

$$\nu\lambda = \frac{\gamma mc^2}{h} \frac{h}{m\gamma v} = \frac{c^2}{v}$$



Figur 2.11: Davisson Germer eksperiment. Fra Wikipedia

Dette er de Broglies fasehastighet⁴, og nokså meningsløst siden denne hastigheten alltid er større enn lyshastigheten. Men hastigheten til masseløse partikler i vakuum er $v = c$, og da har man fasehastighet av bølgen lik hastigheten til partikkelen.

For å finne ut hvordan materiebølgen propagerer, så må man anta at den i praksis har en spredning i bevegelsesmengder. Siden bevegelsesmengden er relativert til hastigheten, $p = mv$ når $v \ll c$, så får vi *dispersjon* i bølgepakken. Den relevante hastigheten for en bølgepakke er *gruppehastigheten*. Den kan man vise at er lik $v = p/m$ også for de-Broglie bølger.

I neste kapittel formulerer vi kvantemekanikken for ikke-relativistiske partikler, og skriver litt mer om materiebølger.

⁴Referanse [9] gir denne betegnelsen på størrelsen

2.7 Oppgaver

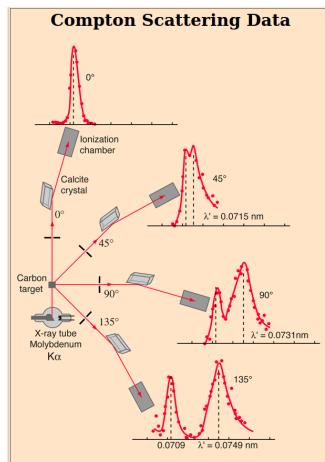
1. Sola skinner på jorda med en intensitet på ca 1380 W/m^2 når den treffer atmosfæren.
 - Hvor mange fotoner tilsvarer dette om de alle har en frekvens på $5 \times 10^{14} \text{ Hz}$?
 - Benytt Stefans lov til å beregne temperaturen på solas overflate. Anta at avstand til sola er 150 millioner km, og diameteren til sola er 1,4 millioner km.
2. Finn en ligning for bølgelengden med maksimal intensitet for gitt temperatur av den sorte strålingen. For å komme videre så må man finne løsning for ligningen

$$5 - x = 5e^{-x}$$

Vis at $x = 4,965$ passer fint og dermed er bølgelengden med maksimal intensitet gitt som

$$\lambda_m = \frac{hc}{4,965kT}$$

3. Glødelamper har en typisk temperatur på ca 2700 K. Hvilken farge har lyset?
4. Vis at ligning 2.2 gir ligning 2.1.
5. En laserpeker sender ut rødt lys med bølgelengde 650 nm og effekt på 5 mW. Hva er energi og bevegelsesmengde til hvert foton? Hvor mange fotoner sendes ut hvert sekund?
6. Det menneskelige øyet skal være i stand til å detektere et enkelt foton i det grønne området med blølgelengde rundt 520 nm. (da må man tilvenne øyet ved å oppholde seg lenge i et helt mørkt rom). Hvor mye energi leverer ett slikt foton til reseptoren i øyet?
7. En overflate av nikkel utsettes for UV-lys med bølgelengde 206 nm. Hva er den høyeste energien og hastigheten et elektron utsendt fra nikkeloverflaten kan ha (på grunn av fotoelektrisk effekt). Arbeidsfunksjonen til nikkel er $\Phi = 5,1 \text{ eV}$.
8. I et eksperiment som studerer fotoelektrisk effekt finner man et stoppepotensial på 1,25 V. Finn den høyeste energien og hastigheten til elektronene dette eksperimentet.



Figur 2.12: Skisse av eksperiment som demonstrerer Compton-effekten, og data fra Comptons opprinnelige eksperiment, som viser oppstilling av antall fotoner som funksjon av fotonets bølgelengde. Fotonene kommer oppover fra røntgenrøret, og apparaturen til Compton målte bølgelengdespekter ved forskjellige spredningsvinkler av fotonene (fra <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu>, 3/2-2022)

9. Et bestemt katodemateriale er slik at vi har følgende stoppepotensialer: 1 V når innkommende lys har $\lambda = 600 \text{ nm}$, 2V for $\lambda = 400 \text{ nm}$ og 3V for $\lambda = 300 \text{ nm}$. Bruk informasjonen til å finne arbeidsfunksjonen til materialet, og gi et anslag av Plancks konstant på grunnlag av informasjonen.
10. Vis at parproduksjon ikke inntreffer i vakuum ved bruk av bevaringslover for energi og bevegelsesmengde.
11. Figur 2.12 viser Comptoneffekten på en mer tradisjonell måte enn Cs-137 spekteret vist i fig. 2.5.
 - Hvilken energi har fotonene som sendes ut fra røntgenrøret?
 - Lag et plott av forventet endring i bølgelengde som funksjon av spredningsvinkel, og sammenlign med observasjonene i vist i figuren.
12. Et foton med energi 10 MeV kommer inn nær en atomkjernen, og det omvandles til et elektron-positron par. Dette kan ses på som et støt mellom fotonet og kjernen, slik at reaksjonen er

$$\gamma + A \rightarrow e^+ + e^- + A$$

- Anta at atomkjernen (masse M) fortsetter i samme retning som retningen til fotonet. Skriv ned bevaringslovene for energi og bevegelsesmengde i reaksjonen.
 - Forklar at vi til en god tilnærming kan bruke de ikke-relativistiske uttrykkene for energi og bevegelsesmengde til atomkjernen. Hvor dan forenkler dette uttrykkene i forrige punkt?
 - I de fleste tilfelle kan vi i praksis også se bort ifra rekylen til kjernen (selv om vi ender opp med ligninger som ikke er helt konsistent med alle bevaringslover). Skriv opp bevegelsesmengdebevaring slik den blir når vi ser helt bort fra rekylkjernen. Bruk vektornotasjon.
 - Da skal vi ha energi- og bevegelsesmengde ligninger som ikke inneholder ledd med rekylkjernen. Beregn den invariante $p_\mu p^\mu$ før og etter reaksjonen i denne tilnærmingen.
 - Forklar at åpningsvinkelen mellom det utgående elektronet og positronet må være null i denne tilnærmingen.
 - Finn og beskriv boblekammerbilder på nettet som underbygger at denne åpningsvinkelen er veldig liten når parproduksjon finner sted.
13. Beregn de Broglie bølgelengden til et elektron og et heliumatom med hastighet $\beta = 0,1c$.
14. Et hydrogenatom er i en tilstand med energinivå $-0,085\text{ eV}$. Om Bohr's atommodell er rett, hva er banespinnet til elektronet?
15. Et hydrogenatom i grunntilstanden absorberer et foton og havner i en tilstand med hovedkvantetall $n = 5$. Hva er energi og bølgelengde til fotonet.
16. I Bohr's modell, beregn hastigheten til et elektron i tilstanden med $n = 2$. Levetiden til denne tilstanden er $1,0 \times 10^{-8}\text{ s}$. Hvor mange runder går elektronet i denne banen før det faller ned i grunntilstanden?
17. Det er faktisk mulig å lage hydrogenlignende atomer der elektronet er erstattet med et myon. Myoner har en masse på $105\text{ MeV}/c^2$. og en levetid på $2 \times 10^{-6}\text{ s}$.
- Beregn Bohr-radien til et myonisk hydrogenatom.
 - Hvor mange runder rundt protonet ville et myon i grunntilstanden gå rundt protonet (iflg. Bohr-modellen)?

18. I figur 2.8 ses fire topper. Hvilke overganger svarer disse toppene til? Sammenlign forutsigelser med de 'observerte' spektrene.
19. Skriv et dataprogram som bruker en tilfeldighetsgenerator til å generere (f.eks.) 10000 tall som er vilkårlig, flatt, fordelt mellom verdiene -1 og +3. Beregn middelverdi og standardavvik av verdiene ved bruk av formler fra tillegg B, eller en passende funksjon i tilgjengelig programbibliotek, og bekrefte at standardavviket er i overenstemmelse med formel 2.6.
20. La oss anta at partikler treffer et punkt på en skjerm langs x-aksen med sannsynlighetstetthet som fordeler seg som

$$P(x) = Ax(10 - x)$$

med $0 \text{ cm} < x < 10 \text{ cm}$.

- Beregn normeringskonstanten, A , når vi anser det som sikkert at alle partikler treffer et eller annet sted på intervallet.
- Tegn en skisse av funksjonen. Sørg for korrekt benevning på aksene.
- Beregn middelverdi og standardavvik for fordelingen.
- Beregn sannsynligheten for at en partikkel treffer innenfor intervallet $3\text{cm} < x < 8\text{cm}$.

Kapittel 3

Kvantemekanikk

Kvantemekanikken ble utviklet for å beskrive fenomener på størrelser som foregår på en skala mindre enn 1 nm. Man måtte innføre en tankegang som brøt radikalt med forestillingene som styrer den klassiske fysikken. I klassisk fysikk står det sentralt at de systemene vi studerer og utfører målinger på kan observeres fullstendig uforstyrret. Kvantemekanikken bryter med dette prinsippet: Alle observasjoner eller målinger vil påvirke systemet som vi observerer.

Det er kanskje ikke så merkelig at verden er slik på nanoskala: Hvis vi ser på en gjenstand så krever det faktisk at lys treffer gjenstanden, slik at vi kan observere det reflekterete lyset fra gjenstanden. For makroskopiske gjenstander, så gir endringen i bevegelsesmengden til det reflekterte lyset en fullstendig ubetydelig endring i gjenstandens posisjon eller hastighet. Hvis vi ønsker å studere enkeltatomer er imidlertid situasjonen helt annerledes. Her må vi heller snakke om *spredning*¹ av fotoner på atomene; en prosess der ikke bare fotonet men også atomet endrer sin bevegelsesmengde betydelig.

Måleprosessen står sentralt i formuleringen av kvantemekanikkens postulater. Et kvantemekanisk system vil vanligvis endre *tilstand* som følge av måleprosessen, og det er usikkert hvilken tilstand systemet endres til. Dette betyr ikke at vi ikke vet noe om systemet før måling. Istedenfor eksakt kunnskap om en partikkelen (for eksempel et elektron) sin posisjon til enhver tid, $x = x(t)$, som styres av Newtons andre lov, så *postuleres* det at man kan tilordne partikkelen en *bølgefunksjon* $\Psi(x, t)$. Dette vil være en kompleks funksjon² av posisjon og tid. Istedenfor å vite hvor partikkelen er ved tiden t , så må vi nøye oss med at bølgefunktjonen gir oss *sannsynligheten* for hvor

¹med ordet spredning” mener vi kollisjoner

²Altså med realdel og imaginærdel

vi finner partikkelen. Dette er spesifisert ved:

$$P(x, t)dx = \Psi^* \Psi dx = |\Psi|^2 dx \quad (3.1)$$

der $P(x, t)dx$ er sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x + dx$ ved tiden t . Det var den tyske fysikeren Max Born som kom med denne fortolkingen av den kvantemekaniske bølgefunksjonen i 1926.

La oss velge et tidspunkt, og kun se på den romlige delen av bølgefunksjonen, som vi betegner med $\psi(x)$. Om vi antar at partikkelen ikke kan forsvinne, så er sannsynligheten for å finne partikkelen et eller annet sted lik 1, altså

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1 \quad (3.2)$$

I figur 3.1 ser vi eksempler på $P(x)$ for mer eller mindre godt lokaliserte partikler (antar et fast tidspunkt, slik at vi utelater tiden i argumentet). I fig. 3.1 er partikkelen mest sannsynlig i posisjon $x = 1, 5$. Klassisk ville vi si at partikkelen befinner seg i $x = 1, 5$ med sannsynlighet 1. Dette svarer til en gaussfordeling i grensen $\sigma \rightarrow 0$. Altså sannsynlighetstetthet 0 overalt unntatt i $x = 1, 5$, der den er uendelig.³ Nedenfor skal vi se at det er grenser for hvor smal bølgefunksjonen kan være for en virkelig partikel. Usikkerheten i hvor man vil finne den ved måling, eller standardavviket i $P(x)$ kan ikke bli lik 0 i en fysisk realiserbar situasjon. Dette er jo i sterkt kontrast til Newtons deterministiske $x(t)$! Vi kan også beregne en vektet middelverdi, *forventningsverdien* av posisjonen;

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \quad (3.3)$$

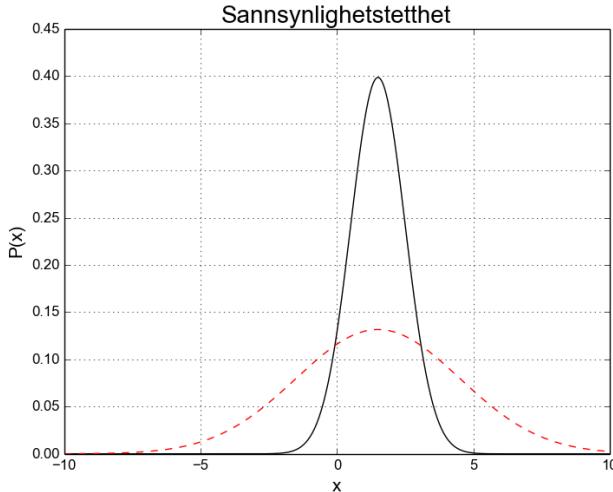
Slike middelverdier vil oppføre seg som de tilsvarende klassiske størrelser.

3.1 Partiklenes bølgenatur

Einstein foreslo at den fotoelektriske effekt kunne forklares ved anta at lys kunne beskrives som partikler, fotoner, med energi

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

³Gaussfordeling: $P(x; x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2})}$. I grensen $\sigma = 0$ skriver vi $P(x; x_0) = \delta(x_0 - x)$. Diracs deltafunksjon, $\delta(x_0 - x)$ har verdi 0 overalt unntatt i $x = x_0$ der den er uendelig. Deltafunksjonen er normert, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x_0 - x) dx = 1$.



Figur 3.1: Eksempel på sannsynlighetstetthetsfunksjoner, $P(x) = \psi^*\psi$, for å finne partikkel i posisjon x . Kurvene viser gaussfordelinger med størst sannsynlighet i $x = 1,5$, men med forskjellig standardavvik, h.h.v $\sigma = 1$ (heltrukket), og $\sigma = 3$ (stiplet).

der h er Plancks konstant og ν er frekvensen til lyset. I ligningen over er dette også omskrevet ved hjelp av relasjonen mellom bølgelengde, frekvens og forplantningshatighet (lyshastigheten): $c = \lambda\nu$. Fotonets bevegelsesmengde er gitt som $p = E/c = h/\lambda$.

Louis de Broglie foreslo at også partikler med masse kunne oppfattes som en bølge tilordnet en karakteristisk bølgelengde. Han foreslo $\lambda = \frac{h}{p}$, ligning 2.19, som diskutert forrige kapittel.

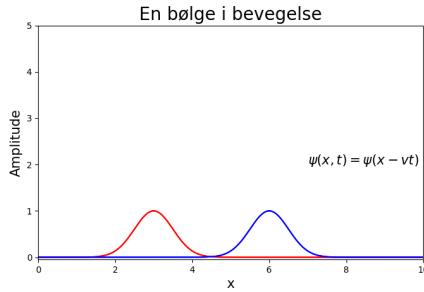
I det nedenstående innfører vi notasjonen $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, vinkelfrekvens, $\omega = 2\pi\nu$ og bølgetall $k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

3.1.1 Bølgefunktjoner og bølgepakker

Hvordan skal vi beskrive en slik partikkelsebølge med en bølgefunksjon? Karakteristisk for en bølge er at vi kan beskrive tidsutviklingen til amplituden av en bølge med en funksjon med følgende egenskap: $y(x, t) = y(x - vt)$, altså en funksjon der en fast bølgeform propagerer langs med x-aksen som funksjon av tiden. Figur 3.2 illustrerer dette.

Vi ser at denne funksjonen tilfredsstiller *bølgeligningen*:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad (3.4)$$



Figur 3.2: En bølgefunksjon som propagerer langs positiv x-akse med tiden. Funksjonen vises ved to forskjellige tidspunkt. Den forskyver seg med tiden, men endrer ikke form.

Det er lett å vise at sinus og cosinusfunksjoner kan være bølgefunksjoner. Men de strekker seg ut over hele rommet. For å beskrive et lokalisert elektron, så må det lages en vektfunksjon i rommet, slik at elektronbølgen ikke er overalt på en gang. Alle frekvenser for lysbølger i vakuum har samme fasehastigheten. Men i de fleste tilfeller så er fasehastigheten frekvensavhengig. Vi har dispersjon. For de-Broglie bølger er dispersjon nokså åpenbart: Endrer vi bølgelengde så endrer vi jo også bevegelsesmengde, og dermed hastighet. I praksis konstrueres en bølgepakke ved å sette sammen bølgeamplituder med mer enn en frekvens, og også multiplisere med en vektfunksjon. Figur 3.3 illustrerer dette. Det er altså alltid flere bølgelengder til stede i en kvantemekanisk bølgepakke. Men det går an å finne fram til en dominerende, karakteristisk bølgelengde, som svarer til de Broglies hypotese.

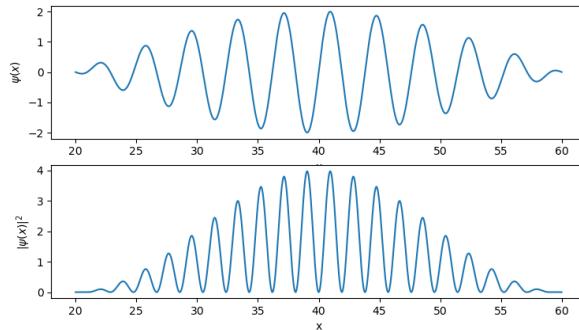
Den generelle bølgefunksjonen $f(x - vt)$ skrives gjerne om slik, om vi velger en sinusfunksjon for bølgen:

$$f(x, t) = A \sin(2\pi x/\lambda - 2\pi\nu t) = A \sin(kx - \omega t)$$

Fasehastigheten er altså $v_p = \lambda\nu = \omega/k$. Formalismen antar en bølgetallsavhengig vektfunksjon $A(k)$. Det også hensiktsmessig å skrive ned en mer generell bølge, på kompleks form. La oss først skrive den opp ved $t = 0$: Bølgefunksjonen med vektning av de forskjellige bølgetallene blir

$$f(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

$f(x, t)$ kalles den Fouriertransformerte av $A(k)$ (tiden er irrelevant akkurat her og vi kan velge $t = 0$). Det er utviklet masse matematikk for å håndtere slike uttrykk, såkalt Fourieranalyse. Fourieranalyse er en sentral del av den



Figur 3.3: Bølgepakke satt sammen av to litt ulike frekvenser, $\nu_0 = 0,25$ og $f_1 = \nu_0 + 0,1 \times \nu_0$. Amplitude og intensitet på et gitt tidspunkt som funksjon av posisjon. Man får en omhyllingskurve med frekvens lik $\nu_1 - \nu_0$. I kvantemekanikken tolkes $|\psi(x)|^2 dx$ som sannsynlighet for å finne partikkelen mellom posisjon x og $x + d(x)$

formelle kvantemekanikken også, og siden vi har $k = \hbar p$, så ser vi at $A(k)$ er en tetthetsfunksjon for bevegelsesmengde!

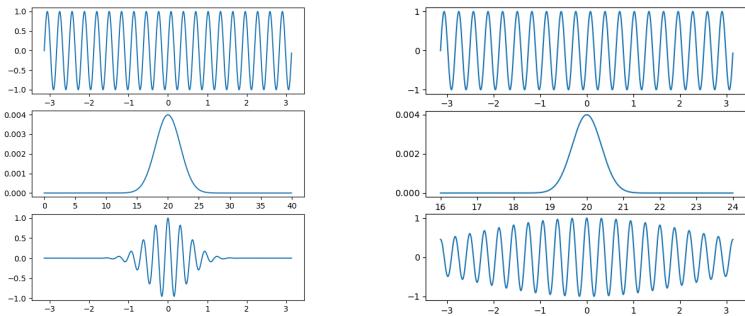
Vi skal ikke innføre mye av dette i denne boka, men vi ønsker å få fram hvordan en 'fri' bølgepakke ser ut. Hvis $A(k)$ er smal og sentrert rundt en verdi, k_0 , så vil bølgepakken spre seg ut over et stort område i rommet, mens hvis vi har pakken sprer seg utover i bølgetall, så vil den være konsentert i rommet. Bølgetallet er jo relatert til bevegelsesmengden ved $p = k/\hbar$. Dersom en bølgepakke har veldefinert bevegelsesmengde, så må den spre seg utover i rommet, mens motsatt - en bølgepakke som er konsentrert i rommet vil ha en større spredning i bevegelsesmengde. Fig. 3.4 illustrerer dette. I likhet med Heisenbergs usikkerhetsrelasjon for fotoner (se kap 2.2.4) kan dette formuleres for bølgepakkene også, og man kommer fram til at produktet $\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$.

Vi skal se at kvantemekaniske materiebølger også må bestå av mer enn bare en én hastighet. Omhyllingskurven til en bølgepakke kan man vise at flytter seg med en hastighet lik *gruppehastigheten*

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

3.1.2 Betraktninger rundt bølgefunksjonen.

Borns statistiske fortolkning har vært veldig utilfredsstillende for mange fysikere. Selv om alle sider ved en kvantemekanisk partikkel er kartlagt, sitter vi igjen med en ubestemhet om hvor vi vil finne den ved måling. La oss anta



Figur 3.4: Bølgepakker konstruert med gaussformet vektfunksjon med to forskjellige spredninger i bølgetall. Øverst vises det umodulerte bølgettoget med ett bølgetall ($k = 20$). Vi har tatt realdelen av planbølgen ($\text{Re } e^{ikx} = \cos kx$) ved $t = 0$ for utføre integralene eksplisitt (ett integral for hver posisjon langs x-aksen i rommet). Det fins mye programvare på markedet som kan gjennomføre slike fourierintegraler (f.eks. i 'scipy' og 'numpy'). Spredning i bølgetall er på h.h.v. 10 % og 2 % av senterverdien ($k = 20$).

at utfallet av en måling gir at partikkelen er i posisjon x_0 . Hvor var den rett før målingen?⁴

Vi kan være *realister*, og si at partikkelen faktisk *var* i x_0 . Men i så fall er kvantemekanikken ufullstendig, siden den ikke forteller oss dette med sikkerhet.

Bohr, Einstein og mange andre diskuterte dette heftig. Bohr lanserte den såkalte *København-fortolkningen* som sier at partikkelen faktisk ikke befant seg på noe spesielt sted før målingen. Det er *målingen* som gir partikkelen en bestemt posisjon. Dette er en oppfatning som kanskje er rådende blant fysikere, men ikke mer rådende enn at mange tar et agnostisk synspunkt og velger å kun forholde seg til målinger, uten å gi temaet ytterligere diskusjon. Uansett, så tilslir usikkerhetsrelasjonen at man ikke kan bestemme alle dynamiske egenskaper ved en partikkel på et gitt tidspunkt.

Men *er* et elektron en partikkel? Når vi har tilordnet elektronet en bølgefunksjon, så er det kanskje mer naturlig å si at det *er* en bølgepakke med masse på $511 \text{ keV}/c^2$. Man kan kanskje leve godt med det.

Det blir ytterligere problematisk når vi skal benytte kvantemekanikk på et *system* av flere partikler, for eksempel to elektroner. Da kan systemet prepareres på en slik måte at det initialet har en bestemt tilstand, for eksempel

⁴Deler av denne diskusjonen er sterkt preget av ref. [7]

et gitt totalt angulært moment (spinn). Totalspinn er bevart i tiden, så om vi mäter, i klassisk forstand, spinnet til *ett* av elektronene, så kjenner vi umiddelbart spinnet til det andre, uten måling.

Problemer oppstår fordi i kvantemekanikken er elektronspinnet *kvantisert*. Måleprosessen kan sies å *påvirke* elektronet på en måte som ikke kan forutsis med sikkerhet. Det er kun to mulige måleutfall, og elektronet antar den tilstand etter målingen som måleprosessen gir det. Den opprinnelige bølgefunksjonen sies å ha *kollapset*. Vi kan forhånds beregne sannsynligheten for et gitt utfall, men ikke forutsi utfallet av en enkelt måling. Men spinnbevaring gjelder også i kvantemekanikken, så når dette utfallet er målt, så vil det andre elektronet *alltid* anta en tilstand i tråd med bevaring av totalspinn, som om måling av det *første* elektronet har påvirket det *andre*. Det er disse korrelasjonseffektene som ble påpekt av Einstein, Podolsky og Rosen, det såkalte EPR-paradokset. Istedentfor korrelasjoner på grunn av bevaring av angulært moment, diskuterte de korrelasjoner som følge av bevaring av bevegelsesmengde i den opprinnelige artikkelen. EPR-paradokset er omtalt i litt mer detalj i kapittel 4.3

3.2 Schrödingerligningen

3.2.1 Fri partikkel

Schrödingers forslag for tidsutviklingen av materiebølgen til en fri partikkel er⁵

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (3.5)$$

En løsning er:

$$\Psi(x, t) = K[\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)] = K e^{i(kx - \omega t)} \quad (3.6)$$

Her er K en konstant som skal sørge for at normeringsintegralet, ligning 3.2, gjelder⁶. På grunn av at tidsavhengigheten multipliseres med den imaginære i , og deriveres bare en gang, må den kvantemekaniske frie bølge være *kompleks*! Men den er også løsning av den klassiske bølgeligningen 3.4.

Fasehastigheten til bølgen er $v_f = \omega/k$. Vi ser at $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = k^2 \Psi$ og $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi$, slik at ligningen krever

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

⁵Man kan se diskusjoner for å motivere detet forslaget i lærebøkene, f.eks. i kapittel 40 i Young and Freedman: "University Physics"

⁶Akkurat denne bølgefunksjonen kan faktisk ikke normeres for den strekker seg utover hele x-aksen!!

Dette er jo nettopp $E = \hbar\omega$ dersom vi identifiserer $\hbar^2 k^2$ med bevegelsesmengde, altså setter $p^2 = (\hbar k)^2$. Ligning 3.5 er den tidsavhengige Schrödingerligningen for en fri partikkel. Når vi setter inn bevegelsesmengde og energi istedenfor bølgetall og vinkelfrekvens, ser vi at løsningen skrives:

$$\Psi(x, t) = K e^{i(px - Et)/\hbar} \quad (3.7)$$

Her kan vi observere effekten av en operator for bevegelsesmengde som defineres slik

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Denne gir nemlig bevegelsesmengden til den frie bølgen!

$$\hat{p}\Psi(x, t) = p\Psi(x, t)$$

For å relatere til hastighet, så benytter vi de ikke-relativistiske uttrykkene, $p = mv$ og $E = \frac{1}{2}mv^2$. Da blir fasenhastigheten av bølgen $\omega/k = E/p = v/2!$

Men om man vil snakke om en lokalisiert bølgepakke, så må man definere en størrelse kalt gruppehastigheten. Bølgepakken vil måtte inneholde flere frekvenser, og ifølge teorien om bølger vil gruppehastigheten være gitt slik:

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{dE}{mdv} = v$$

Her her altså hastigheten slik som vi bør kunne forvente. Kvantemekanikken *postulerer* at en måling av bevegelsesmengde skal svare til anvendelse av en *operator* for dette definert som $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ på bølgefunksjonen. Som med posisjon, så kan utfallet av en bevegelsesmengdemåling på partikler som har identisk bølgefunksjon anta mange forskjellige verdier. Men middelverdien (eller forventningsverdien) av målingene vil være godt definert:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(-i\hbar) \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$$

når bølgefunksjonen er normert.

Løsningen vi har skissert over, $\Psi(x, t) = K e^{i(kx - \omega t)}$, har en skarp bevegelsesmengde p . En slik løsning er en *egenfunksjon*, med tilhørende *egenverdi*. Løsningen med skarp bevegelsesmengde en bølgefunksjon som brer seg ut over hele rommet med samme amplitude. Usikkerheten, Δx , i hvor man vil finne partikkelen ved måling er uendelig stor. Dette er ikke fysisk mulig: Bølgefunksjoner må kunne normeres ved ligning 2. Når det gjelder hvor godt man kan bestemme posisjon og bevegelsesmengde, så vil Heisenbergs usikkerhetsrelasjon gjelde. Den sier at

$$\Delta p \Delta x > \hbar/2 \quad (3.8)$$

Man kan ikke samtidig skarpt bestemme en partikkels posisjon og hastighet! Planbølge-løsningene vi har funnet er likevel svært nyttige, for vi kan alltid skrive den romlige bølgefunksjonen som en sum, eller et integral, over plane bølger med forskjellig frekvens og amplitud. I praksis svarer utvikling etter disse funksjonene til en Fourieranalyse av bølgefunksjonen.

3.2.2 Schrödingerligningen for en partikkel bundet i et potensial

Som kjent så kan en partikkels totale energi skrives som summen av kinetisk og potensiell energi

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (3.9)$$

og er en bevart størrelse. $V(x)$ betegner potensiell energi i posisjon x , for eksempel til et elektron i nærheten av en atomkjernen. Med postulatet om at systemer skal beskrives ved hjelp av en bølgefunksjon, og at måling av bevegelsesmengde skal skje ved bruk av operatoren $\hat{p} = -i\hbar d/dx$, så blir $p^2 = -\hbar^2 d^2/dx^2$; så skal mulige energitilstander bare være de som tilfredsstiller ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (3.10)$$

der E er en konstant, energien til f.eks. et elektron bundet til et proton. Måling av energi svarer til anvendelse av *Hamiltonoperatoren* på bølgefunksjonen:

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right]$$

Vi kan skrive ligning 3.10 slik:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

Vi har her et øyeblikk sett bort fra tidsavhengigheten, slik vi finner for den frie bølge (ligning 3.5). Siden atomer er stabile i tid, så har vi god grunn til å søke etter tidsuavhengige bølgefunksjoner, og mesteparten av kvantemekanikken i dette kurset handler om å løse ligning 3.10!

Men utgangspunktet er en bølge i bevegelse, så ser den generelle Schrödinger-ligningen slik ut

$$\hat{H}\Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t} \quad (3.11)$$

3.2.3 Tidsutvikling

Ligning 3.11 styrer tidsutviklingen av bølgefunktjonen. Dette er en første ordens differensiell ligning i tiden. For å få noe fornuftig ut av denne ligningen, så løser vi den med *separasjon av variable*. Vi skriver

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$$

Ligning 3.11 blir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\phi(t) + V(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar\psi(x)\frac{d\phi}{dt}$$

Vi deler begge sider med $\psi(x)\phi(t)$, (og endrer notasjon for derivert):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} + V(x) = i\hbar \frac{\phi'}{\phi} = E$$

Venstre side avhenger ikke av tiden, og høyre side avhenger ikke av posisjon. Variabelen E må dermed være konstant i tid og rom, *separasjonskonstanten*. Schrödingerligningen er redusert til to to uavhengige ligninger, den tidsuavhengige ligningen 3.10; og ligningen

$$i\hbar \frac{d\phi}{dt} = E\phi \quad (3.12)$$

Denne har løsning

$$\phi(t) = \phi(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

slik at tidsutviklingen av en bølgefunktjonen som løser ligning 3.10 kan skrives

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Dette kalles en *stasjonær* tilstand. Sansynlighetstettheten, $P(x)$ er konstant i tiden.⁷

$$P(x, t) = \psi^*(x)e^{i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi^*(x)\psi(x) = P(x, 0)$$

altså konstant i tiden, siden produktet av tidsfaktorene blir tidsuavhengig lik 1. Om et system er preparert i en egentilstand for energi så er det altså dømt til å forbli der til evig tid! Når dette er den laveste energitilstanden, *grunntilstanden*, så kan dette være riktig. Men løsninger med høyere energi må kalles kvasistabile, svarende til situasjoner med ustabil likevekt i mekanikken (f.eks. en stiv pendel som står balanserer med loddet rett oppover).

⁷Sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x + dx$ er $P(x)dx$

Det vil alltid være perturbasjoner som forårsaker overganger mellom energinivåene. I alminnelighet må vi skrive

$$\Psi(x, t) = \sum a_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \quad (3.13)$$

der summen går over de mulige energitilstander. a_n er sannsynlighetsamplitude for tilstand ψ_n . Sannsynligheten for at en måling finner partikkelen i denne tilstanden er $|a_n|^2 = |a_n^* a_n|$.

For å finne tidsutviklingen av denne blandingen av tilstander så summerer vi amplituder før vi kvadrerer. Da oppstår tidsavhengige kryssledd ledd med faktorer av typen $\sin(\frac{E_n - E_m}{\hbar} t)$ i $P(x, t)$, altså overganger mellom energinivåene. Vi skal se på et eksempel senere, men først skal vi gå igjennom noen viktige løsninger av den tidsuavhengige SL.

3.3 Løsninger av Schrödingerligningen

3.3.1 Krav til bølgefunksjonen

Den tidsuavhengige Schrödingerligningen, ligning 3.10, er en annenordens differensielligning. Dette betyr at bølgefunksjonen må kunne deriveres to ganger. Dermed må bølgefunksjonen og dens deriverte være kontinuerlige i områder der den dobbeltderiverte er definert. Men i områder der potensialet brått skifter til å bli uendelig så trenger ikke den deriverte å være kontinuerlig. Man kan sette sammen bølgefunksjonen i forskjellige områder ved å lage et potensial satt sammen av konstante nivåer, og bruke kravene til bølgefunksjonen til å lappe sammen løsninger til en kontinuerlig bølgefunksjon.

3.3.2 Partikkel i boks

Det enkleste problemet framkommer når vi krever at partikkelen skal befinne seg i en boks med uendelig høye vegger. Vi definerer.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \leq x \leq L \\ \infty & x < 0 \text{ og } x > L \end{cases} \quad (3.14)$$

Der potensialet er null blir Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi = k^2\psi \quad (3.15)$$

eller

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi$$

der vi har satt $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Denne ligningen er den samme som for en klassisk harmonisk oscillator. Den dobbeltderiverte er lik minus seg selv. Den generelle løsningen er

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (3.16)$$

Partikkelen kan ikke befinner seg der potensialet er uendelig høyt. Så vi må ha $\psi(x) = 0$ for $x < 0$ og $x > L$. Men ψ må være kontinuerlig overalt. For å få til dette må vi ha $\psi(0) = 0$ og $\psi(L) = 0$. Siden $\cos 0 = 1$, så må vi sette $B = 0$. A lik null gir ikke en meningsfylt bølgefunksjon. Men $\sin kL = 0$ for $kL = n\pi$ med $n = 1, 2, 3, \dots$. Dermed har vi

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

Normeringsintegralet er $|A|^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx = 1$. For å se dette observerer vi at $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$ I intervallet fra 0 til L gjennomløper x minst en halv periode så

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx = \frac{1}{2} |A|^2 \int_0^L (\sin^2 \frac{n\pi}{L} x + \cos^2 \frac{n\pi}{L} x) dx = \frac{1}{2} |A|^2 \int_0^L dx = |A|^2 \frac{L}{2}$$

Vi setter $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$ for å få $|A|^2 \frac{L}{2} = 1$

De normerte bølgefunksjonene blir dermed:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

PARTIKKEL I BOKS MED LENGDE L

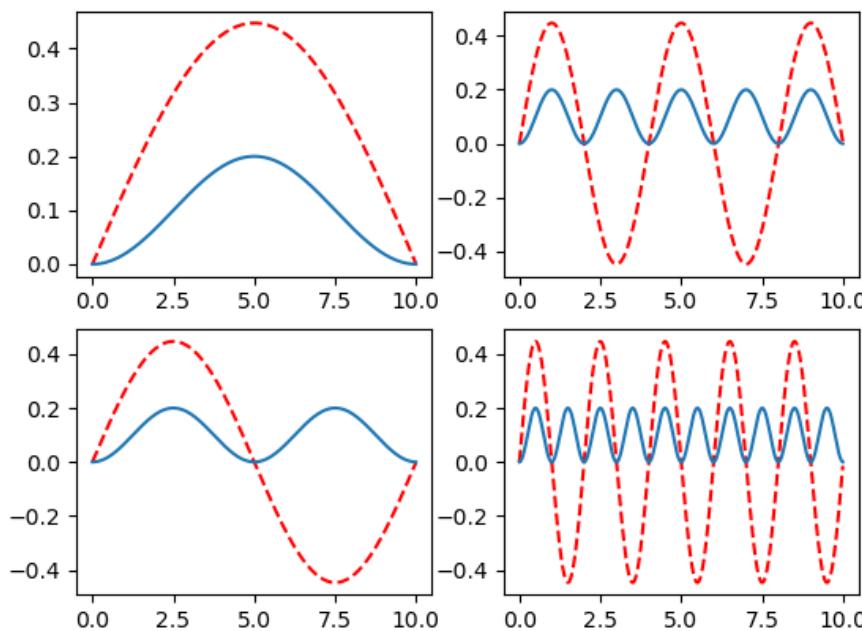
Bølgefunksjoner:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.17)$$

Energier:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (3.18)$$

Figur 3.5 viser noen bølgefunksjoner og sannsynlighetstettheter. Det er interessant å studere løsningene og energiene i mer detalj. *Laveste energinivå*



Figur 3.5: Bølgefunksjoner (stiplet rød linje) og sannsynlighetstettheter (blå, heltrukken linje) for partikkelen i boks av lengde 10, med $n = 1, 2, 5$ og 10. Den klassiske sannsynlighetstetten for hvor partikkelen befinner seg er konstant lik $1/L$

er ikke null!. Dette gjelder alment i kvantemekanikken: Energien til en partikkelen i en potensialbrønn er alltid høyere enn bunnpunktet i den potensielle energi. Partikkelen vil alltid ha litt kinetisk energi.

$\psi(x)$ gir sannsynlighetsapplituden for å finne partikkelen i x , men hva er usikkerheten i anslaget? Ved gjentatte målinger, får vi forskjellige resultat. Vi ønsker å kvantisere spredningen, d.v.s. finne standardavviket av målingene. Vi kan beregne middelverdien og standardavviket av middelverdien. Middelverdien er

$$\bar{x} = \int_0^L \psi^* x \psi dx = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{L}{2}$$

Dette er helt rimelig siden potensialet er symmetrisk rundt $\frac{L}{2}$. Standardavviket er det midlere avviket fra middelverdien. Positivt og negativt avvik skal regnes med, så det er bedre å beregne avviket kvadrert.

$$\overline{x^2} = \int_0^L \psi^* x^2 \psi dx = \frac{2}{L} \int_0^L x^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{L^2}{3} \left(1 - \frac{3}{2n^2\pi^2} \right)$$

For å beregne dette integralet kan man sette $\sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x)$ og delvis integrasjon. Men vi er interessert i variansen (kvadratet av standardavviket) $\overline{(x - \bar{x})^2}$. Vi kan forenkle litt:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 P(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 P(x) dx - \int_{-\infty}^{\infty} 2x\bar{x}P(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \bar{x}^2 P(x) dx \\ &= \overline{x^2} - 2\bar{x}\overline{x^2} + \overline{x^2} \\ &= \overline{x^2} - \overline{x}^2 \end{aligned}$$

For store n går dermed variansen for posisjonen mot

$$(\Delta x)^2 = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4} \right) = \frac{L^2}{12}$$

Vi kan se på bølgefunksjonen inni boksen som sammensatt av to frie bølger som beveger seg hver sin vei, idet

$$\sin \frac{n\pi\hbar x}{L} = \frac{1}{2i} \left(e^{i\frac{n\pi\hbar}{L}x} - e^{-i\frac{n\pi\hbar}{L}x} \right)$$

bevegelsesmengdene er $p_+ = \frac{n\pi\hbar}{L}$ og $p_- = -\frac{n\pi\hbar}{L}$. Om vi sier at usikkerheten i bevegelsesmengde er lik halvparten av forskjellen så får vi

$$\Delta p = \frac{1}{2}(p_+ - p_-) = \frac{n\pi\hbar}{L}$$

Den laveste verdien av Δx og Δp har vi for grunntilstanden $n = 1$. Da har vi

$$\Delta p \Delta x = \frac{\pi \hbar}{L} L \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}} = 0,56\hbar$$

Så usikkerhetsrelasjonen er oppfylt.

3.3.3 Potensialbarrièrø og tunnelleffekt

Den komplekse plane bølgen ligning 3.6 $\Psi(x, t) = K e^{i(kx - \omega t)}$ kan representere en fri partikkell - eller kanskje heller en strøm av frie partikler - som beveger seg mot høyre. Om vi skifter fortegnet foran bølgetallet, k , får vi en bølge som beveger seg mot venstre. Vi skal diskutere en situasjon der vi tenker oss en jevn strøm av partikler, slik at vi ikke trenger å tenke på tidsavhengigheten. Hva skjer når en slik strøm av partikler med kinetisk energi, E , treffer en potensialbarrièrø som antydet i fig 3.6?

Vi ønsker å finne ut hvor stor del av strømmen som reflekteres tilbake der den kom fra. Man kan vise at problemet kan løses ved å studere den tidsuavhengige bølgefunksjonen for partiklene.

La oss anta at energien er E og at høyden på barrièren er $V > E$. Klassisk sett vil ingen av partiklene kunne trenge igjennom barrièren, fordi de ikke har energi nok. Kvantemekanisk skal vi se at det er en viss sannsynlighet for gjennomtrengning, uten tap av energi! Det er dette som kalles tunnelleffekten. Schrödingerligningen er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

for $x < 0$ og $x > L$. Vi setter $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ og antar at litt av strømmen kan reflekteres på barrièren, slik at løsningen for $x < 0$ skrives

$$\psi_V = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

S.L. er

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V)\psi$$

for $0 \leq x \leq L$. Her er løsningen eksponentialfunksjoner

$$\psi_M = C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}$$

Her er $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ Det som slipper igjennom barrièren må bevege seg mot høyre, så her er

$$\psi_H = F e^{ikx}$$

Legg merke til at energien er den samme i område $x > L$ som for $x < 0$. Hvor mye reflekteres, og hvor mye transmitteres? Dette krever beregning av refleksjonssannsynlighet $R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$ og transmisjonssannsynlighet $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$. I det følgende skal vi gjøre noen forenklinger. Men det forenkla resultatet vil gi oss god forståelse for den formelen for tunnelering som gjerne benyttes i numeriske beregninger. Vi kan like gjerne sette $A = 1$. For å bestemme de fire konstantene, B, C, D og F kan vi bruke kravene om at bølgefunksjonen er kontinuerlig, og har kontinuerlig derivert i $\psi(0)$ og $\psi(L)$. La oss også anta at komponenten som gir voksende bølgefunksjon i området $0 < x < L$ bidrar så lite at vi kan se bort fra det, altså $C = 0$. Kontinuerlig bølgefunksjon gir

$$1 + B = D$$

$$De^{-\kappa L} = Fe^{ikL}$$

og kontinuerlig derivert

$$ik(1 - B) = -\kappa D$$

$$-\kappa De^{-\kappa L} = ikFe^{ikL}$$

Vi er interessert i forholdet mellom refleksjons og transmisjonssannsynlighet, og eliminerer derfor D . Da står vi igjen med

$$1 + B = Fe^{ikL}e^{\kappa L}$$

fra de to første ligningene, og

$$1 - B = Fe^{ikL}e^{\kappa L}$$

fra de to siste. Vi kan multiplisere ligningene og få:

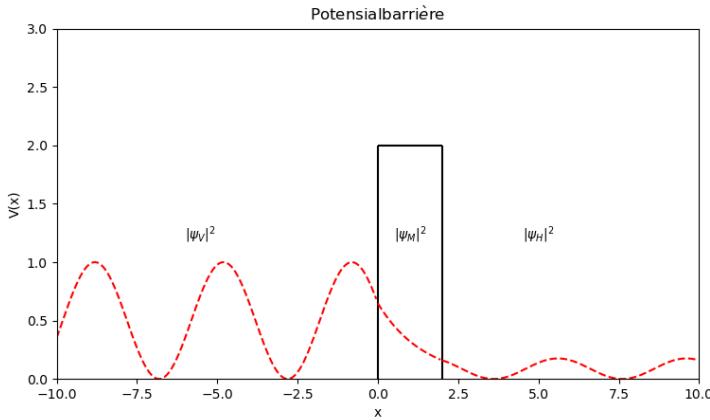
$$1 - B^2 = F^2 e^{2ikL} e^{2\kappa L}$$

Den komplekse bølgefaktoren e^{ikL} har modulo 1. Om vi antar faktoren $e^{2\kappa L} \gg 1$, så er det ikke urimelig å erstatte den med 1. Da har vi fått fram at

$$\frac{F^2}{1 - B^2} = e^{-2\kappa L}$$

Denne formelen viser det vesentlige ang. tunnellering gjennom potensialbarrierer, nemlig dempningsfaktoren $e^{-2\kappa L}$.

En 'skikkelig' utledning vil finne refleksjonssannsynlighet $R = BB^*$ og transmisjonssannsynlighet $T = 1 - R = FF^*$ uten å sette $C = 0$ i utgangspunktet. Lærebøker gjengir gjerne en tilnærmet transmisjonssannsynlighet gitt som ligning 3.19



Figur 3.6: Sannsynlighetstetthet for en strøm av partikler som kommer mot høyre og treffer en potensialbarriere, som et øyeblikksbilde med en statisk bølgefunksjon

TUNNELEFFEKT

Transmisjonskoeffisient, sannsynlighet for at en partikkell slipper igjenom en barriere:

$$T = Ge^{-2\kappa L} \quad (3.19)$$

$$G = 16 \frac{E}{V} \left(1 - \frac{E}{V}\right) \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$$

Naturlig nok blir κ mindre når E nærmer seg høyden på barrièren, slik at T øker, mens T minker når lengden av barrièren øker.

Tunnelleffekten trengs for å kunne forklare en del kjernefysiske prosesser, som α -henfall og hypogheten av noen av fusjonsprosessene som forklarer hvorfor sola skinner. Det fins også elektroniske komponenter som gjør bruk av tunnell-effekten, for eksempel tunnell-dioder. En relativt ny oppfinnelse er en type mikroskop kalt 'Scanning Tunneling Microscope'. Her kan overflater studeres ved å måle endring i tunnellstrøm som kan settes opp mellom en probenål og overflaten. Man oppnår en oppløsningsevne på omtrent 10 pm for avstanden mellom nål og overflate.

3.3.4 Harmonisk oscillator

Harmonisk oscillatorpotensialet forekommer i mange problemer, og kan brukes som tilnærming til enda flere. Ofte ønsker man å beskrive hva som skjer med en partikkell stabilt bundet i et potensial når den utsettes for små

påvirkninger. Om man tenker seg å tilnærme potensialet rundt likevektspunktet med en rekkeutvikling så ser det slik ut:

$$V(x - x_0) = V(x_0) + \frac{dV}{dx}(x - x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx^2}(x - x_0)^2 + \dots$$

Det lineære leddet gir ikke noe bundet system, og dermed blir det kvadratiske leddet den første meningsfylte tilnærmingen. Vi kjenner til H.O. potensialet fra en rekke problemer i klassisk fysikk, for eksempel *Hooke's lov* for kraften på en masse som henger i en utstrakt fjær.

$$F = -kx = ma$$

som gir en svingeligning for massens posisjon, med løsning

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$$

med $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. Videre er den potensielle energi til massen i en strukket fjær gitt som:

$$\int_0^x F(x') dx' = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (3.20)$$

Schrödingerligningen (S.L.) blir dermed

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (3.21)$$

Denne kan løses eksakt ved algebraiske metoder.

Vi skal gå igjennom dette her. Vi innfører *stigeoperatorer*

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \pm im\omega x \right)$$

Vi vil skrive S.L. ved hjelp av disse to operatorene. La oss se på effekten av $\hat{a}_-\hat{a}_+\psi(x)$:

$$\begin{aligned} \hat{a}_-\hat{a}_+\psi(x) &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \psi(x) \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} + im\omega x\psi(x) \right) \\ &= \frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} + \hbar m\omega \frac{d}{dx}(x\psi) - \hbar m\omega x \frac{d\psi}{dx} + (m\omega x)^2 \psi \right) \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + \hbar m\omega + (m\omega x)^2 \right] \psi(x) \end{aligned}$$

Vi kan konkludere at

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + (m\omega x)^2 \right] + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Videre kan vi på samme måte vise at

$$\hat{a}_+ \hat{a}_- = \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + (m\omega x)^2 \right] - \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Dermed er S.L.:

$$(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega)\psi = E\psi \quad (3.22)$$

Legg også merke til at vi har

$$(\hat{a}_- \hat{a}_+ - \hat{a}_+ \hat{a}_-) \psi = \hbar\omega\psi$$

Rekkefølgen på anvendelse av stigeoperatorene kan altså ikke endres vilkårlig.

Påstand: Hvis ψ_n tilfredsstiller S.L. med egenverdi E_n , så løser funksjonen $\psi_{n+1} = \hat{a}_+ \psi_n$ S.L. med egenverdi $E_n + \hbar\omega$

Bevis:

$$\begin{aligned} (\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega)(\hat{a}_+ \psi_n) &= (\hat{a}_+ \hat{a}_- \hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hbar\omega \hat{a}_+) \psi_n \\ &= \hat{a}_+ (\hat{a}_- \hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hbar\omega) \psi_n \\ &= \hat{a}_+ (\hat{a}_+ \hat{a}_- + \hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega) \psi_n \\ &= \hat{a}_+ (\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega) \psi_n \\ &= \hat{a}_+ (E\psi + \hbar\omega) \psi_n \\ &= (E + \hbar\omega) (\hat{a}_+ \psi_n) \end{aligned}$$

Vi kan vise at $\hat{a}_- \psi$ har egenverdi $E - \hbar\omega$ på samme måte. Hvis vi kjenner en egenverdi med bølgefunktjon, så kan vi generere alle de andre som ligger med avstand $\hbar\omega$ fra hverandre, ved å bruke stigeoperatorene. Man kan på generelt grunnlag vise at ingen energinivåer kan være lavere enn den minste verdien av den potensielle energien, i dette tilfelle null. Derfor må anvendelse av \hat{a}_- mange nok ganger føre til at vi ender opp uten ny bølgefunktjon, eller en bølgefunktjon identisk lik 0.

$$\hat{a}_- \psi_0 = 0$$

Med andre ord:

$$\frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi_0}{dx} - im\omega x \psi_0 \right) = 0$$

Dette lar seg løse!

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

Vi ordner og integrerer:

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx$$

eller

$$\ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + C$$

Vi får

$$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

der A'_0 er en normeringskonstant.

Bølgefunktjonen til grunntilstanden er altså en normalfordeling⁸ med standardavvik $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Normering gir $A_0 = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}$

Hva er energien i grunntilstanden? Den finner vi ved innsetting av ψ_0 i S.L. (ligning 3.21). Grunntilstandsenergien blir:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Sjekk resultatet! Samtidig får du verifisert at ψ_0 virkelig er en løsning av S.L.

For å finne energiene til høyereleggende tilstanden med merkelapp n trenger vi nå bare å benytte heveoperatoren, a^+ n ganger, altså:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

Bølgefunktjonene finnes på samme måte:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} A_n (\hat{a}_+)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

der A_n er en normeringskonstant. For hver gang den anvendes vil derivasjonsoperatoren \hat{a}_+ gi et førstegradspolynom i x multiplisert med en konstant; som skal multipliseres med den gamle bølgefunktjonen. Vi observerer at

$$\hat{a}_+ e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = (i\sqrt{2m\omega})x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Dermed ser vi at polynomet som skal multipliseres med gaussfunksjonen er av grad n for bølgefunktjon $\psi_n(x)$. For å skrive ned et unverselt uttrykk med korrekt normering innfører man en dimensjonsløs variabel $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$, og da kan vi oppsummere:

⁸ $G(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$

HARMONISK OSCILLATOR

Bølgefunksjonene til den harmoniske oscillator er

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.23)$$

Her er $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$ og $H_n(\xi)$ et polynom av grad n som kalles for et Hermitepolynom. De første Hermitepolynomene er :

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 \\ H_1 &= 2\xi \\ H_2 &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3 &= 8\xi^3 - 12\xi \end{aligned}$$

Egenverdiene er:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (3.24)$$

Ettersom H.O. potensialet er symmetrisk om null, så bør sannsynligheten, $P(x)dx = |\psi(x)|^2dx$ også være symmetrisk om null. Hermitepolynomene er vekselvis symmetriske (for like n) og antisymmetriske (for odde n) om $x = 0$, og sikrer dette. Man kan også bekrefte at bølgefunksjonene er *ortogonale*:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx = \delta_{n,m}$$

Figur 3.7 viser bølgefunksjoner og sannsynlighetsfordelinger for noen verdier av n .

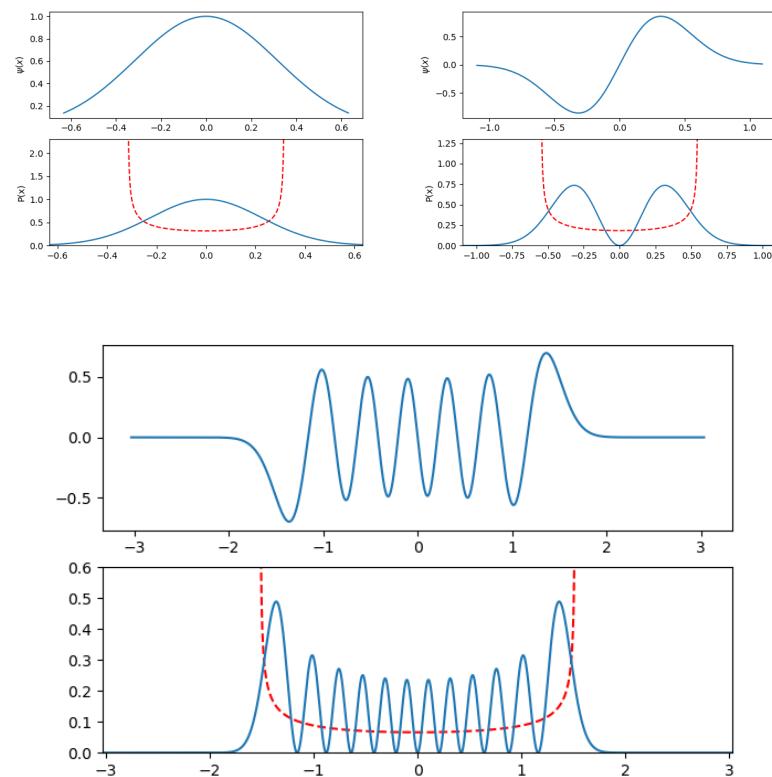
3.3.5 Deltafunksjon-potensialet

Vi tar med løsningen for et potensial som er slik

$$V(x) = -\alpha\delta(x)$$

Det er lik null overalt bortsett fra i $x = 0$ hvor $V(x) = -\infty$. δ -funksjonen er definert slik at integralet er endelig, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$. Bundne løsninger har energi mindre enn 0 så vi har

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -E\psi$$



Figur 3.7: Bølgefunksjoner for partikkelen i harmonisk oscillator, for $n=0,1$, og 11. Øverste delfigur er bølgefunksjonen, mens nederste delfigur er sannsynlighetstetthet. Den stiplete linja antyder klassisk sannsynlighetstetthet for partikkelen (ikke normert). Skalaen på x -aksen er slik at $m=1$ $\hbar=1$. $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ med $\omega = 10$.

for $x \neq 0$, om vi velger positivt fortegn på E. Da er løsningen

$$\psi = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

med $\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. ψ må være normert, kontinuerlig og deriverbar overalt bortsett fra i $x = 0$. For $x < 0$ er $\psi(x) = Ce^{\kappa x}$ og $\psi(x)' = \kappa Ce^{\kappa x}$, mens vi har $\psi(x) = e^{-\kappa x}$ og $\psi(x)' = -\kappa De^{-\kappa x}$ for $x > 0$. Siden ψ er kontinuerlig så har vi $C = D$. Det er et sprang i den deriverte i $x = 0$. Der har vi nemlig

$$\psi'_x - \psi'_- = 2\kappa.$$

Vi kan finne ψ' ved å integrere S.L. en gang

$$\int -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = -E \int -\alpha\delta(x)\psi dx.$$

Integranden $\delta(x)\psi(x) = 0$ overalt bortsett fra i $x = 0$ så vi har

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'_x - \psi'_-) = -\alpha$$

Dermed får vi

$$E = \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2}$$

Vi har valgt $E < 0$ så vi har altså kun en bundet tilstand. Dette potensialet kan brukes til å tilnærme Coulombpotensialet i noen tilfeller; og vi skal bruke resultatet i kap. 8

3.4 Kvantemekanikkens postulater

Kvantemekanikkens grunnlag kan formaliseres med fire postulater, som noe forenklet kan skrives slik:

A Et system (eller en partikkel) beskrives ved hjelp av en bølgefunksjon, ψ , som i alminnelighet er kompleks. Denne er normert ved:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$$

Kommentar: Når bølgefunktjonen, $\psi(x)$ beskriver posisjonen til en partikkel så gir $P(x)dx = \psi^* \psi dx$ sannsynligheten for at partikkelen befinner seg mellom x og $x+dx$. 'Kvadratet', når vi skriver rette parenteser er definert slik: $|\psi(x)|^2 \equiv \psi^*(x)\psi(x)$.

- B Måling av partikkelenes posisjon og impuls svarer til anvendelse av operatorene $\hat{x} = x$ og $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ på bølgefunksjonen.

Kommentar: Det er dette postulatet som gjør at den klassiske bevaringsloven for energi (kalt Hamiltonfunksjonen)

$$H = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p = E_{tot}$$

blir til den tidsuavhengige Schrödingerligningen:

$$\hat{H}\psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + E_p \right) \psi = \left(-\frac{\hbar^2 d^2}{2mdx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi$$

- C Målingen av en dynamisk størrelse (posisjon, bevegelsesmengde, energi, dreiebevegelsesmengde, egenspinn...), F , til systemet vil resultere i en reell egenverdi, f_n , gitt som løsningen ψ_n som gir $\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$. Den fundne løsningen kalles en egenfunksjon ψ_n for systemet. Etter måling befinner systemet seg i tilstand ψ_n . Sannsynligheten for denne tilstanden vil være $|\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi dx|^2$

- D Tidsutviklingen av et system beskrives ved hjelp av den tidsavhengige Schrödinger-ligningen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

Kommentar: for å bruke ligningen i praksis må man uttrykke Ψ ved energiløsninger (fra postulat B). Om vi har $\Psi(x, 0) = \sum a_n \psi_n(x)$ så vil vi få

$$\Psi(x, t) = \sum a_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Kommentarer

Vi kan finne forventningsverdien for F ved

$$\langle F \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\hat{F}\psi) dx$$

Om man har funnet alle egenfunksjonene for \hat{F} så kan man alltid skrive ψ som en sum over disse:

$$\psi = \sum a_n \psi_n \quad (3.25)$$

Her er koeffisientene a_n sannsynlighetsamplitudene.

Den adjungerte bølgefunksjonen er $\psi^* = \sum a_n^* \psi_n^*$. Både ψ og ψ_n kan normeres ved ligning 2. Egenfunksjoner med forskjellige egenverdier er alltid *ortogonale*,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)^* \psi_m(x) dx = 0 \quad (3.26)$$

når $m \neq n$. Vi skal ikke bevise dette her.

Men vi ser at ligning 3.25 og 3.26 fører til:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx \equiv 1 = \sum a_n^* a_n = 1$$

Ved måling av størrelsen F blir sannsynligheten for utfall f_n gitt som $P_n = a_n^* a_n \equiv |a_n|^2$. Forventningsverdien for F blir dermed

$$\langle F \rangle = \sum f_n |a_n|^2$$

Dirac formulerte kvantemekanikken ved hjelp av konsepter fra lineær algebra.

Dette er idag den vanlige formalismen for studier av kvantemekanikk, og kommer med en egen 'bra - ket' notasjon. Vi bruker ikke denne formalismen i denne boka, men har likevel laget et appendiks om det, se vedlegg C.

3.5 Tidsutvikling av system med to energinivåer

Elektroner, og mange atomkjerner, har halvtallig egenspinn. Vi skal komme tilbake til dette i mer detalj senere i seksjon 4.2.5. Det halvtallige spinnet medfører at det fins to rotasjonstilstander for egenspinnet, 'spinn opp', og 'spinn ned' langs en valgt kvantiseringsakse for målinger. Vi kan kalle dette for tilstand ψ_1 og ψ_2 . De må være ortonormerte. Det går an å sette disse kjernene i et magnetfelt som er formet slik at det blir to mulige energier for atomkjernene, men at de tilhørende energitilstandene ikke faller sammen med ψ_1 og ψ_2 . Vi må skrive at disse tilstandene er en blanding av energitilstandene, $\psi_1 = a\psi_{E_1} + b\psi_{E_2}$. Normering gir $a^*a + b^*b = 1$. Vi skriver $\psi_2 = c\psi_{E_1} + d\psi_{E_2}$, og krever ortogonalitet til ψ_1

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \psi_1 dx = c^*a + d^*b = 0$$

Vi kan oppnå dette ved å velge alle konstanter reelle, og $c = a$ samt $d = -b$. Dermed har vi altså $\psi_2 = a\psi_{E_1} - b\psi_{E_2}$. Hvis en atomkjerne er i tilstand ψ_1

ved $t = 0$, hva er sannsynligheten for å finne det i tilstand ψ_2 ved et senere tidspunkt? Tidsutviklingen av tilstanden gir:

$$\Psi_1(t) = a\psi_{E_1}e^{\frac{-i}{\hbar}E_1t} + b\psi_{E_2}e^{\frac{-i}{\hbar}E_2t}$$

og dermed:

$$P_{12}(t) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \Psi_1 dx \right|^2 \quad (3.27)$$

Vi må huske definisjonen av dette 'kvadratet', nemlig at den størrelsen multipliseres med sin kompleks konjugerte for å gi en reell sannsynlighet. Vi skriver det ut:

$$P_{12}(t) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \Psi_1^* dx \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \Psi_1 dx \right)$$

Vi setter inn og benytter ortonormeringen og får

$$\begin{aligned} P_{12} &= (a^2 e^{\frac{i}{\hbar}E_1 t} - b^2 e^{\frac{i}{\hbar}E_2 t})(a^2 e^{\frac{-i}{\hbar}E_1 t} - b^2 e^{\frac{-i}{\hbar}E_2 t}) \\ &= a^4 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_1)t} - a^2 b^2 \left(e^{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t} + e^{\frac{-i}{\hbar}(E_1 - E_2)t} \right) + b^4 e^{\frac{i}{\hbar}(E_2 - E_2)t} \\ &= a^4 + b^4 - 2a^2 b^2 \cos \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t \end{aligned}$$

siden vi har $\cos(x) = \frac{1}{2}(e^{ix} + e^{-ix})$. Valget $a = b = 1/\sqrt{2}$ gir

$$P_{12} = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t \right) \quad (3.28)$$

MRI, "Magnetic Resonance Imaging", baserer seg på denne effekten. Om en spinntilstand 'flipper', så vil energibevaring tilsi at det absorberes eller emitteres stråling. Først må man plassere prøven man vil undersøke i et sterkt magnetisk felt, som lager oppsplitting av energinivåer på grunn av vekselvirkning mellom kjernespinn og magnetfelt. Deretter utsettes prøven man vil avbilde med et magnetfelt med retning ortogonalt på det første, og med passende frekvens slik at overgangen induseres. Dette skjer svært hyppig når frekvensen på feltet er akkurat den samme som flippfrekvensen. Så rekonstrueres et bilde av prøven ved hjelp av den utsendte strålingen, som observeres i mottakerspoler.

Oscillasjonsfrekvensen avhenger av avstanden mellom de to energinivåene. Dette kan utnyttes til å utføre nøyaktige målinger av styrken på magnetfelt; med en MR-probe. Verdien av energisplittingen vil nemlig være proporsjonal med styrken av magnetfeltet. Proben kan prepareres med atomkjerner som kan finnes til å være i tilstand ψ_1 eller ψ_2 , og feltstyrken finnes fra oscillasjonsfrekvensen. Man er ofte interessert i å finne ut hvordan andre observable

oppfører seg som funksjon av tiden, for eksempel posisjon. I dette tilfellet må man beregne følgende:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t)x\Psi(x, t)dx \quad (3.29)$$

(siden $\hat{x} = x$)

3.6 Oppgaver

1. Vis at bølgefunksjonene for 'partikkelen i boks', ligning 3.17 er ortogonale
 $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = 0$ for $n \neq m$.
2. Anta at et elektron er innesperret i en boks med side 1 nm. Beregn energinivåene i Joule og i elektronvolt. I tabellen over konstanter først i boka er både Plancks konstant og elektronmassen oppgitt på flere måter. Forklar hvordan konstantene skal benyttes for at energinivåene skal få korrekte numeriske verdier.
3. Tenk deg at et elektron er innesperret i en boks med lengde 1×10^{-10} m (omtrent to Bohr-radier), og at grunntilstandsenergien er -13,6 eV. Anta at energinivåene er de samme som i en uendelig dyp boks, selv om potensialet skal ha verdi $-U_0$ inni boksen og null utenfor. Hva er verdien av U_0 i denne modellen? Hva blir formelen for bølgelengder på strålingsoverganger? Hvor mange bundne tilstander fins det?
4. Det er ofte mer hensiktsmessig å omdefinere til partikkelen-i-boks-potensialet slik:

$$V = 0 \quad \text{for } -L/2 < x < L/2 \quad V = \infty \quad \text{for } |x| > L/2$$

Løs Schrödingerligningen og finn bølgefunksjonene i dette tilfellet.

5. I denne oppgaven skal vi se på en boks med endelig høyde

$$V = 0 \quad \text{for } -L/2 < x < L/2 \quad V = U \quad \text{for } |x| > L/2$$

- Skriv ned Schrödingerligningen, og løsningene (bølgefunksjonene) på generell form i de tre områdene; I) $x < -L/2$; II) $|x| \leq L/2$, og III) $x > L/2$. Hvilke krav må bølgefunksjonen tilfredsstille (i intervallet $(-\infty, \infty)$)? Hvilke føringer gir det på mulige løsninger?
- Forklar hvorfor vi kan anta at bølgefunksjonen enten er symmetrisk, $\psi(-x) = \psi(x)$ eller antisymmetrisk, $\psi(-x) = -\psi(x)$ om $x = 0$. Skriv ned løsninger i område II) som tilfredsstiller dette kravet.
- Vis at vi, for henholdsvis symmetriske og antisymmetriske bølgefunksjoner, må ha betingelsene:

$$\begin{aligned} \tan \frac{kL}{2} &= \frac{\kappa}{k} \\ -\cot \frac{kL}{2} &= \frac{\kappa}{k} \end{aligned}$$

der $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ og $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$.

Vi innfører nå energivariabelen $\epsilon = \sqrt{E/U}$.

- d) Vis at vi kan skrive $\frac{kL}{2} = \frac{\sqrt{mUL}}{\sqrt{2}\hbar}\epsilon = K\epsilon$, og at forholdet $\frac{\kappa}{k}$ kan skrives

$$\frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{1}{\epsilon^2} - 1}$$

Vi antar at et elektron befinner seg i potensialet, og at L er lik 0,5 nm.

- e) Beregn $K = \frac{\sqrt{mUL}}{\sqrt{2}\hbar}$ for $U = 10\text{eV}$.
- f) Lag plott med de tre funksjonene $f_1(\epsilon) = \sqrt{\frac{1}{\epsilon^2} - 1}$; $g_1(\epsilon) = \tan K\epsilon$ og $g_2(\epsilon) = -\cot K\epsilon$ for den fundne verdien av K .
- g) Bruk plottet til å finne antall bundne tilstander for $U = 10\text{eV}$ og de tilsvarende energinivåene. Sammenlign de fundne energiene i den endelige potensialbrønnen med tilfellet med uendelig høye vegger, og gi en kommentar.
- h) Hva er sannsynligheten for at elektronet befinner seg utenfor vegene i boksen, når det er i grunntilstanden. Sett opp uttrykket og regn ut.
6. Spredning på lav vegg: Anta at en strøm frie partikkler med bølgefunksjon Ae^{ik_1x} treffer et potensial U_0 ($U(x) = 0$ for $x < 0$ og U_0 for $x > 0$). En andel reflekteres, slik at bølgefunksjonen for $x < 0$ er $\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{ik_1x}$. Andelen som går videre er beskrevet med $\psi(x) = Ce^{k_2x}$. Bruk krav om at bølgefunksjonen skal være kontinuerlig og ha kontinuerlig derivert til å finne forkoldene B/A og C/A uttrykt ved k_1 og k_2 . Skriv også svaret med energier istedenfor k_1 og k_2 .
7. STM er forkortelse for 'Scanning Tunneling Microscope', og benytter tunnelleffekten for å studere overflater. Da beveger man en tynn nål i konstant høyde over et plan som definerert av en overflate som skal studeres. (Spissen på nåla skal helst bestå av kun ett atom!) Ujevnhet i overflaten gir en variasjon i avstand mellom nål og overflate, og de små variasjonene gir endringer i transmisjonsannsynlighet av elektroner fra overflaten til nålen, som kan observeres som endringer i strøm mellom overflate og nål. Vi tar utgangspunkt i figur 3.6 og formel 3.19, der vi setter $G=1$.
- a) Vi kan anta at høyden på potensialet, U , er definert av arbeidsfunksjonene til nål og overflate, typisk 4 eV. Anta at avstanden mellom nål og flate er 10 nm. Hvor stor blir transmisjonsannsynligheten?

- b) Hvordan må den skjematiske figuren 3.6 modifiseres for at det faktisk skal gå en strøm, altså at elektroner stort sett skal tunellere i en retning.
- c) Modifiseringen i punkt b) kan ses på som at elektronene i overflaten bringes opp til et energinivå, $E > 0$. Hva må verdien av $E - U$ være for at transmisjonsannsynligheten skal være lik 10^{-8} ?
- d) Vi ønsker å måle avstanden til overflaten med en presisjon på 1 nm. Hvor stor endring i transmisjonssannsynlighet gir en slik endring i avstand?
8. I denne oppgaven skal vi se på tidsutviklingen til en partikkelen i boks som ved tiden $t = 0$ er i en tilstand

$$\Psi(x, 0) = a\psi_1 + b\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{L}} \left[a \sin \frac{\pi}{L}x + b \sin \frac{2\pi}{L}x \right]$$

Vi kan anta at konstantene a og b er reelle.

- a) Forklar at ψ_1 og ψ_2 er egentilstander for energi, og finn energiene.
- b) Vis at normering gir kravet $a^2 + b^2 = 1$
- c) Beregn forventningsverdien av posisjon for tilstanden
- d) Skriv ned bølgefunksjonen for et senere tidspunkt.
- e) Hva er sannsynligheten for å finne partikkelen i tilstand ψ_1 ved tiden $t > 0$?
- f) Beregn forventningsverdien for posisjon som funksjon av tiden.
- g) Tegn en graf av forventningsverdien $\langle x \rangle$ som funksjon av tiden.
- Hint: Her vil det kunne være nyttig å beregne integraler ved bruk av online-verktøy, f.eks. Wolfram alpha
9. Bruk numerisk integrasjon til å bekrefte at egenfunksjonene ψ_0 og ψ_2 for den harmoniske oscillator er ortogonale (med høy grad av sannsynlighet).
10. Vis at funksjonen $\psi(x) = Ke^{-x^2/a^2}$ løser S.L. for en harmonisk oscillatorpotensialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ (ligning 3.21) for passende valg av a . Finn normeringskonstanten, K , (du må bruke tabellverdi for integralet), og energien.
11. a) Beregn svingeamplittuden til en klassisk harmonisk oscillator med energi $(\frac{1}{2} + n)\hbar\omega$.

- b) Hva er sannsynligheten for å finne en partikkel i grunntilstanden i et harmonisk oscillatorpotensial utenfor de klassiske ytterpunkte? (Numerisk beregning er uungåelig hvis du ikke har en tabell med funksjonsverdier av 'erf(x)').
12. Beregn svingefrekvens til forventningsverdien av posisjon for en kvantmekanisk oscillator i energitilstand ψ_3 (..svaret er veldig enkelt...)
13. a) Beregn forventningsverdi for bevegelsesmengde for en partikkel i grunntilstanden i et harmonisk oscillatorpotensial Beregn også forventningsverdien for p^2 (finnes enkelt uten mye beregning).
- b) Beregn forventningsverdiene $\langle x \rangle$ og $\langle x^2 \rangle$ for en harmonisk oscillator i grunntilstanden.
- c) Ut fra de foregående resultatene finn produktet $\Delta x \Delta p$ for en harmonisk oscillator i grunntilstanden. Hint: les om varianser i seksjon 2.2.4 og appendiks.

Kapittel 4

Tre dimensjoner og hydrogenatomet

Hittil har vi diskutert kvantemekanikk i én dimensjon. Vår verden har tre romlige dimensjoner. Har problemene vi diskuterte i forrige kapittel relevans for vår verden? Man er kanskje fristet til å si 'nei'. Men de tredimensjonale problemstillingene lar seg svært ofte reduseres til endimensjonale systemer med passende tilpasninger.

I tre dimensjoner ser Schrödingerligningen slik ut

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (4.1)$$

Her er ∇^2 Laplace-operatoren. Det er hensiktsmessig å velge et koordinatsystem som passer for symmetrien i det potensialet man søker løsninger for.

4.1 Partikkel i boks

Den første situasjonen vi skal se på er for en partikkel innesperret i en kubisk boks med side L , altså et potensial

$$V(x, y, z) = 0 \text{ for } 0 \leq x, y, z \leq L \quad \infty \text{ ellers}$$

Her er det naturlig å bruke kartesiske koordinater der Laplace-operatoren er definert slik:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Vi løser problemet ved separasjon av variable, og skriver

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

Da blir ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [X''(x) + Y''(y) + Z''(z)] = EX(x)Y(y)Z(z) \quad (4.2)$$

i områder der $V(x, y, z) = 0$. Vi deler på XYZ og får

$$-\frac{\hbar}{2m} \left[\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} \right] = E$$

Summen av de tre leddene er konstant. En eventuell endring i ett av leddene på grunn av en liten endring i en av variablene vil ikke kunne kompenseres med tilsvarende endring i av ett av de andre leddene. Dermed må hvert ledd være konstant:

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{X''}{X} = E_x \quad -\frac{\hbar}{2m} \frac{Y''}{Y} = E_y \quad \text{og} \quad -\frac{\hbar}{2m} \frac{Z''}{Z} = E_z$$

Energien blir

$$E = E_x + E_y + E_z$$

Vi har dermed redusert problemet til tre endimensjonale 'partikkel-i-boks' problemer som vi alt har løst, og vi kan umiddelbart skrive ned løsningen:

PARTIKKEL I KUBE MED SIDE L

Bølgefunksjoner:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}; \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (4.3)$$

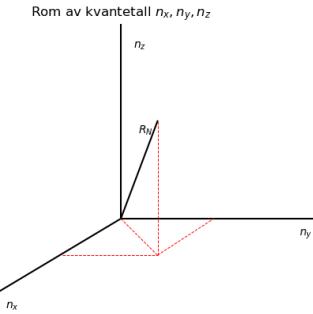
Energier:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (4.4)$$

Dette resultatet benyttes i veldig mange sammenhenger, for eksempel i statistisk mekanikk, der det viser seg at det passer fint å beskrive systemer med mange partikler, for eksempel en gass, som om de var partikler i en kubisk beholder.

4.1.1 Degenerasjon i kubisk beholder

Essensielt i denne sammenhengen er *degenerasjonsgraden*, g som angir antall tilstander som gir samme energi.



Figur 4.1: Oppstelling av tilstander i volumet av mulige kombinasjoner av kvantetall.

Grunntilstanden har $E = 3\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ og vil ha kvantetallene $n_x = n_y = n_z = 1$. Det fins det bare én tilstand med denne energien, så degenerasjonsgrad er $g = 1$. Men nest laveste tilstand vil ha energi $E = 6\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$. Dette kan realiseres på tre måter, med kvantetall $(n_x, n_y, n_z) = (2, 1, 1), (1, 2, 1)$ eller $(1, 1, 2)$. Dermed er degenrasjonsgraden $g = 3$. For store n_x, n_y, n_z kan vi telle opp antall tilstander med samme energi med å notere oss at de ligger på et kuleskall i et rom definert av kvantetallene n_x, n_y, n_z (fig. 4.1). Vi definerer radien til kula:

$$R_N = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \frac{L(2mE_N)^{\frac{1}{2}}}{\pi\hbar}$$

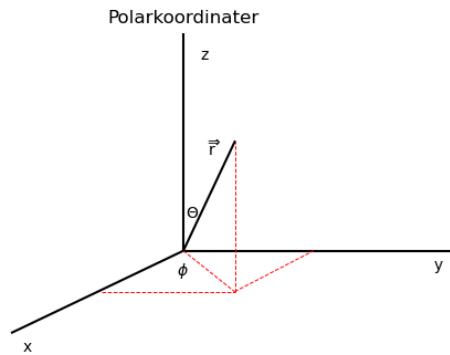
ved bruk av ligning 4.4. Alle verdier av kvantetallene er positive, og antall tilstander som har energi mindre eller lik E_N er lik $1/8$ av 'volumet' av antallskula:

$$G(E_N) = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi R_N^3 = \frac{\pi}{6} \frac{L^3 (2mE_N)^{\frac{3}{2}}}{\pi^3 \hbar^3}$$

Vi kjenner igjen L^3 som volumet av boksen. Degenerasjonen i et energiintervall rundt E_N blir

$$g(E)d(E) = \frac{dG}{dE} dE = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE \quad (4.5)$$

Vi presiserer at det er er føringen på bølgetallet, $kL = n\pi$, som gir dette resultatet siden vi har $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. For innesperrede fotoner er sammenhengen mellom bølgetall og energi en annen, nemlig $k = \frac{E}{\hbar c}$. Da blir degenerasjonsgraden en annen (se kap. 7.9.4) på grunn av en annen sammenheng med volumet av kula, og vi får resultatet vi viste til i beskrivelsen av sort stråling.



Figur 4.2: Sammenhengen mellom kartesiske koordinater og polarkoordinater

4.2 Coulombpotensialet

Da Schrödinger oppfant sin ligning så var det et viktig mål å kunne beskrive hydrogenatomet, og forklare spektrallinjene, slik som Bohr fikk til med sin modell. Dette lyktes Schrödinger med i 1926. Han fikk Nobelprisen i fysikk i 1933 sammen med Dirac for arbeidet med kvantetmekanikken.

Den potensielle energien til et elektron som er i avstand r til en kjerne med ladning Ze er gitt ved Coulombpotensialet, og er

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (4.6)$$

Her er det ikke snakk om et elektron som er bundet til en fast ladning i ro. Det er to ladninger som beveger seg som et fritt system. Fra mekanikken har vi at vi kan behandle systemet som om elektronet beveger seg rundt et fast punkt i samme avstand, men med redusert masse

$$m_r = \frac{m_e m_K}{m_e + m_K}$$

Her er m_K massen til kjernen. Elektronmassen, $m_e = 0,511MeV/c^2$ er nesten en totusendel av protonmassen ($m_p = 938MeV/c^2$), så den reduserte massen er nokså nær elektronmassen for systemet vi studerer. For å løse Schrödinger-ligningen for dette sentralsymmetriske potensialet, så skriver man ut ligningen i polarkoordinater, definert ved avstanden, r og to vinkler. Polarvinkelen,

θ , og asimutalvinkelen, ϕ . Sammenhengen mellom disse og de kartesiske koordinatene er (Se figur 4.2).

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \phi \\y &= r \sin \theta \sin \phi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}$$

Løsningen av ligningen finner man igjen ved separasjon av variable. Vi skriver bølgefunksjonen slik:

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Det er et nokså langt regnestykke å finne Laplace-operatoren i polarkoordinater. Heldigvis er det enkelt å finne den oppgitt i formelsamlinger:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

Hvis vi setter inn denne formen av Laplaceoperatoren, og multipliserer med en faktor $\frac{2m_r}{\hbar^2} \frac{r^2 \sin^2 \theta}{R \Theta \Phi}$ så kan vi skrive Schrödingerligningen slik:

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{2m_r r^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} \quad (4.7)$$

Da har vi i det minste fått separert ut ϕ -avhengigheten på høyre side. Både venstre og høyre side må være konstant. Vi kaller konstanten for m_l^2 (av grunner som blir klart etterhvert). Vi har altså

$$\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = -m_l^2 \Phi \quad (4.8)$$

Løsningen er den komplekse funksjonen

$$\Phi(\phi) = e^{im_l \phi} = \cos m_l \phi + i \sin m_l \phi \quad (4.9)$$

Dette er altså bølgefunksjonens vinkelavhengighet i $x - y$ planet. Vi ønsker en entydig definert bølgefunksjon overalt i rommet. Hvis vi går en hel runde rundt i planet så bør vi altså komme tilbake til den opprinnelige funksjonsverdi, og krever $\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$:

$$e^{im_l \phi} = e^{im_l (\phi + 2\pi)}$$

Når vi skriver ut $m_l(\phi + 2\pi) = m_l\phi + m_l2\pi$ så ser vi at det bare er når m_l er et helt tall eller null at sinus og cosinus-funksjonene blir de samme. Vi har altså

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.10)$$

Vi setter dette resultatet inn i ligning 4.7 og deler på $\sin^2 \theta$. Da får vi separert avhengigheten av r fra avhengigheten av θ :

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m_r r^2}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right)$$

De to sidene er konstante, og vi setter dem lik $l(l+1)$. Da er vi kommet fram til to ordinære diffligninger. For polarvinkelen har vi

$$\frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = l(l+1) \quad (4.11)$$

og radialligningen

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_r r^2}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = l(l+1) \quad (4.12)$$

Dette er differentialligninger som Schrödinger arbeidet med i begynnelsen av 1920-årene, tildels på et sanatorium i Sveits, ettersom han var syk med tuberkelose. Schrödinger hadde et høyst ukonvensjonelt familieliv og levde store deler av livet i et *ménage à trois*.¹

Vi skal ikke gjennomgå løsningsene av ligningene 4.11 og 4.12 i detalj her. Men vi skal diskutere dem nedenfor.

4.2.1 Vinkelavhengighet og banespinn

Løsningsene av ligning 4.11 kalles Legendre funksjoner. Når $m_l = 0$ kalles løsningsene *Legendre-polynomer*, etter den franske matematikeren Adrien Marie Legendre. Løsningsene må ha $l = 0, 1, 2, \dots$. Polynomet $P_l(x)$ har grad l . For våre formål setter vi $x = \cos \theta$. Men vi har som sagt også løsninger for heltallige verdier av m_l forskjellig fra null. De fins bare for $|m_l| \leq l$ og betegnes med P_l^m . Her er de første funksjonene.

$$P_0 = 1 \quad P_1^0 = \cos \theta \quad P_1^1 = \sin \theta$$

$$P_2^0 = \frac{1}{2}(3\cos^2 \theta - 1) \quad P_2^1 = 3\sin \theta \cos \theta \quad P_2^2 = 3\sin^2 \theta$$

¹Konsultasjon med Wikipedia den 15/2-2022 tyder på en heller uakseptabel oppførsel hva angår seksualliv, i alle fall etter dagens begreper.

Det er vanlig å slå sammen de to vinkelavhengighetene i *sfærisk harmoniske funksjoner*, betegnet med

$$Y_l^m(\theta, \phi)$$

Disse er definert slik at de er normaliserte. Da må vi vite at volumelementet i sfæriske koordinater ikke er $dxdydz$ men

$$dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

Integrering over vinkler blir over romvinklelementet:

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$$

Dermed er normeringskravet

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (Y_l^m)^* Y_l^m \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

For l og m lik null er det enkelt, for Y_0^0 har ingen vinkelavhengighet. Vi har

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\phi = 4\pi$$

så $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$.

Banespinn (eller angulært moment) er en viktig størrelse når man diskuterer bevegelser i sentralsymmetrisk potensial. Det er en bevart størrelse, definert klassisk som

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

For å bygge opp en kvantemekanisk operator for \vec{L} må vi erstatte vektorene med de tilsvarende operatorer. Bevegelsesmengdeoperatoren blir til

$$\hat{p} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{u}_x + \frac{\partial}{\partial y} \vec{u}_y + \frac{\partial}{\partial z} \vec{u}_z \right)$$

Etter å ha transformert til polarkoordinater, så vil man finne ut følgende:

Ligning 4.11 er også en ligning for L^2 . Vi må bare multiplisere løsningene med \hbar^2 . Det er derfor av stor interesse å se på ligningen isolert, for løsningene gir oss generell informasjon om angulært moment i kvantemekanikken. I kartesiske koordinater ser operatoren for banespinn slik ut:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{u}_x & \vec{u}_y & \vec{u}_z \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} \quad (4.13)$$

Vi skriver ned operatoren for banespinn langs z-aksen (altså rotasjon rundt z-aksen):

$$\hat{L}_z = \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \vec{u}_z$$

Dette er en operator i x-y planet. Om den transformeres til polarkoordinater blir den til

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (4.14)$$

Dermed ser vi at ligning 4.8 kan skrives

$$\frac{1}{\hbar^2} \hat{L}_z^2 \Phi = m_l^2 \Phi$$

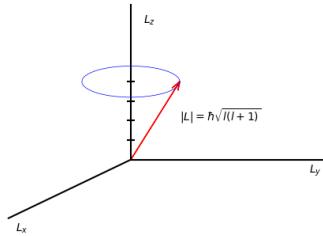
Her har vi grunnen til hvordan vi har skrevet ned separasjonskonstanten m_l^2 . Bølgefunktjonen, Φ , er samtidig egenfunksjon for \hat{L}_z med egenverdi $\hbar m_l$!

Løsningene for kvadratet av banespinn gir verdiene $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ der l er et helt tall større eller lik 0. Videre er de fundne heltallene m_l også tilstander for z-komponenten av det angulære moment. Vi kan ha $L_z = m_l \hbar$ med $|m_l| \leq l$, altså $2l+1$ mulige verdier.

Klassisk kan banespinn spesifiseres med en vektor med lengde og tre spesifiserte komponenter. I kvantemekanikken er dette ikke mulig. Det skulle i så fall ha eksistert løsninger av ligning 4.11 som samtidig er egenfunktjoner for alle komponentene, altså noe slikt som $\hat{L}_x \hat{L}_y \hat{L}_z \psi = \lambda_x \lambda_y \lambda_z \psi$ eller $(\hat{L}_x + \hat{L}_y + \hat{L}_z) \psi = \Lambda \psi$. Ligning 4.11 kan ikke formuleres på den måten.

Banespinn i kvantemekaniske systemer kan spesifiseres med kun en av komponentene og lengden. De tre romlige banespinnkomponentene kan ikke spesifiseres samtidig.

Figur 4.3 illustrerer dette.



Figur 4.3: Banespinn. Kun en av komponentene og vektorens lengde kan spesifiseres.

Banespinn i kvantemekanikken

Løsninger for vinkeldelen i Coulomb-potensialet er også løsninger for generelle tilstander av banespinn i kvantemekanikken. De er gitt ved kulefunksjonene

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \Theta_l^m(\theta)\Phi_m(\phi) \quad (4.15)$$

Her er $\Theta_l^m(\theta) = NP_l^m(\cos \theta)$ en *Legendre funksjon* multiplisert med en normeringskonstant, N .

Asimutalfunksjonen er $\Phi_m(\phi) = e^{im\phi}$.

De fundne tilstandene er tilstander med bestemt verdi av banespinn:

$$L^2 = \hbar^2 l(l + 1) \quad (4.16)$$

med $l = 0, 1, \dots$, og en komponent av dette:

$$L_z = \hbar m_l \quad (4.17)$$

For hver verdi av l er det $2l + 1$ verdier av $m_l = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$.

4.2.2 Radialligningen

Med fundne løsninger av vinkelavhengigheten multipliserer vi radialligningen 4.12 med $\frac{\hbar^2}{2m_e r^2} R(r)$ på begge sider, og flytter litt på leddene slik at den blir litt mer gjenkjennelig som egenverdiligning,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_r r^2} R - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R = ER \quad (4.18)$$

Vi ser at kvantetallet m_l ikke er med i radialligningen. Men kvantetallet for $|\vec{L}|$ er med (l). Man kan kalle ledet med $l(l+1)$ for sentrifugalleddet, som en delvis kansellering av effekten av Coulombpotensialet. Merkelig nok har dette ikke innvirkning på energiene. For Coulombpotensialet er det kun verdien av n som vil bestemme energien². Bølgefunksjonen med vinkelavhengighet er gitt som

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}Y_l^m(\theta, \phi)$$

Vi har satt merkelapper n og l på $R(r)$ for å karakterisere løsninger av radialligningen.

For å komme videre med løsningen må den omformes ved hjelp en 'prøvefunksjon' på denne formen : $f(\rho) = L(\rho)\rho^n e^{-\frac{\rho}{2}}$, med ρ som en dimensjonsløs radiell koordinat.

Vi skal ikke utlede hele løsningen av radialligningen her.

Resultatet blir bl.a. en diffligning som løses ved polynomer 'oppfunnet' av en annen fransk matematiker, Edmond Laguerre, og $L(\rho)$ kalles et Laguerre-polynom. Det viser seg at løsningene at energiene som framkommer er

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_r Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 eV}{n^2} \quad (4.19)$$

med n et helt tall større enn null, *nøyaktig de samme energinivåene som Bohr kom fram til i 1913!* (ligning 2.14).³ Det er instruktivt å sette inn en kjent løsning og verifisere den. Prøv med $R(r) = e^{-\frac{r}{a}}$ og se hvilke verdier l, a og E må settes til for at ligningen skal gjelde!

Men Schrödingers løsninger for hydrogenatomet avviker fort fra Bohrs modell: For hver verdi av n fins det n løsninger med forskjellig l , nemlig $l = 0, 1, 2 \dots n-1$. Grunntilstanden, $n = 1$ har dermed intet banespinn. I Bohrs modell var jo banespinnet $L = n\hbar$.

For gitt l kan vi ha $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ d.v.s. $2l+1$ mulige verdier av z-komponenten av de angulære momentet. Energinivåene er bare bestemt av hovedkvantetallet, n , og de lovlige verdiene av l for gitt n er $l = 0, 1, 2, \dots n-1$. Altså n muligheter. Vi teller opp antall mulige m_l og l for hver n :

$$\sum_0^{n-1} (2l+1) = 1 + 3 + 5 + \dots + 2n - 1 = 2n \times \frac{n}{2} = n^2$$

²I partikkelfysikk modelleres tunge mesoner som kvark-antikvark-par som holdes sammen i et lineært økende potensial. Da gir hver l forskjellig energi.

³..ved et lykketreff av en blanding av uanvendbar klassisk fysikk og prematur kvante-teori iflg. [7]

Dette er degenerasjonsgraden. Vi skal senere forklare at elektronet også har et egenspinn og 2 mulige tilstander for dette, slik at degenerasjonsgraden for et elektron bundet til en kjerne må dobles til $g_n = 2n^2$. En formell måte å skrive løsningene på er å sette $\rho = \frac{2r}{an}$ og skrive:

$$R(r) = KL_{n+l}^{2l+1}(\rho)\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}$$

For hydrogenatomet er a lik Bohr-radien (formel 2.15). For å finne sannsynligheten for å finne elektronet i avstand r så er det viktig å merke seg faktoren r^2 på grunn av volumelementet:

$$P_{n,l}(r) = r^2 |R_{n,l}|^2 \quad (4.20)$$

Figur 4.4 viser noen bølgefunksjoner og sannsynlighetstettheter for $n = 1, 2, 3, 4$ og $l < n$. Legg merke til at for $l=0$ så er bølgefunksjonen forskjellig fra null. Det en mulighet for at et elektron i en s-tilstand kan befinner seg inni en kjerne (som har typisk utstrekning på 10 fm). Her kan det reagere med et proton i en prosess kalt elektroninnfanging.

Vi oppsummerer:

Elektron i Coulombpotensial

De romlige bundne tilstandene til et elektron i et Coulombpotensial, $V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$, karakteriseres med kvantetallene n , l og m_l . Energinivåene er gitt som:

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_r Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{13,6 eV}{n^2}$$

m_r er den reduserte massen til elektronet, $\frac{m_e m_Z}{m_Z + m_e}$. For hver n fins det n uavhengige bølgefunksjoner, spesifisert med det angulære moment, $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

De tre lavestliggende radielle bølgefunksjonene, $R_{n,l}$, er:

$$\begin{aligned} R_{1,0} &= \frac{2}{a^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{a}} \\ R_{2,0} &= \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}} \\ R_{2,1} &= \frac{r}{\sqrt{24a^5}} e^{-\frac{r}{2a}} \end{aligned}$$

For $Z = 1$ er $a = \frac{m_r}{m_e} a_0$ der a_0 er *Bohradiusen*

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \frac{\hbar^2}{m_e} \approx 0,529 \times 10^{-10} \text{m} \quad (4.21)$$

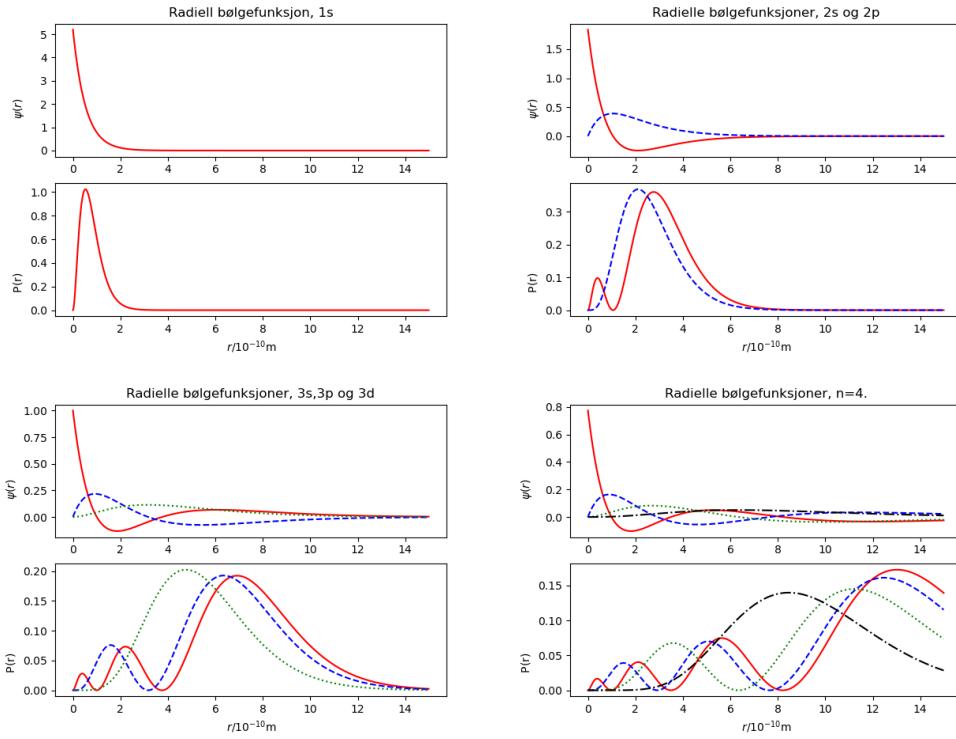
For alle studier av elektromagnetisk vekselvirkning så er den numeriske verdien av elementærladning av stor betydning, $e \approx 1,609 \times 10^{-19}$ Coulomb. For svært mange studier er det hensiktsmessig å skrive den på en litt mer universell måte. Dette vil vi også trenge i studier av finstrukturen til energinivåene i hydrogenatomet. Vi kan innføre hvileenergien, mc^2 og skrive

$$E_n = -\frac{1}{2} m_r c^2 \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} \quad (4.22)$$

med *finstrukturkonstanten* gitt som den dimensjonsløse størrelsen

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (4.23)$$

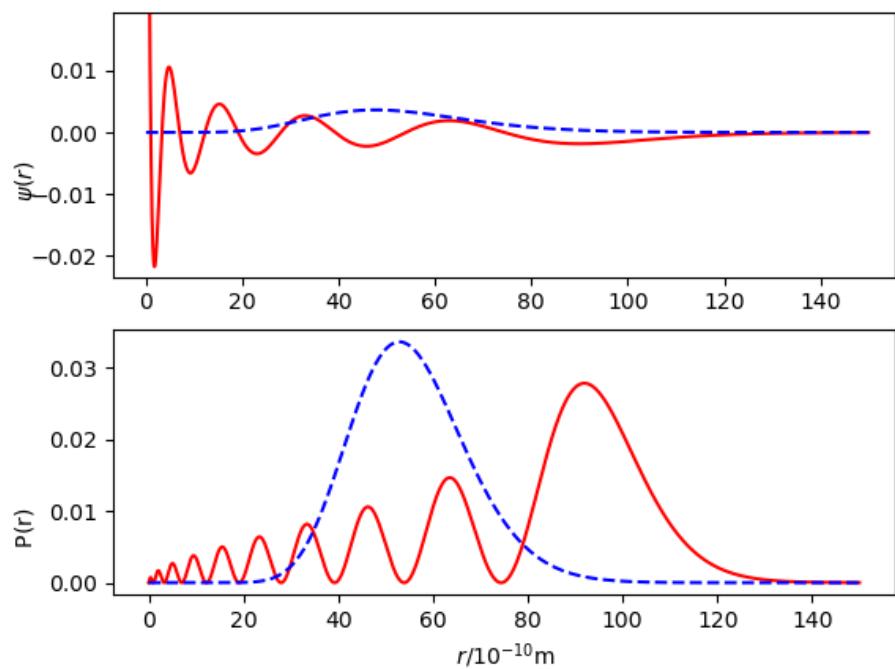
I α inngår tre fundamentale konstanter i fysikken: elementærladningen, Plancks konstant og lyshastigheten.



Figur 4.4: Radialfunksjoner og sannsynlighetsfordelinger i r for $n = l, 2, 3, 4$ og $l < n$ (x-akse i Ångstrøm). Heltrukne røde linjer er for $l = 0$. Disse har verdier forskjellig fra null i $r = 0$. Men sannsynligheten for at elektronet skal befinner seg i $r = 0$ er likevel 0 fordi volumelementet går mot null. Stiplet blå linje er for $l = 1$, prikket grønn for $l = 2$ og prikk-strek er for $l = 3$

Forfatteren er gammel nok til å ha opplevd Paul Dirac på en fysikkskole. Han var æresgjest, og hans 80-årsdag skulle feires. Han satt på fremste rad under forelesningene og sa ingenting. Men ved en anledning ble han bedt om å uttale seg om hvilken retning fysikkforskning burde ta. Da sa han (sitat etter hukommelsen): '*Little progress will be made before it is understood why the fine structure constant has a value of 1/137*'. Fysikken har ikke kommet noen vei med dette spørsmålet ennå.

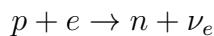
I figur 4.5 ser vi radialfunksjoner for $n = 10$ og $l = 9$. Vi ser at snittavstanden til kjernen har økt. For høye l nærmer den seg det 'klassiske' Bohr-resultatet, som sier at $L = n\hbar$ og $r = n^2 a_0$. For høye kvantetall vil de kvantemekaniske resultatene nærme seg de klassiske. Mens Bohrs modell har kun en mulighet for banespinn for gitt hovedkvantetall, n , så viser Schrödingerligningen at det fins n verdier av l for gitt n .



Figur 4.5: En høyt eksitert tilstand. Heltrukken rød linje er for $l = 0$. Stiplet linje er for $l=9$. Iflg. Bohrmodellen har banen for $n = 10$ en radius på $10^2 a_0 \approx 53 \times 10^{-10} \text{ m}$

I figur 4.6 ser vi vinkelavhengigheten av bølgefunksjonene med $n = 4$ og $l = 3$. Vi ser at funksjonsverdiene har vekselvis positive og negative verdier for forskjellige polarvinkler. Når vi beregner sannsynlighetsfordelinger av en enkelt bølgefunksjon, så er fortegnet uvesentlig. Men når atomære eller molekylære tilstander skal settes sammen av flere elektroner, så må man addére funksjonsverdier før man kvadrerer. Da vi nok mange ikke-trivuelle interfrenseffekter oppstår, med tilhørende karakteristiske kjemiske egenskaper til de forskjellige stoffene.

Siden bølgefunksjonen for s -tilstand ikke er null, så er det en liten sannsynlighet for at elektroner er inni kjernen, selv om volumelementet er veldig lite. Når energiforholdene gjør det mulig så kan dette forårsake denne reaksjonen inni kjernen:

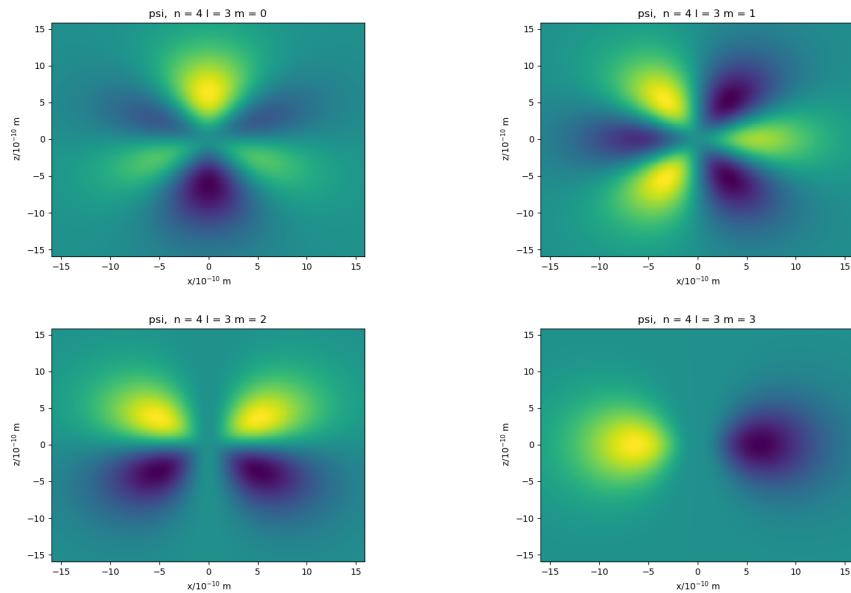


Denne prosessen kalles 'elektroninnfangning' og er synlig ved karakteristisk røngenstråling når et elektron faller ned fra et høyereleggende energinivå for å fylle plassen til elektronet som er fanget inn (dette er nesten alltid i lavestliggende energitilstanden for atomet). Eksitere atomkjerner kan også overføre energi til elektroner i s -tilstand og frigjøre disse fra atomene.

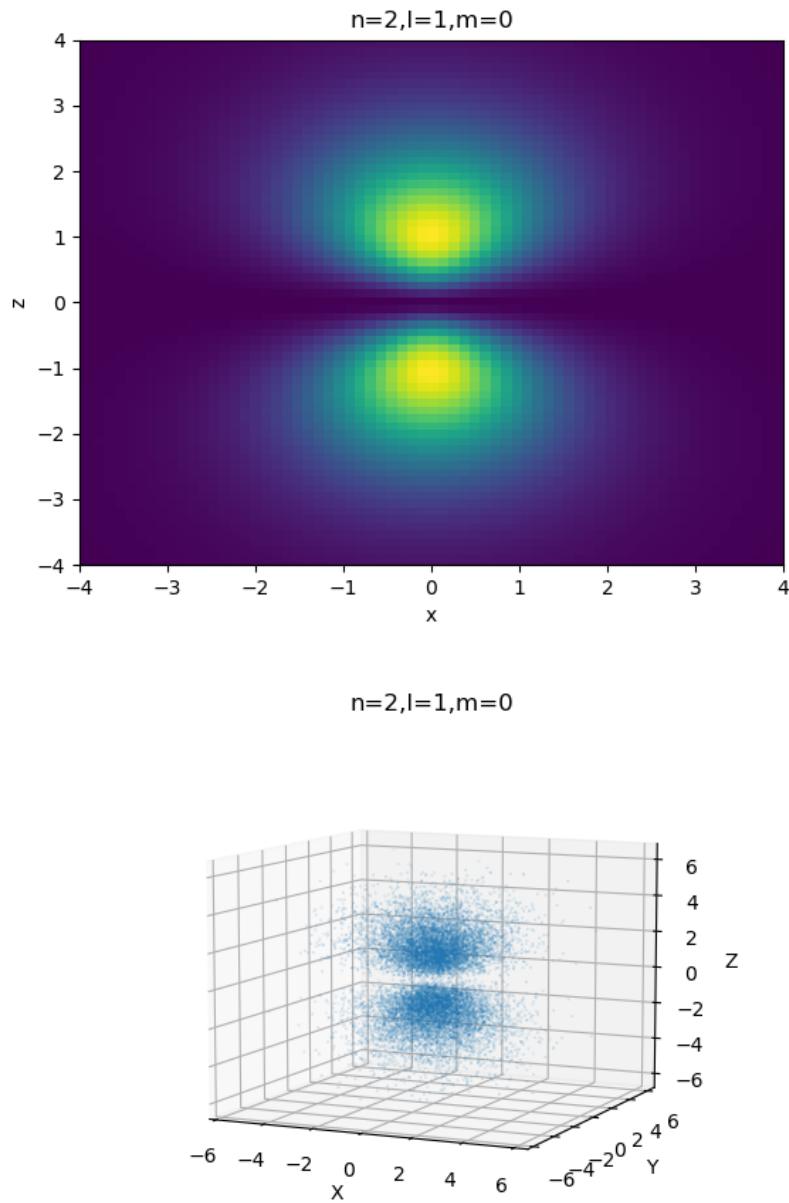
Bohradiusen er bestemmende for hyppigheten av reaksjonen elektroinnfangning. Hva hadde skjedd om den var mindre? Man kan spekulere i om det er mulig å få til kjernreaksjoner ved å lage systemer med liten Bohr-radius. En mulighet ville være å erstatte elektronet i hydrogenatomet med et myon, som har en masse som er 200 ganger elektronmassen. Eksperimenter er gjort, og det er mulig å lage slike atomer. Man har undersøkt muligheten for *myon-katalysert fusjon*. Man har lykkes med å lage myoniske atomer og eksempler på at dette har katalysert fusjonsreaksjoner. Men ikke med en hyppighet som gjør energiregnskapet positivt.

Figurene 4.7 til 4.12 viser et sett romlige sannsynlighetsfordelinger og simuleringer av romlige elektronskyer. I simuleringene har vi plassert 'elektroner' som prikker på tilfeldig vis i rommet, men med en sannsynlighet for koordinat x, y, z , som gitt av bølgefunksjonen. Bibliotekene i Scientific python inneholder funksjoner for å generere mange typer matematiske funksjoner, som Laguerre-polynomer og kulefunksjoner. Dessuten fins det plotteverktøy som gjør det enkelt å lage figurene i dette kapittelet.

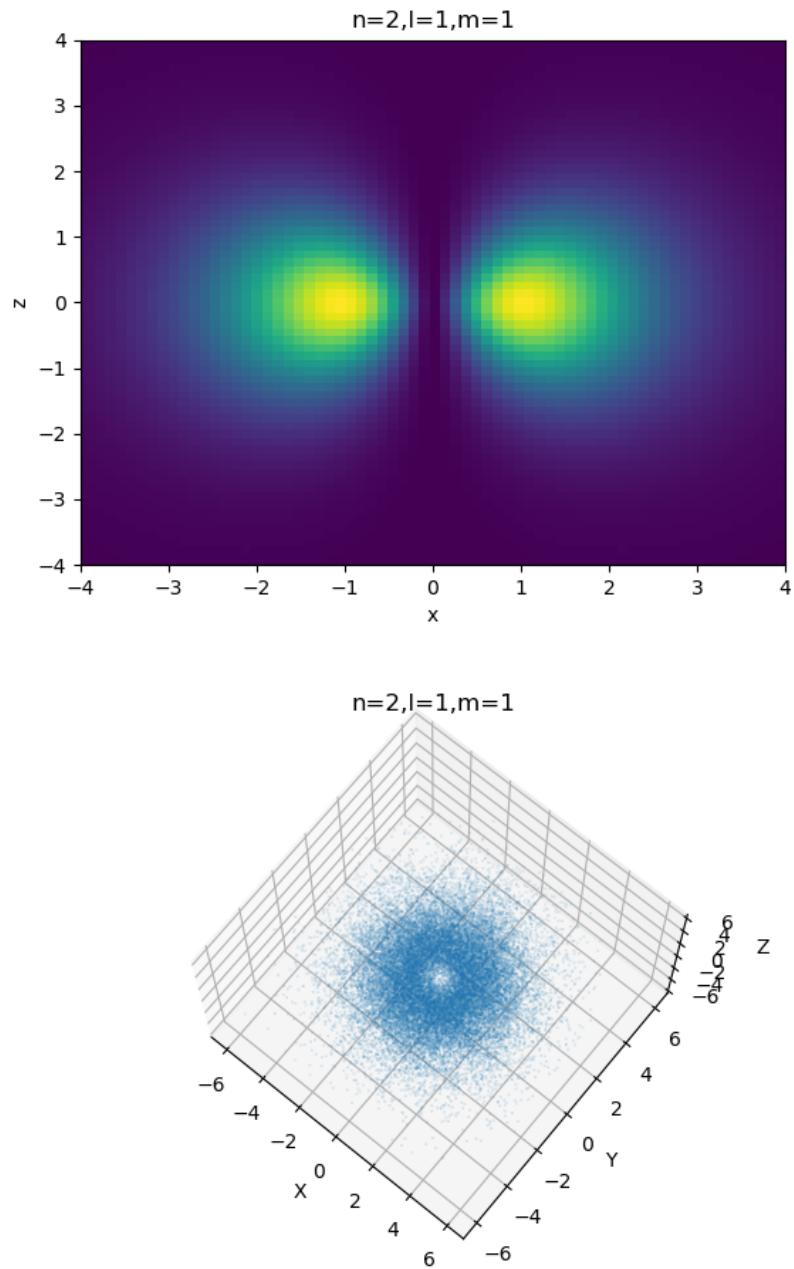
Tetthetsfunksjonene vi har kommet fram til skyldes at vi har valgt et fast aksesystem. Men et fritt hydrogenatom velger ikke noe kvantiseringsakse. I praksis kan man få atomene til å 'velge' z-akse ved å sette dem i et magnetisk felt rettet langs z-aksen. Når atomene binder seg sammen i molekyler vil imidlertid romlige detaljer i bølgefunksjonen som følge av kvantiseringen være bestemmende for strukturen av molekylene (vinkler mellom atomkjernene



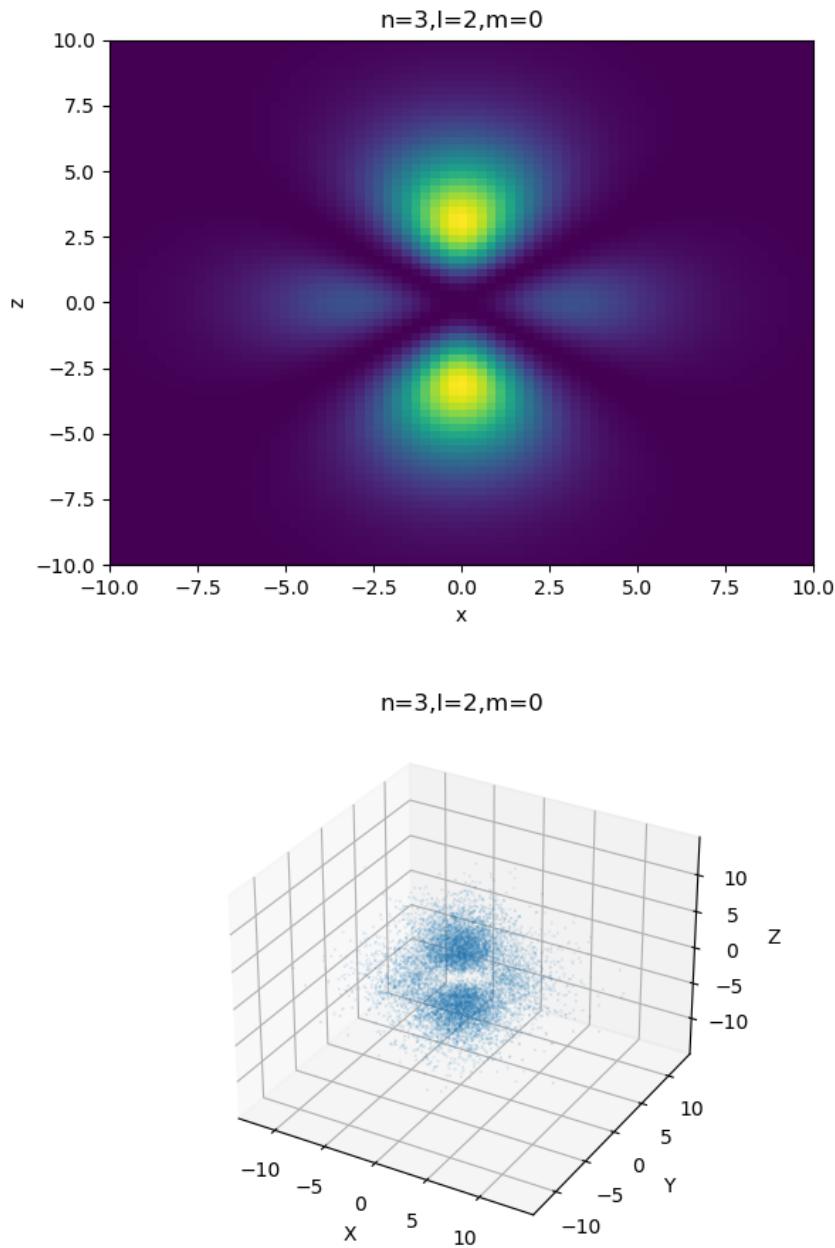
Figur 4.6: Funksjonsverdier for de fire bølgefunksjonene med $n = 4$ og $l = 3$ i z-x planet. Realdelen av funksjonen er plottet (i dette planet er imaginær-delen lik 0, siden vi har $\phi = 0$ for positiv x, og $\phi = \pi$ for negativ x). De mørkeblå partiene har lavest funksjonsverdi, med $\psi < 0$. De lysegule partiene har høyest funksjonsverdi og $\psi > 0$. Det er 'automatisk' fargeskala. Enheter på aksene er i Ångstrøm. Legg også merke til at alle funksjonene er odder når koordinatene skifter fortegn, $x \rightarrow -x$ og $z \rightarrow -z$ (og $y \rightarrow -y$). De har *paritet* lik -1, i tråd med forventning, som er at pariteten til bølgefunksjonene er gitt som $(-1)^l$.



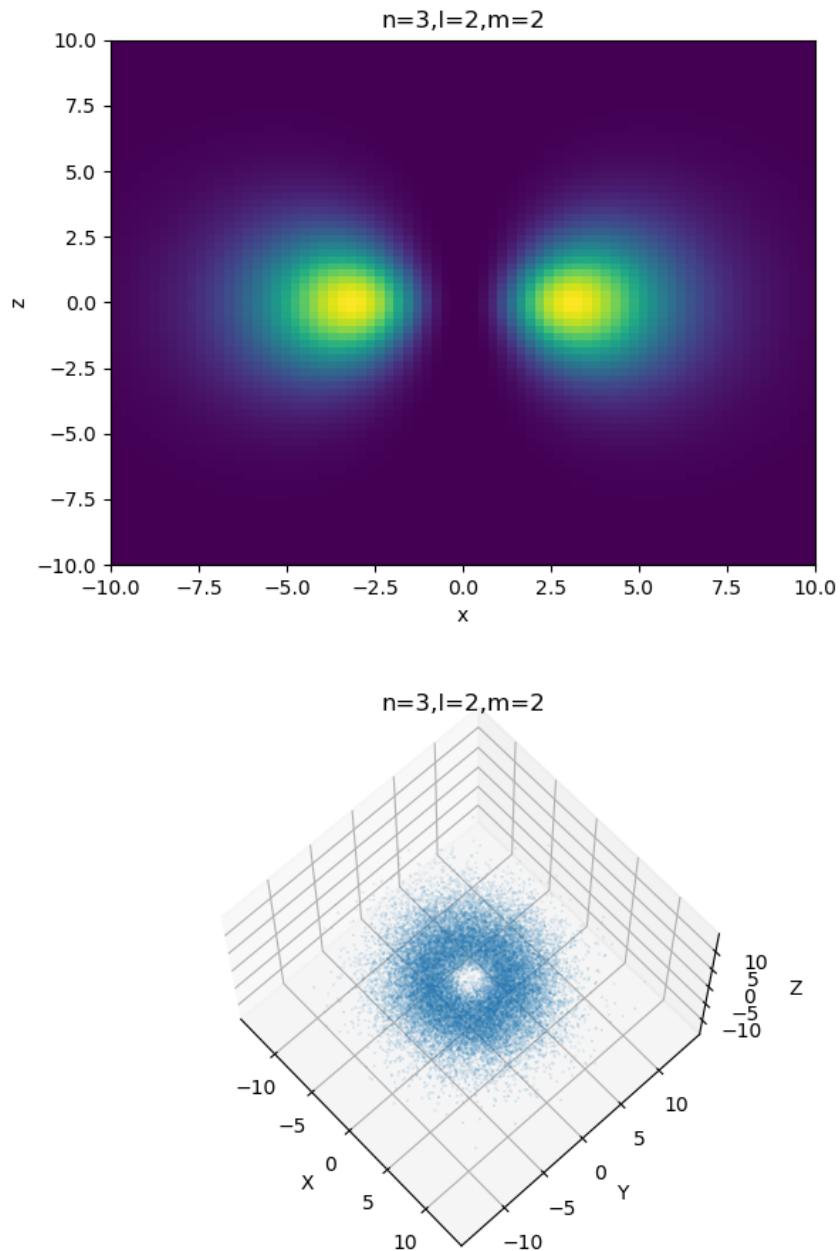
Figur 4.7: Sannsynlighetstettheter i z-x planet og romlig fordeling. Enheter på aksene er i Ångstrøm (10^{-10}) m



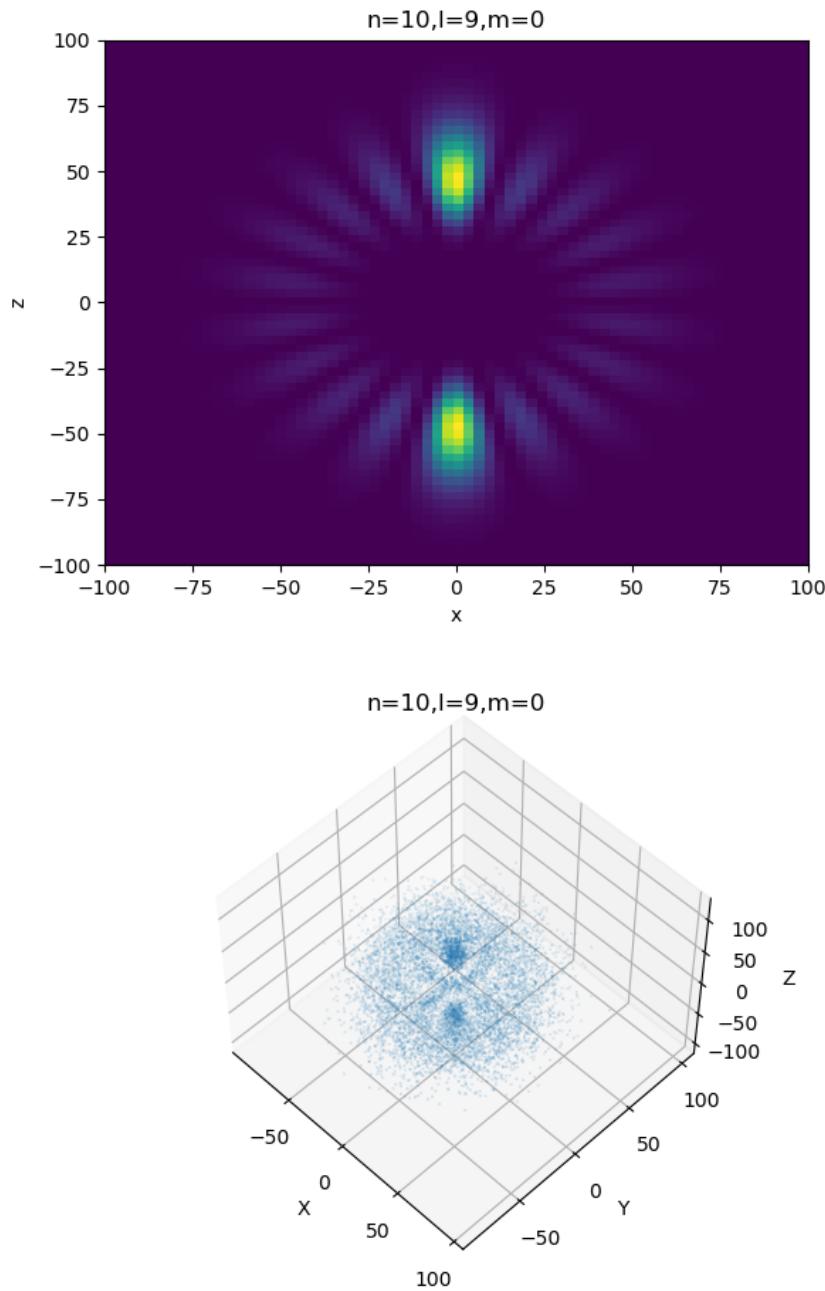
Figur 4.8: Sannsynlighetstettheter i z-x planet og romlig fordeling. Enheter på aksene er i Ångstrøm (10^{-10}) m



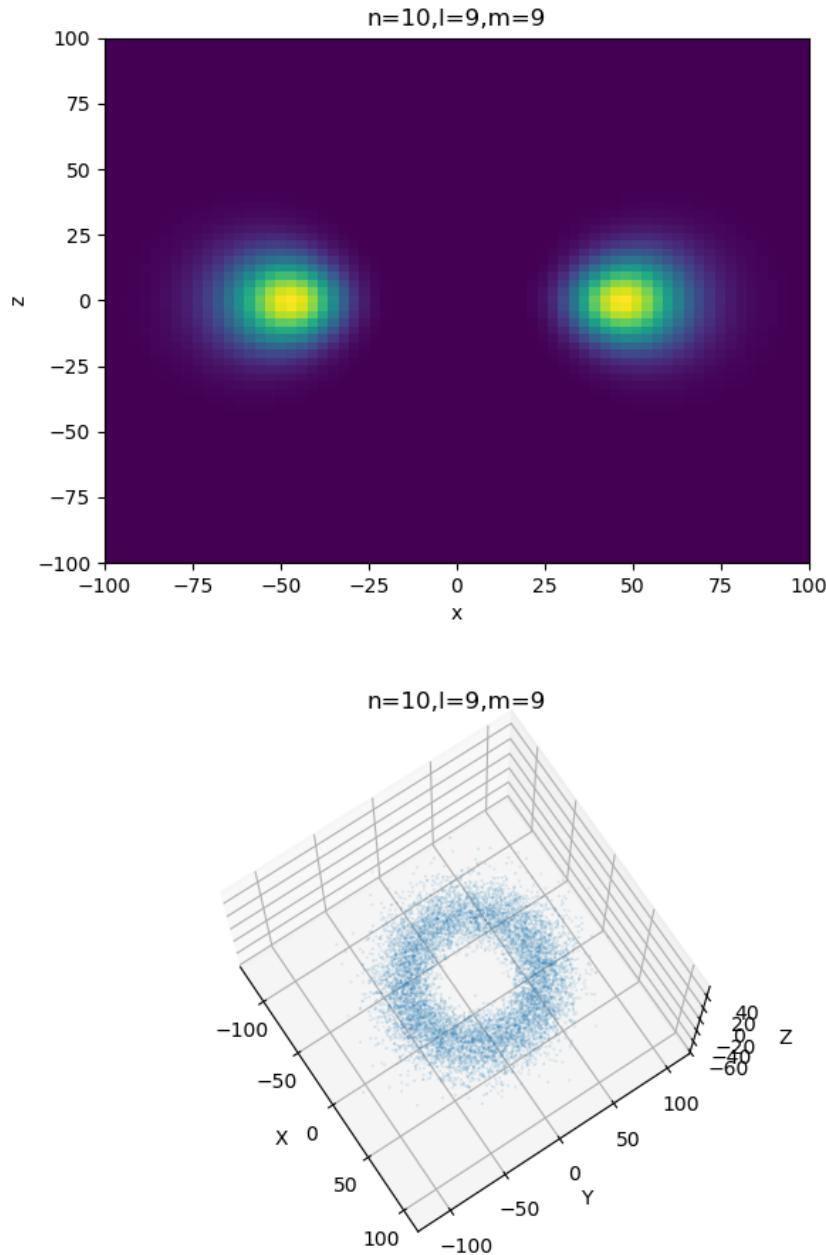
Figur 4.9: Sannsynlighetstettheter i z-x planet og romlig fordeling. Enheter på aksene er i Ångstrøm (10^{-10}) m



Figur 4.10: Sannsynlighetstettheter i z-x planet og romlig fordeling. Enheter på aksene er i Ångstrøm (10^{-10}) m



Figur 4.11: Sannsynlighetstettheter i z-x planet og romlig fordeling. Enheter på aksene er i Ångstrøm (10^{-10}) m



Figur 4.12: Sannsynlighetstettheter i z - x planet og romlig fordeling. Enheter på aksene er i Ångstrøm (10^{-10}) m

osv). Dette skyldes orienteringen av de elektriske og magnetiske feltene som gir stabile bindinger (lavest liggende energitilstander).

4.2.3 Nomenklatur

Betegnelsen av de ulike tilstandene til elektroner atomet er nokså forvirrende. Mye av det skyldes hvordan strålespektrene var benevnt historisk. *Hovedkvantetallet*, n angir 'skallet' som elektronet befinner seg i: K, L, M, N betyr henholdsvis $n = 1, 2, 3, 4$. *Spektroskopisk* notasjon angir skall og tilstandens angulære moment: $s, p, d, f, g..$ betyr henholdsvis $l = 0, 1, 2, 3, 4....$

Eksempel: Tilstanden $3p$ er en tilstand med $n = 3$ og $l = 1$. Når vi tar med effekter på grunn av magnetisk kobling mellom banespinn og egenspinn må vi presisere ytterligere. Dette kommer vi tilbake til senere.

4.2.4 Oppsplitting av energinivåene i magnetfelt

Zeeman-effekten inntrer når man plasserer atomer i et ytre magnetfelt (\vec{B}). Den ble oppdaget av Pieter Zeeman i 1896 da han studerte bølgelengdespekteret til lyset fra en natriumlampe. Dette var lenge før det forelå en kvanteteori for atomene, men effekten fikk en forklaring utfra en hypotese om at natrium besto av atomer som var magnetiske dipoler. Zeeman's opprinnelige observasjon er avbildet som svarte linjer på en fotografisk film etter at lyset hadde passert et prisme e.l. for spektralanalyse.

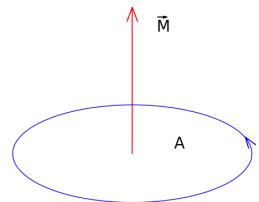
Atomære tilstander med angulært moment forskjellig fra null er små magnetiske dipoler som veksevirker med B -feltet. Det magnetiske momentet som settes opp er godt illustrert med å se på en ladning i en klassisk sirkelbane. Dette svarer til en strømsløyfe med strøm $I = \frac{qv}{2\pi r}$ der r er radien i banen. Det manetiske momentet som settes opp er gitt som

$$\vec{M} = IA\vec{u}_T = \frac{ev}{2\pi r}\pi r^2\vec{u}_T = \frac{evr}{2}\vec{u}_T = \frac{e}{2m_e}\vec{L}$$

Her er A arealet som omsluttes av sløyfen, \vec{u}_T er flatenormalen, og vi har satt inn $\vec{L} = m_e\vec{v} \times \vec{r}$. (Se fig 4.13) Forholdet $\frac{e}{2m_e}$ kalles det gyromagnetiske forholdet. En kraftmoment utøves på sløyfa når den står i magnetfeltet: $\vec{\tau} = \vec{M} \times \vec{B}$ Energien på grunn av dette vil endres med

$$\Delta E = -\vec{M} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e}\vec{L} \cdot \vec{B}$$

Retningen av magnetfeltet har gitt en kvantiseringssakse for energinivåene! Vi velger z-akse slik at feltet er rettet langs denne, og vi får $\vec{L} \cdot \vec{B} = L_z B = \hbar m_l B$



Figur 4.13: Det magnetiske moment til en strømsløyfe er strømmen multiplisert med arealet den omslutter

Dermed blir energinivåene

$$\Delta E = m_l \frac{e\hbar}{2m_e} B \quad (4.24)$$

I magnetfelt splittes altså energinivåene opp i $2l + 1 = 1, 3, 5, \dots$, altså et oddetall nivåer avhengig av l til tilstanden. Dette kan verifiseres eksperimentelt ved å studere strålingsspektrene fra eksisterte atomer. Størrelsen $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ kalles *Bohr-magnetonet*.

4.2.5 Egenspinn: elektronets indre angulære moment.

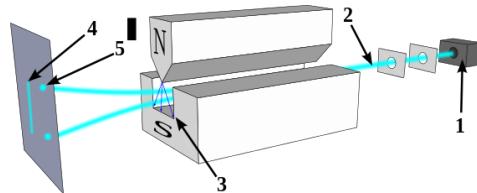
Studier av spektrene avslørte en mer komplisert oppsplitting. Spektre med oppsplitting i to og fire linjer var også observert. Det måtte være flere tilstander tilstede enn dem som ble forklart på grunn av $\vec{L} \cdot \vec{B}$. Det viser seg at elektronene har et indre *egenspinn*, betegnet med S .

Egenspinnen har et kvantetall $s = \frac{1}{2}$, slik at verdien blir

$$S^2 = s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \quad (4.25)$$

Dette må virkelig være et *indre* spinn. Vi har jo forklart at et romlig angulært moment må ha heltallig l for at bølgefunksjonen skal være entydig. Generelle algebraiske betraktninger tillater likevel halvtallig spinn i kvantmekanikken. Men hoppene i spinnets z-komponent er alltid heltallig, slik at et elektron kan ha to spinntilstander:

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar \quad (4.26)$$



Figur 4.14: Stern-Gerlach eksperimentet. Strålen av spinn=1/2 atomer splittes i to separate stråler. Klassisk forventning er et kontinuerlig bånd. Fra Wikipedia: Tatoute - Own work, CC BY-SA 4.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=34095239>

altså $m_s = -\frac{1}{2}$ eller $m_s = \frac{1}{2}$. Spinntilstanden må spesifiseres i tillegg til den romlige bølgefunksjonen, f.eks. ved å henge på en merkelapp + eller -. I svært mange sammenhenger er det greit å bruke matrisenotasjon, der de to tilstandene kalles *spinorer*. Den generelle grunntilstanden kan for eksempel skrives

$$\Psi = a\psi_{1,0,0}\chi_+ + b\psi_{1,0,0}\chi_-$$

med

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Stern-Gerlach eksperimentet bekreftet eksistensen av kvantisert spinn = 1/2. De sendte atomer gjennom et inhomogent magnetfelt. Da utsettes de for en netto kraft i tillegg til endringen i energi som altså er bestemt av spinnkomponenten m_s . Kraftens retning er avhengig av verdien av denne komponenten. Eksperimentet bekreftet diskret oppsplittning i to retninger i henhold til kvantemekanikkens forutsigelse.

Hvordan vekselvirker elektronspinnene med et magnetfelt? Elektronet har altså et egenspinn, og derfor også et magnetisk moment. Man skulle tro ligning 4.24 skulle være brukbar for å beskrive det, altså anta et magnetisk moment

$$\vec{\mu}_e = -g_e \frac{e}{2m} \vec{S} \quad (4.27)$$

med $g_e = 1$. Det viser seg imidlertid at vi har tilnærmet $g_e = 2$! Dette ble tidlig påvist eksperimentelt, og ble senere 'forutsagt' av Wolfgang Pauli

teoretisk til å være nøyaktig lik 2 ved en korrekt definisjon av Hamiltonoperatoren for elektroner i elektromagnetisk potensial (Coulombpotensialet $V(r)$) er en tilnærming som strengt tatt bare gjelder for ladninger i ro).

Dirac lagde en relativistisk ligning (Dirac-ligningen) som beskrev elektroner med halvtallig spinn på en måte som var konsistent med relativiteteorien. Denne gav også $g_e = 2$. Samtidig forutsa den eksistensen av positroner, altså antimaterie. Til slutt nevner vi at vekselvirkningen mellom Dirac-elektroner og det kvantiserte elektromagnetiske feltet i form av fotoner beskrives ved hjelp av kvantefeltteori (QED). Da oppstår små korrekjoner til g_e . Disse korrekjonene er beregnet med svært høy presisjon gjennom rekkeutvikling av korrekjonsledd i potenser av finstrukturkonstanten α .

Den teoretiske verdien er $(g - 2)/2 = 0,0011596521816(8)$ Eksperimentelt har man målt $(g - 2)/2 = 0,0011596521807(3)$. Tallene i parentes viser usikkerhet i siste siffer. Det er med andre ord overestemmelse mellom teori og eksperiment til en ufattelig høy presisjon!

Man har også utført eksperimenter for å måle $g - 2$ til *myoner*. Myonet er en elementærpartikkelformasjon som kan regnes som å være identisk med elektronet, med ett unntak: Det er ca 200 ganger tyngre enn elektronet. Dette medfører at det er ustabilt. Vi blir stadig bombardert av myoner, p.g.a. kosmisk stråling. Ved forskningssentre som CERN og Fermilab (USA) kan man produsere store mengder myoner, og $g - 2$ er målt med stor presisjon. De første presisjonsmålingene av myonets magnetiske moment kom alt i 1960-årene fra eksperimenter ved CERN. I april 2021 kom et nytt resultat fra Fermilab, og pr. 2021 er den eksperimentelt målte verdien for myoner:

$$(g_\mu - 2)/2 = 0,00116592061(41)$$

Teoretiske beregninger basert på Standardmodellen for partikkelfysikk avviker fra denne målingen fra åttende siffer (åttende og niende siffer er 18 istedenfor 20). Dette er ett av svært få avvik mellom Standardmodellen for partikkelfysikk og eksperiment, og omfattes derfor med stor interesse. Eksperimentet ved Fermilab har (i 2021) mye data igjen å analysere, så det er spennende å se hva det endelige eksperimentelle resultatet derfra blir!

Til slutt nevner vi at protoner og nøytroner har anomale magnetiske moment. Her er g-faktorene målt til

$$\frac{g_p}{2} = 2,793$$

og

$$\frac{g_n}{2} = -1.913$$

At disse verdiene ikke er nær $g = 2$ var en av de første indikasjonene på at protoner og nøytroner er sammensatte partikler! Nå vet vi at protoner og

nøytroner består av *kvarker*, henholdsvis (u, u, d) og (u, d, d) der u er en 'opp'-kvark med ladning $+\frac{2}{3}e$ og d er en 'ned'-kvark med ladning $-\frac{1}{3}e$. Om man antar at de magnetiske momentene er summen av kvarkenes magnetiske moment slik de framkommer ved bruk av ligning 4.27 så får man verdier nær de målte verdiene. Men da har man antatt at proton og nøytronmassene fins på ikke-relativistiske kvarker med masser lik $1/3$ av nukleonmassene. I gjeldene teori for de sterke vekselvirkninger (QCD) er dette galt. I QCD (Kvantekromodynamikk) er massene til kvarkene bare brøkdeler av totalmassen til nukleonene.

Elektronspinnet bidrar altså også til oppsplittingen i magnetfelt. Ligning 4.24 modifiseres til

$$\Delta E = \frac{e\hbar}{2m} (m_l + 2m_s) B \quad (4.28)$$

når vi bruker tilnærmingen $g_e = 2$. For eksempel splittes energinivået til en p -tilstand opp i fem nivåer. Zeeman-effekten framstilt slik gjelder bare tilnærmet, når magnetfeltet er sterkt sammenlignet med de magnetiske effektene som atomene selv setter opp. Disse effektene diskuterer vi i neste avsnitt.

4.2.6 Spinn-banekobling

Magnetfeltet som elektronene føler trenger ikke å være eksternt. I hydrogenatomet så kan man se på elektronet som liggende i ro, med protonets ladning svirrende rundt. Strømsløyfen på grunn av protonbanen resulterer i et magnetfelt som elektronet føler. Vi får

$$\Delta E = \vec{M}_e \cdot \vec{B}$$

med magnetfeltet gitt som verdien i sentrum av strømsløyfen som protonet setter opp.

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r}$$

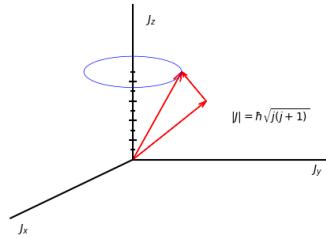
Vi skriver bare ned hvordan energioppsplittingen blir tilnærmet:

$$\Delta E_{SO} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \vec{L} \cdot \vec{S} = K \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Størrelsen i hakeparentes er forventningsverdien til $1/r^3$ når tilstanden vi diskuterer har $l > 0^4$. Verdiene for energinivåene kan man ikke finne direkte ved bruk av tilstandene vi brukte i ligning 4.28. Isteden skriver man om prikkproduktet slik:

$$(\vec{L} + \vec{S})^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

⁴ $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \int_0^\infty r^2 |R_{nl}(r)|^2 \frac{1}{r^3} dr$



Figur 4.15: Addisjon av to angulære moment. Summen er også et angulært moment; med kvantetall j som kan anta alle verdier fra $j = l_1 + l_2$ til $j = |l_1 - l_2|$

For å komme videre med dette må vi lære hvordan man skal **legge sammen to angulære moment** i kvantemekanikken. Vi har altså $L^2 = l(l+1)\hbar^2$, $L_z = m_l\hbar$ og $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$. Hva blir systemets totale angulære moment (som vi kaller $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$)?

Svar:

- z-komponentene legges sammen: $J_z = \hbar(m_l + m_s)$
- Lengeden av spinnvektoren blir $J^2 = j(j+1)\hbar^2$. Her er j et helt tall som kan anta alle verdier mellom $l+s$ og $|l-s|$. Fig 4.15 illustrerer dette.

Addisjonsregelen gjelder for alle verdier av de to spinnene.

I dette tilfellet er $s = \frac{1}{2}$. Prikkproduktet blir dermed

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2)$$

Innsetting av kvantetallene gir:

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \hbar^2 \quad (4.29)$$

Vi kan ha både $j = l+1/2$ og $j = l-1/2$, og vi får dermed en oppsplitting av spektrene.

Det viser seg at de 'gode' kvantetallene for beskrivelse av energinivåene og tilstandene for hydrogenatomet er (n, j, m_j, m_s) . Formelen som beskriver

energinivåene med oppsplitting avhenger dermed av j istedenfor l . Vi skriver ned resultatet:

$$E_{n,j} = -\frac{13,60eV}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (4.30)$$

Uten magnetfelt er det ikke oppsplitting p.g.a. m_j og m_s , men for hver l fins altså to verdier av j . Ved opptelling av tilstander med samme hovedkvantetall, n så er resultatet fortsatt $g_n = 2n^2$, så når oppsplittingen ikke er vesentlig kan vi gjerne karakterisere tilstandene med merkelappene (n, l, m_l, m_s) .

Spinn-banekoblingen forklarer atomspektrenes *finstruktur*. Vi ser at korreksjenone av energinivåene er karakterisert med finstrukturkonstanten kvadrert, altså en korreksjon på $\alpha^2 \approx 5 \times 10^{-5}$.

4.2.7 Spinn-Spinn kobling

Enda en oppsplitting framkommer når vi tar hensyn til at atomkjernen også har et egenspinn og dermed magnetisk moment. Man får

$$\Delta E_{SS} = C \vec{M}_N \cdot \vec{M}_e$$

der \vec{M}_N er det magnetiske momentet til kjernen. Man må gjennom den samme omskrivingen som over for å få fram oppsplittingen, som vanligvis er mye mindre enn oppsplittingen på grunn av spinn-bane kobling. Denne oppsplittingen av energinivåene kalles hyperfinsplitting. Energiforskyvningen blir altså

$$\Delta E_{SS} = C \frac{g_N Z e}{2m_N} \frac{g_e e}{2m_e} \vec{S}_N \cdot \vec{S}_e = K \vec{S}_N \vec{S}_e \hbar \quad (4.31)$$

Siden kjernens masse er minst 2000 ganger elektronmassen, så blir ΔE_{SS} av størrelsesorden bare en tusendel av ΔE_{LS} . Spinn-Spinn koblingen går at en energinivå splittes i to nivåer, med forskjellige verdier av totalspinn. En s tilstand splittes til tilstander med totalt angulært moment $\vec{J} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ med kvantetall henholdsvis $j=1$ og $j=0$.

$$E_{s,j=1} = E_s + K \frac{1}{2} [1(1+1) - \frac{1}{2} \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{3}{2}] \hbar^2 = E_s + K \frac{1}{4} \hbar^2$$

og

$$E_{s,j=0} = E_s + K \frac{1}{2} [0 - \frac{1}{2} \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{3}{2}] \hbar^2 = E_s - K \frac{3}{4} \hbar^2$$

Siden det fins tre spinnkomponenter for den øverste energien kalles dette for tripllett-tilstandene (som altså er *tre* tilstander), mens den med spinn lik 0 kalles singlett-tilstanden.

4.2.8 Mer nomenklatur

Energiene er altså splittet opp som følge av spinn-spinn- og spinn-banekobling. Dette gir tilstander med kvantisert totalspinn. Det oppstår behov for nærmere presisering. I denne presiseringen benyttes bokstavene S,P,D.. for å gi banespinnet. (l), men store bokstaver. Man skriver

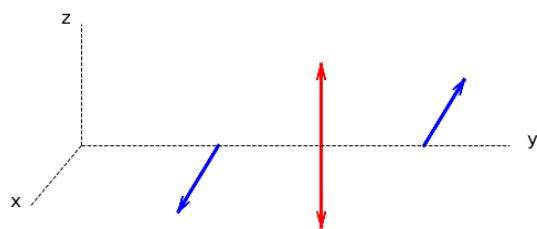
$$^M l_j$$

Her er l altså S,P,D,F osv.

M angir multiplisitet som følge av hvordan elektronspinnet er koblet til resten av atomet. I spinn-spinn vekselvirkninger har vi tre mulige tilstander med totalegenspinn 1, og en mulig spinn lik 0 tilstand. Da er multiplisitetene henholdsvis $M = 2S + 1 = 3$ når $S=1$ eller $M = 1$ når $S=0$. I f.eks. natrium er vi interessert i det ytterste elektronet, og det fins ikke spinnkobling til resten av atomet. Da er multiplisiteten lik $M = 2$, for de to mulige egenspinn-tilstandene. For eksempel: 3S_1 angir tripplett-tilstanden i hydrogenatomet. $^2P_{3/2}$ angir en elektrontilstand med $l = 1$ som er koblet med elektronspinnet til $j = 3/2$. Videre er det ingen (eller irrelevant) kobling til protonspinnet. Dette vil være tilfelle i mange atomer, der man kun er interessert i tilstanden til det ytterste elektronet. Men det er mange studier av p -tilstander der denne koblingen har relevans. Da er man interessert i tilstander som $^3P_0, ^3P_1$ og 3P_2 , samt 1P_1 . De tre første har her $l = 1$ med proton og elektronspinnene koblet til $S = 1$ slik at man har tre mulige totalspinn ($j = 0, 1, 2$). Den siste tilstanden har $l = 1$ og $S = 0$.

4.3 EPR paradokset

I seksjon 3.1.2 nevnte vi kort at det kan føles svært problematisk at måleutfall må være kvantiserte, for eksempel at måling av z-komponenten av egenspинnet til et elektron kun kan gi ett av to mulige resultater. Før målingen har elektronet en bølgefunksjon som ikke sier hvilket måleresultat man vil få, men sannsynligheten for et gitt resultat kan beregnes. Videre postuleres det (se seksjon 3.4) at etter målingen har elektronets tilstand (bølgefunksjon) 'kollapset' til egentilstanden for måleutfallet. Einstein, Podolsky og Rosen formulerete i 1935 et paradoks når man begynner med en veldefinert tilstand bestående av to partikler. Det kan for eksempel dreie seg om to elektroner som er henfallsprodukter av en partikkkel med spinn lik null. Elektronene har hver spinn lik $1/2$, men bevaring av angulært moment tilsier at summen av spinnkomponentene er null. I klassisk fysikk vil man si at disse retningene er uforandelige på grunn av bevaringsloven. Da trenger man bare å se på



Figur 4.16: De røde pilene (langs z-aksen) viser spinnretningene ved henfall av en partikkell med spinn lik null til to elektroner. Elektronene kommer ut slik at spinnene er kvantiserte hver sin vei langs z-aksen, og antas å bevege seg hver sin vei langs den horisontale aksen. Om man setter opp apparatur for å måle spinn av de to elektronene langs en annen akse (x-aksen i figuren), så sier kvantemekanikken at måleutfallene alltid vil være slik at spinnbevaring er oppfylt. Det virker så at den ene målingen har påvirket tilstanden til det andre elektronet.

rotasjonsretningen (d.v.s. spinnretningen) av den ene partikkelen for også å kjenne spinnretningen til den andre ved bruk av bevaringsloven.

Men i kvantemekanikken kan man *velge* kvantiseringssakse (f.eks. velge retning på et kvantiserende magnetfelt), og man får et måleutfall for den første målingen som ikke er gitt på forhånd. Likevel vil denne ene målingen med sikkerhet fortelle oss hvilken tilstand den andre partikkelen har etter at denne ene målingen er utført.

Vi kan med andre ord si noe sikkert om den andre partikkelen uten å måle på den, og uten at det er noen synlig kommunikasjon mellom de to partiklene som forteller om måleutfallet på den første partikkelen.

EPR mente at siden de to elektronene hadde floyet fra hverandre, så burde de være å anse som uavhengige partikler. Når den kvantemekaniske målingen faktisk 'roterte' spinnretningen til den ene partikkelen, så burde ikke dette samtidig bestemme hvilken vei den andre partikkelen roterte. Her har jeg skrevet 'roterte' i anførselstegn, for vi snakker ikke om noen rotasjon, men snarere elektronets bølgefunksjons mulighet til å anta en bestemt verdi for spinnet etter måling. Men bevaring av totalspinnets komponent langs måleaksen skal gjelde i kvantemekanikken. Spinnkomponentene til de to elektronene vil alltid være antikorrelerte, slik at summen blir 0.

Det har vært gjennomført mange eksperimenter for å teste dette paradokset, og det har vist seg at måleresultatene alltid har vært i tråd med kvantemekanikkens forutsigelser. Spesielt godt kjent er eksperimentene til Alain Aspect og medarbeidere. De benyttet ikke elektroner, men systemer med to fotoner. Lys kan dekomponeres i to polarisasjonsretninger. For enkeltfotoner oversettes dette til to forskjellige retninger på fotonenes egenspinn (f.eks. enten $S_z = +\hbar$ eller $S_z = -\hbar$). Det er mulig å lage atomære strålingsoverganger der to fotoner sendes ut samtidig i hver sin retning og med totalt spinn lik 0. Da er altså $S_{z1} + S_{z2} = 0$. De satte opp et system for deteksjon av to enkeltfotoner der spinnbevaring tilsa at de produserte polarisasjonsretningene alltid var anti-korrelerte. De viste at anti-korrelasjonen alltid var opprettholdt selv om produsert polarisasjonsakse var helt tilfeldig fordelt over alle retninger. Valgte man sammenfallende akse for måling av de to fotonenes polarisasjon så var polarisasjonsretningene alltid funnet å være antikorrelerte, i tråd med loven om spinnbevaring i kvantemekanikken. Enkeltfotoner har spinn lik 1, og spinnets retning er enten langsmed flygeretningen, eller motsatt rettet av flygeretningen. Dette bestemmer også polarisasjonsretning. Det er fullstendig analogi med tankeeksperimentet med to elektroner som er beskrevet over, fordi det kan vises at fotoner som beveger seg med lyshastighet ikke kan ha en tredje spinnkomponent, lik null langs bevegelsesretningen. I 2022 ble Nobelprisen i fysikk utdelt til den eksperimentelle bekreftelsen av dette. (til Aspect, Clauser og Zeilinger).

4.4 Oppgaver

1. Finn degenerasjonsgraden til en partikkel i kubisk boks som har energi

$$E = \frac{16}{2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

2. Vi antar nå at vi har en partikkel i en boks med kvadratisk grunnflate med side L , men med høyde $2L$. Finn de fire laveste energiene med tilhørende tilstander og degenerasjonsgrad.
3. Kulesymmetrisk harmonisk oscillator: En partikkel er i potensialet

$$\frac{1}{2}m\omega(x^2 + y^2 + z^2)$$

Vis at Schrödingerligningen er separabel. Hva blir de tilhørende energiene? Hva blir degenerasjonsgrad til tilstanden med energi $E = \frac{13}{2}\hbar\omega$?

4. Når elektronet er i grunntilstanden i et hydrogenatom, hva er sannsynligheten for å finne det inni protonet? La oss anta at protonet er en kule med radius 1 fm ($1 \times 10^{-15} \text{ m}$). Hva blir den tilsvarende sannsynligheten for et myon bundet til et proton? Beregn integraler numerisk.
5. Beregn den midlere avstanden ($\langle r \rangle$) og den mest sannsynlige avstanden til kjernen for et elektron i grunntilstanden i et hydrogenatom og i et jernatom. (Hint: relevant integral finns i appendiks).
6. Vis at bølgefunksjonen $R_{2,1}$ løser den raduelle ligningen 4.18, og bekreft energi og verdi av l .
7. Det går an å vise at forventningsverdien for avstanden mellom kjerne og elektron er
- $$\langle r \rangle = \frac{a}{2}(3n^2 - l^2 - l)$$
- der a er 'Bohradius' (se lign. 4.21) Velg noen bølgefunksjoner og vis at formelen passer med det man får ved beregning av forventningsverdi ved numerisk integrasjon.
8. Hva er degenerasjonsgraden (antall tilstander) når hovedkvantetallet er $n = 4$ i et hydrogenatom. Skriv ned mulige banespinn; og bane- og egenspinnkomponenter.
9. Vis at degenerasjonsgraden for tilstander med hovedkvantetall n er $g_n = 2n^2$

10. La oss anta at en deeksitasjon fra en p -tilstand til en s -tilstand gir et foton med bølgelengde 400 nm. Vi setter på et magnetfelt for å se oppsplittingen (Zeeman-effekten). Hvis den minste forskjellen i bølgelengder vi kan skille fra hverandre er 0,1 nm, hvor stort må magnetfeltet være for at vi skal kunne se oppsplitting?
11. Vi ser i fig. 4.4 at sannsynlighetsfordelingen for et elektron i en $2s$ -tilstand har to maksima. Beregn av avstanden, r , for disse maksima og verifiser at figuren stemmer.
12. I vår diskusjon av spinn-banekobling (4.2.6) diskuterte vi hvordan banespinn og egenspinn kan settes sammen til et totalspinn. Anta nå at vi isteden skal sette sammen en tilstand med $l = 2$ og en tilstand med $l = 1$. Skriv ned de forskjellige mulighetene for totalspinn og z -komponent vi får da.

Kapittel 5

Atomer med flere elektroner

Etter å ha lært om tilstandene som ett elektron kan ha, så må vi finne ut hvordan vi skal bygge opp atomer med flere elektroner rundt samme kjerne. Hvordan bygger vi opp bølgefunksjonen til et system med flere partikler. Utgangspunktet må være statistisk. Om vi har to partikler i et system, så må sannsynligheten for å finne partikkelen 1 i posisjon \vec{r}_1 og partikkelen 2 i posisjon \vec{r}_2 være lik produktet av de to individuelle sannsynlighetene. Altså

$$P(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = P_1(\vec{r}_1)P_2(\vec{r}_2)$$

5.1 Identiske partikler, Eksklusjonsprinsippet

Både i atomfysikk og i statistisk fysikk er det av stor viktighet å erkjenne at to identiske partikler i et system aldri, *aldri*, kan identifiseres hver for seg medmindre det er mulig å sette en unik merkelapp på dem. Om vi har to elektroner i en beholder, eller i et atom (f.eks. to elektroner i nøytralt helium), så er det ikke mulig å vite om partiklene bytter plass. Bølgefunksjonen som beskriver topartikkeltilstanden må ta hensyn til dette.

I utgangspunktet er sannsynlighetsamplituden for at partikkelen 1 er i tilstand a og partikkelen 2 er i tilstand b gitt som

$$\psi(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2)$$

Poenget er at denne *ikke* oppfyller symmetrikravet. Ombytte av partiklene gir oss en annen tilstand, nemlig

$$\psi(2, 1) = \psi_a(2)\psi_b(1)$$

og partiklene har fått nye merkelapper. Hvis ψ_a er sentrert utenbys så har partikkelen 2 flyttet dit. Kravet om identiske, ikke skillbare, partikler formuleres

ved hjelp av sannsynlighet for observasjon. Vi må ha

$$P(1, 2) \equiv |\psi(1, 2)|^2 = P(2, 1) \equiv |\psi(2, 1)|^2$$

Vi må symmetrisere den kombinerte bølgefunksjonen slik at dette kravet er oppfylt.

Bølgefunksjonen er enten *symmetrisk*,

$$\psi(1, 2) = \psi(2, 1)$$

eller *antisymmetrisk*,

$$\psi(1, 2) = -\psi(2, 1)$$

Hvordan bygger vi inn den totale bølgefunksjonen fra enkeltpartikkefunksjonene, gitt dette kravet? Vi må bygge opp bølgefunksjonen slik at symmetrikravet er oppfylt. Dette oppnås ved å anta at vil *enten* har

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)]$$

eller

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)]$$

Disse bølgefunksjonene tilfredsstiller kravet om at vi ikke kan vite at to like partikler har byttet plass.

Kan de to partiklene være i *samme* tilstand? Hvis bølgefunksjonen er symmetrisk så er svaret *JA*

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_a(2) + \psi_a(2)\psi_a(1)] = \sqrt{2}\psi_a(2)\psi_a(1) \quad (5.1)$$

Hvis bølgefunksjonen er antisymmetrisk så er svaret *NEI*

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_a(2) - \psi_a(2)\psi_a(1)] = 0 \quad (5.2)$$

Det viser seg at bølgefunksjonen til et system av partikler med halvtallig spinn (som elektroner, protoner og nøytroner) er antisymmetrisk. Dette er Paulis eksklusjons-prinsipp. Bølgefunksjonen til et system av partikler med heltallig spinn (som fotonet) er symmetrisk.

PAULIS EKSKLUSJONSPRINSIPP

En partikkel med halvtallig spinn kalles fermioner. To fermioner kan aldri være i samme kvantemekaniske tilstand. Et kvantemekanisk system av fermioner vil derfor alltid ha en antisymmetrisk bølgefunksjon ved ombytte av to partikler.

Eksklusjonsprinsippet gjelder for alle typer identiske partikler med halvtallig spinn, (elektroner, protoner, nøytroner..). Her studerer vi elektroner bundet til atomer. Må vi ta hensyn til elektroner i Oslo om vi skal symmetrisere bølgefunksjonen til atomer vi studerer i et laboratorium i Bergen? Svaret på dette er nei. Effekter som følger av symmetriseringenskravet vil bare gjøre seg gjeldende når det er signifikant overlapp mellom de to individuelle bølgefunksjonene, $\psi_a(x)$ og $\psi_b(x)$. Man kan sette inn forventningsverdiene til posisjon av de to tilstandene, og skrive $\psi_a(x - \bar{x}_a)$ og $\psi_b(x - \bar{x}_b)$. Symmetrisering betyr å lage bølgefunksjonen 5.2, og kvadrere den. Effekter av symmetriseringen vil bare gjøre seg gjeldende dersom $\int \psi_a^*(x - \bar{x}_a)\psi_b(x - \bar{x}_b)dx$ er signifikant forskjellig fra null.

Men når vi konstruerer en antisymmetrisk bølgefunksjon for fermioner, f.eks. to elektroner så må vi også ta hensyn til *alle* kvantetall, ikke bare de som kan tilordnes de romlige bølgefunksjonene. Elektronet kan være i to forskjellige spinntilstander, spinn *opp*, med $m_s = \frac{1}{2}$ og spinn *ned* med $m_s = -\frac{1}{2}$.

La oss se på grunntilstanden til nøytralt helium, som har to elektroner. Begge får plass i den laveste energitilstanden, for denne tilstanden kan realisres på to måter. Den kombinerte romlige tilstanden er

$$\psi(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_2) = Ke^{-\frac{2r_1}{a}}e^{-\frac{2r_2}{a}}$$

Denne er symmetrisk ved ombytte av elektronene, men antisymmetriseres ved hjelp av elektronspinnene.

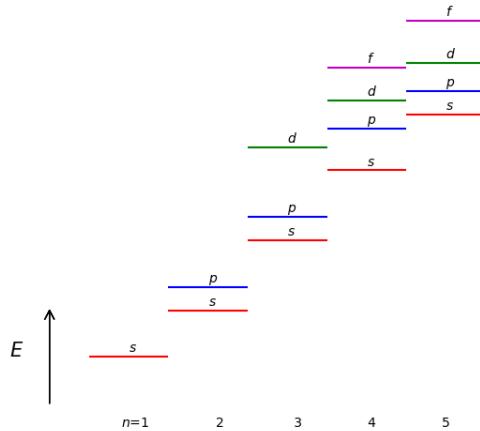
$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = Ke^{-2\frac{r_1+r_2}{a}} \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_-(1)\chi_+(2) - \chi_-(2)\chi_+(1)] \quad (5.3)$$

Her må vi legge til at de to spinntilstandene må kombineres til totalspinn, $j = 0$. Dette kalles *singlett*-tilstanden. Det fins også tre triplett-tilstander som alle har $j = 1$, men tre muligheter for m_j . Disse er alle symmetriske ved partikkelombytte. Antisymmetriseringen må foregå ved å konstruere antisymmetriske summer av romlige bølgefunksjoner. Bølgefunksjonene som benyttes her, og for atomer med flere elektroner er gjerne egenfunskjonene funnet for hydrogenatomet.

Man tar utgangspunkt i produktfunksjonen $\psi_a(1)\psi_b(2)$ og antisymmetriserer som forkart over. Den kombinerte bølgefunksjonen lar seg beskrive som en 2×2 determinant. Den antisymmetriske bølgefunksjonen blir:

$$\psi_A(1, 2) = \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) \end{vmatrix}$$

Denne determinant kalles *Slater determinanten*, og kan generaliseres til systemer med mange elektroner. Om man vil beskrive et atom med N elektroner,



Figur 5.1: Ordning av orbitalene etter energinivå i nøytrale atomer. Ingen eksakt skala. 4s-orbitalen fylles før 3d tilstandene.

så er det naturlig å benytte de N bølgefunktjonene med lavest energi. På grunn av degenerasjon så er det uklart hvilke disse vil være. Men det viser seg at skallmodellen beskriver atomene godt!

5.2 Degenerasjon og skallmodell

Schrödingerligningen for hydrogenatomet (eller et annet coulombpotensial) gir som sagt samme energi, E_n for n mulige tilstander av banespinnet med kvantetall $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Hver verdi av l har $2l + 1$ mulige verdier av z-komponenten, m , av banespinnet. I tillegg så har elektronet spinn, $s = 1/2$, og kan være i to tilstander for hver l . Dermed har vi degenerasjon

$$g_n = \sum_{l=0}^n 2(2l + 1)$$

Vi har altså $g_1 = 2$, $g_2 = 2 + 6 = 8$ Dette gir grunnlaget for skallmodellen for atomer. Det fins to tilstander med samme laveste energi, og vi kan dermed ha to elektroner med denne energien, i de to forskjellige tilstandene som er tilgjengelig. For den nest laveste energien finns det åtte tilstander, og det er dermed plass til åtte elektroner med denne energien. Elektronkonfigurasjonen

til elementene angis med notasjonen som beskrevet i seksjon 4.2.3 med en øvre indeks som angir antall elektroner i tilstanden. Elektronkonfigurasjonen til de første elementene finner man greit i tabeller på nettet.... Det viser seg at de kjemiske egenskapene til elementene i stor grad er bestemt av antall elektroner som fins i det høyestliggende skallet, altså de med høyest n . Når et skall for gitt hovedkvantetall er fylt opp, vil et nytt skal fylles opp, med kjemiske egenskaper som ligner dem med samme antall elektroner i ytterste tall. Om man kartlegger disse egenskapene som funksjon av protontall så får man en periodisitet. Elementene kan ordnes i *Det periodiske system*¹. Her angir hver rad en *periode*, og hver kolonne en *gruppe* av elementer som har nokså like kjemiske egenskaper.

Gruppen med fullt elektronskall er spesielt stabilt. Dette er edelgassene, og kalles 'gruppe 8'.

Gruppen med kun ett elektron ytterst kalles 'gruppe 1'. Disse er kjemisk svært reaktive, og avgir lett sitt ytterste elektron i en *ionebinding*. Elementer i 'gruppe 7' er også svært reaktive. De mangler ett elektron i ytterste skall. Et elektron utenfra kan 'tette hullet'. Godt kjent er koksalt, NaCl. Her har et element fra gruppe 1 (Natrium) bundet seg til et element fra gruppe 7 (Klor) ved at det ytterste elektronet i natrium har hoppet over til den ledige plassen i kloratomet. Det resulterende molekylet har en ubalanse i ladningsfordelingen og fungerer som en elektrisk dipol. Dermed kleber molekylene seg sammen til et stabilt fast stoff ved romtemperatur.

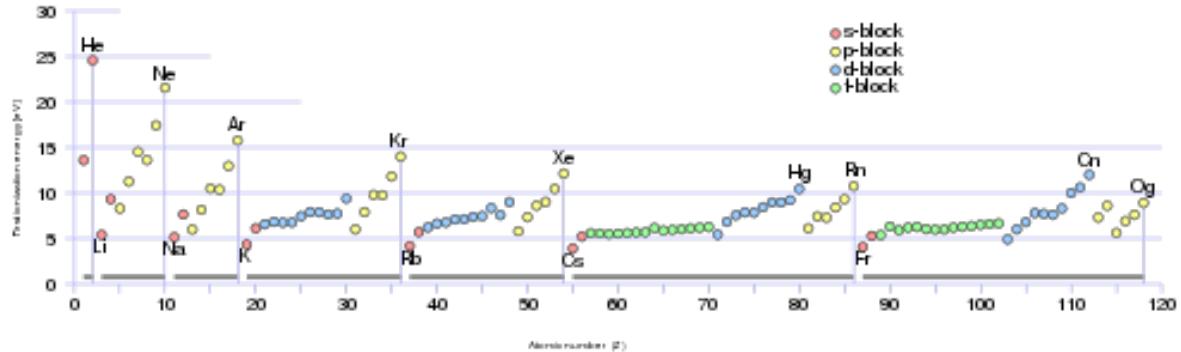
Hydrogen, oksygen og nitrogen binder seg sammen to og to på måter som gjør at de ytterste elektronene fra begge atomene deles likt i s.k. *kovalente bindinger* (i h.h.v. enkel, dobbel og trippel binding). Dette gir nøytrale molekyler uten særlig elektrisk dipolmoment. Dermed klumper disse molekylene seg ikke så enkelt sammen. H_2 , O_2 og N_2 er gasser ved romtemperatur.

For lave atomtall stemmer det godt at skallene for gitt hovedkvantetall fylles helt opp før et nytt hovedkvantetall påbegynnes. Hvis degenerasjonen var fullstendig, så ville jo alle de $2n^2$ tilstandene i et skall ha samme energi. Men dette gjelder bare når det er ett elektron bundet til kjernen. I nøytrale atomer er det litt oppsplitting av nivåene. Energien øker med økende angulært moment. Et energinivå karakterisert ved n og l kalles et *orbital*.

Er det angulære momentet høyt nok, så vil energien for tilstand n, l ligge over energien til tilstand $n + 1, l = 0$. Dermed vil en ny periode påbegynnes før skall nr n er helt fullt.

Figur 5.1 angir skjematisk hvordan nivåene er ordnet. (figurkonsept fra [9]) Første periode har to elementer. Neste periode har åtte elementer som

¹Plansjen med elementene i det periodiske systemer er så enkelt tilgjengelig i andre lærebøker og på nettet at vi ikke gjengir den i denne boka.



Figur 5.2: Ionisasjonsenergi for elementene. Fra Wikipedia. Verdier for elementer med atomnummer over 104 er teoretiske beregninger

forventet ($2n^2 = 8$). Deretter skulle man forvente en periode med $2 \times 3^2 = 18$ elementer. Men dette er ikke tilfelle. $3d$ -nivået ligger høyere enn $4s$. Dermed fylles tredje periode ut med de seks $3p$ tilstandene. Siste element er edelgassen Argon. Så påbegynnes fjerde periode med de to $4s$ før de ti $3d$ tilstandene, og til slutt de seks $4p$ tilstandene.

Det fins unntak i systemet. Det er plass til 10 elektroner i et d -orbital, og fylles etter at $4s$ nivået er fylt opp. Men man finner ikke 4 eller 9 elektroner i $3d$ og $4d$ orbitalene. Isteden vil ett av elektronene fra $4s$ og $5s$ ta plass i d -orbitalet. For eksempel er elektronkonfigurasjonen til de fem ytterste elektronene i element nr 23, Vanadium slik: $3d^34s^2$ mens de seks ytterste elektronene i element 24, Krom (Cr) har konfigurasjon $3d^54s^1$. Metall-legeringer som inneholder Krom og Vanadium er kjent for å være ekstra harde. Kan det ha noe med den spesielle elektronkonfigurasjonen å gjøre?

Elektronkonfigurasjonen til elementene angis etter orbitaler. Som eksempel nevner vi element nr 14, silisium (Si). Det har elektronkonfigurasjon $1s^22s^22p^63s^23p^2$. Man finner enkelt det periodiske system og tabell med elektronkonfigurasjon i lærebøkene eller på nettet, for eksempel i Wikipedia. Konfigurasjonen følger godt det som framkommer fra figur 5.1, med unntakene nevnt over.

5.2.1 Ionisasjonsenergi - elektronaffinitet

To begreper som benyttes til å beskrive hvor reaktive elementene er henholdsvis ionisasjonsenergi og elektronaffinitet. Ionisasjonsenergi er den ener-

gien som skal til for å frigjøre et elektron fra atomet, og lage et positivt ion. Grunnstoffene med fulle skall har høyest ionisasjonsenergi, mens grunnstoffene med ett elektron i det ytterste skallet har lavest ionisasjonsenergi. Om ionisasjonsenergien plottes som funksjon av atomnummer, så ses en helt klar periodisitet, samme periode som man finner i det periodiske system(se figuer5.2).

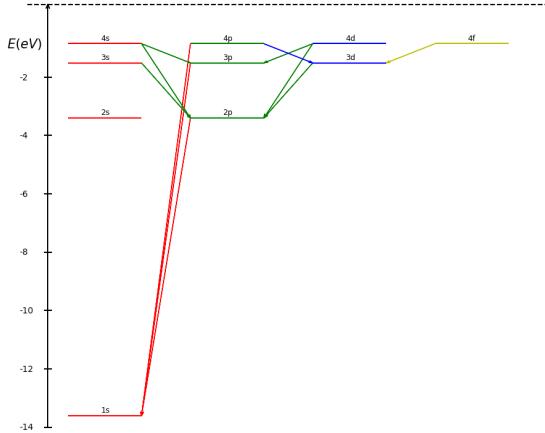
Elektronaffinitet er det motsatte, nemlig den energien som frigjøres når et nøytralt element tiltrekker seg et elektron og blir til et negativt ion. Det er elementer som mangler ett eller elektroner til å få fullt skall som har høyest elektronaffinitet, altså elementene fra gruppe 7 og 6 i det periodiske system. Disse elementene fins sjeldent eller aldri som frie, nøytrale atomer i naturen. Istedent finns de bundet til andre atomer (f.eks O_2 og $NaCl$). Disse toatomige molekylene er altså i en lavere energitilstand enn de er i som to frie, nøytrale atomer).

5.3 Strålingsoverganger, spektroskopi

Det er studier av emisjons- og absorpsjonsspektra som er grunnlag for informasjonen om atomstruktur skissert i forrige delkapittel. Som Bohr antok så foregår strålingsovergangene ved emisjon av enkeltfotoner. Noen overganger foregår langt hyppigere enn andre. Dette henger sammen med bevaring av angulært moment. Fotoner har nemlig et egenspinn, $s_\gamma = 1$ (altså $S_\gamma^2 = s_\gamma(s_\gamma + 1)\hbar^2 = 2\hbar^2$). Når et foton emitteres i en strålingsovergang så tar det med seg en enhet med angulært moment. Dermed endres også det angulære momentet, l , til slutt-tilstanden med en enhet: $|\Delta l| = 1$. I tillegg endres jo hovedkvantetallet på grunn av endring i energinivå.

Fotonet er et boson, og følger dermed ikke Paulis eksklusjonsprinsipp. Dessuten har vi ikke antallsbevaring av fotoner. Det vil skapes fra et elektron ved deeksitasjon, og vil absorberes i et elektron ved eksitasjon. Dette har vi sett demonstrert i fenomener som fotoelektrisk effekt og bremsestråling, og altså i strålingsoverganger. I utgangspunktet finns det tre spinnkomponenter for en partikkell med spinn 1. Men det viser seg at partikler som beveger seg med lyshastighet ikke kan ha spinnkomponent $m_j = 0$ (når z-akse er valgt langs bevegelsesretningen). Derfor har fotonet bare to muligheter for spinnkomponent $m_l = -1$ eller $m_l = 1$. Dette svarer til at lys i vakuum er en transvers bølge med to polarisasjonsretninger, og ingen longitudinell komponent.

Når et foton sendes ut fra en eksitert tilstand tar det altså med seg et angulært moment. Bevaring av angulært moment tilsier dermed at banespinntilstanden til elektronet også endres med en enhet Δl . Dermed har vi



Figur 5.3: Energienivåer i hydrogenatomet med noen av de lovlige strålingsovergangene tegnet inn.

følgende utvalgsregel for strålingsoverganger:

STRÅLINGSOVERGANGER

Lovlige strålingsoverganger endrer elektronets tilstand med en enhet i angulært moment,

$$\Delta l = 1$$

for eksempel fra en *p*-tilstand til en *s*-tilstand.

Figur 5.3 viser spekter for strålingsoverganger i hydrogenatomet.

5.3.1 Sentralfelt-tilnærming, skjerming

I atomer med fler elektroner så vil de ytterste elektronene ikke føle hele kjerneladningen. Elektronene innenfor skjermer for kjernen. Litium har tre elektroner, altså ett i ytterste skall, i tilstand 2s. I den mest naive tilnærmingen ligger 1s-tilstanden på en energi $-13,6 \times Z^2 = -122,4 \text{ eV}$. Neste energienivå for ett enkelt elektron bundet til litium er $-122,4/4 = -30,6 \text{ eV}$. Men siden det er to elektroner innenfor føler dette elektronet mindre ladning. Med full skjerming vil elektronet føle en effektiv kjerneladning på $3-2=1$. I så fall skulle 2s energienivået for nøytralt litium være $-13,6/4 = 3,4$

elektronvolt. Istedent ligger energinivået på -5,2 eV. Skjermingen er ikke fullstendig. Istedent kan man beregne en 'effektiv' ladning som dette elektronet føler utfra:

$$E_{2s} = -13,6 \frac{Z_{eff}^2}{4} = -5,2eV$$

Dette gir $Z_{eff} = 1,24$.

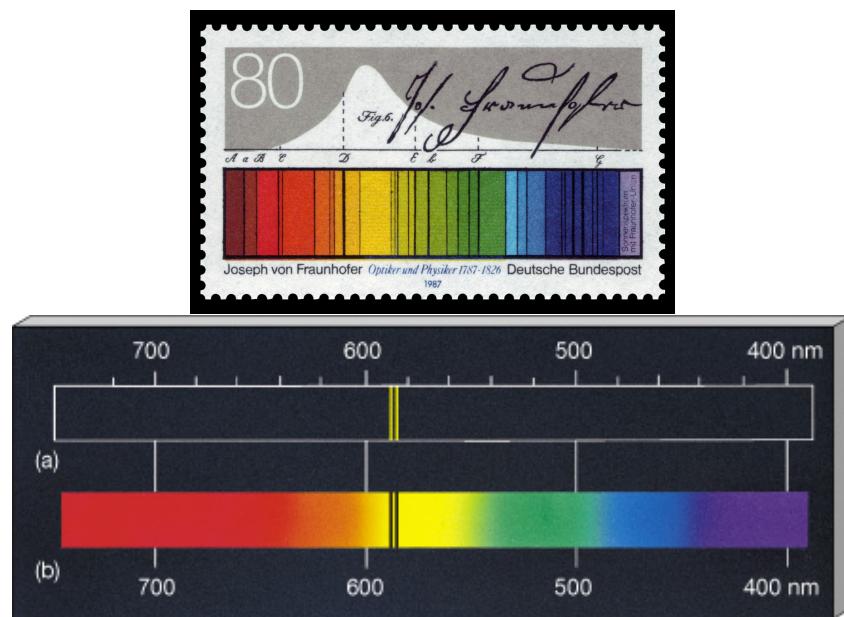
Elektroner frastøter også hverandre når de er i samme romlige tilstand. Energinivået for elektronet til et positivt helium-ion (He^+) er på -54,4 eV. Men eksitasjonsenergien til helium er på omtrent 38 eV, så energinivået til de to elektronene ligger betydelig høyere enn når kun ett elektron er bundet til kjernen.

I den grad det er riktig å beskrive oppsplitting av energinivåene som skjerming, så må man si at skjermingen er mer effektiv for økende spinn slik det framgår av fig 5.1. Dette gir strålingsoverganger mellom forskjellig l -tilstander med samme hovedkvantetall. Her er nivåforskjellene gjerne mindre enn for overganger melom forskjellige n .

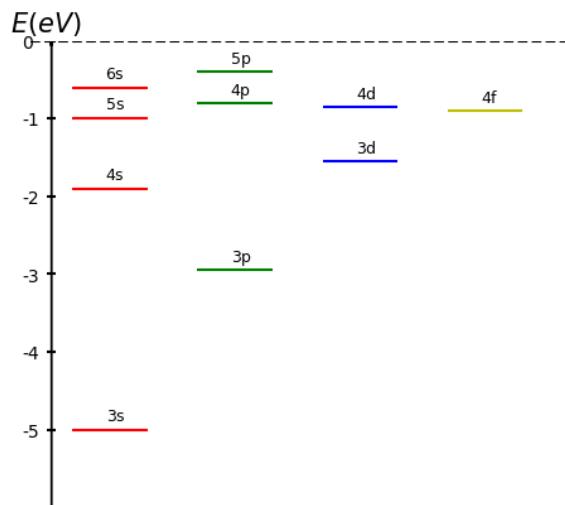
Joseph Fraunhofer oppdaget absorpsjonslinjer i lyset fra sola. Fig 5.4 viser spekteret og absorpsjonslinjene han målte. Han identifiserte linjene med bokstaver, A,B,C,D osv. D-linjene viser seg å komme av overganger mellom tilstander i Natrium. Figuren viser også emisjonsspekteret til Natrium. Vi ser at vi har transisjoner begge veier. Tilførsel av energi gir absorpsjon, og eksiterte tilstander mister energi gjennom emisjon av fotoner med de samme bølgelengdene som vi finner i absorpsjonsspekteret. Grunntilstanden til natrium har de to innerste skallene fylt, og ett elektron i ytterste skall, i 3s-tilstand. Spektroskopien oppstår som følge av energinivåene som dette elektronet kan ha. Ionisasjonsenergien er 5,12 eV. fig. 5.5 viser energispekteret for de laveste tilstandene.

Vi ser at 3p-tilstanden ligger betydelig høyere enn 3s. og elektronet eksisteres opp til det nivået ved absorpsjon av en bølgelengde på 589 nm. Natrium kan oppvarmes slik at eksitasjoner oppnås. Da vil de-eksitasjoner medføre utsendelse av lys ved denne bølgelengden. Pieter Zeeman studerte dette lyset, og oppdaget splittelse av linjene når Natriumlampen sto i et magnetfelt. I emisjons/absorpsjonsspekteret finner man linjer svarende til $\Delta l = 1$. Fraunhofers 'D-linjer' er forårsaket av overganger mellom 3p og 3s. Man så tidlig at D-linjen var splittet i to. Dette skyldes spinn-banekoblingen som splitter opp p-tilstanden i to, med totalspinn på h.h.v. $j = 1/2$ (som gir $p_{1/2}$ tilstanden) og $j = 3/2$, som gir $p_{3/2}$ tilstanden.

Når magnetfelt settes på så fant Zeeman enda mer oppsplitting, se figur 5.6. $p_{1/2}$ og $s_{1/2}$ -tilstandene er splittet i to, og det blir dermed fire mulige overganger mellom de fire energiene. Den andre linja blir splittet i seks. Når $3p_{3/2}$ -nivået er splittet i fire, og $3s_{1/2}$ -nivået er splittet i to, så skulle man

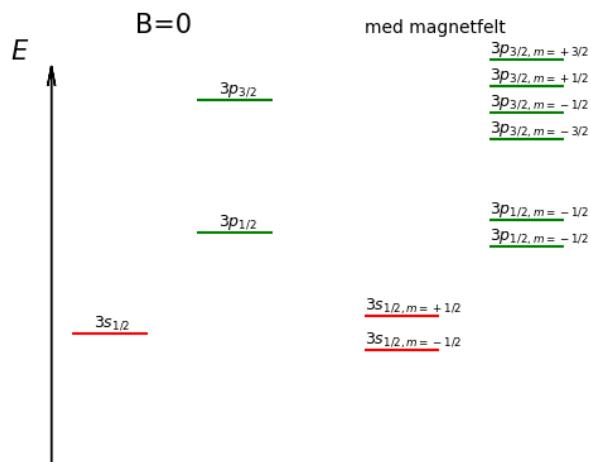


Figur 5.4: Lys fra sola med absorbsjonsspektrum som kolorert av Fraunhofer selv. Fra Wikipedia. Nederst: Na-absorbsjonsspektra, og emisjonsspektra. Fra <https://chemistry.stackexchange.com/>



Figur 5.5: Energinivåer til det ytterste elektronet i natrium, når finsplitting ikke er vist.

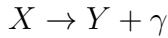
kanskje tro at dette gav opphav til åtte nye linjer. Men fotonet har spinn lik 1. Dermed må vi ha $|\Delta j| = 1$ i overgangene. Overganger fra $m_j = +3/2$ til $m_j = -1/2$ og $m_j = -3/2$ til $m_j = +1/2$ bryter bevaring av angulært moment, og det gjenstår seks mulige overganger.



Figur 5.6: Zeeman-effekt og oppsplittning av 'D-linjene' i Natrium. Øverst ses Zeemans opprinnelige bilde av linjene (fotografisk film). Nederst ses energinivåene med og uten magnetfelt.

5.3.2 Tids-symmetri

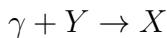
I diskusjonen over har vi diskutert både emisjons- og absorbsjons-spektre som om vi snakket om samme fenomen. At det er en sammenheng blir litt klarere om ser på utviklingen av en prosess som funksjon av tiden:



I kvantemekanikken skal prosessen kunne beskrives av en bølgefunksjon

$$\Psi(t, x)$$

Hvis vi var istrand til å kjøre prosessen baklengs i tid så er ville prosessen sett slik ut:



Denne må kunne beskrives med samme bølgefunksjon, men med reversert tid.

$$\Psi(-t, x)$$

Man kan også merke seg at hvis man reverserer tiden to ganger så må man komme tilbake til den opprinnelige prosessen. Formelt kan reversjon av tid defineres med en operator \hat{T} , som virker slik:

$$\hat{T}\Psi(t, x) = \Psi(-t, x)$$

med krav

$$\hat{T}^2\Psi(t, x) = \hat{T}\Psi(-t, x) = \Psi(t, x)$$

altså $\hat{T}^2 = \hat{I}$

Boltzmann og Maxwell inførte begreper om 'detaljert balanse' i forbindelse med en mikroskopisk beskrivelse av termodynamiske prosesser. Einstein benyttet samme prinsipp for å utvikle teori om emisjon og absorbsjon av stråling. Han delte opp sannsynligheten for en overgang i to:

$$P_{XY} = A_{XY}B_{XY}$$

mens

$$P_{YX} = A_{YX}B_{YX}$$

Dette er kalt for Einsteins A og B koeffisienter. Den underliggende symmetrien for tidsreversjon ble tatt hånd om ved å anta $B_{XY} = B_{YX}$, mens A-koeffisientene beskriver energiforhold og annet som kan gi forskjeller i sannsynlighet for de to prosessene. En slik beskrivelse viser seg å være nyttig ved studier og beregninger knyttet til mange fenomener der strålingsoverganger er viktig, som LASER (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation), sort stråling og kjernemagnetisk resonans. Dette vil diskuteres i senere kapitler. Sort stråling er også diskutert i kapittel 2.

5.4 Oppgaver

1. Litiumatomet har 3 elektroner. Kan vi (i prinsippet) peke på ett av elektronene og si at det er dette som er i $2s$ -tilstanden? Begrunn svaret. Skriv ned den antisymmetriserte grunntilstanden til de tre elektronene i Litiumatomet.
2. Hva blir grunntilstandsenergien til elektronet i et He^+ -ion?
3. Hva er bølgelengden til strålingen fra et He^+ -ion når elektronet faller fra en $2p$ til en $1s$ tilstand?
4. Grunntilstandsenergien i et nøytralt He-atom finnes til nullte orden ved anta at begge elektronene har den energien de ville hatt dersom de ikke vekselvirket. Til første orden kan man se på systemet som om elektronene skjerner for kjerneladningen, slik at hvert elektron opplever et effektivt Coulombpotensial fra en redusert kjerneladning Z_{eff} istedenfor potensialet som elektronet i He^+ -ionet opplever. Ionisasjonsenergien for et nøytralt He-atom (energien som skal til for å lage et He^+ ion og et fritt elektron) er 39,5 eV. Hva blir verdien av Z_{eff} i denne modellen?
5. En atomær overgang fra en p til en s -tilstand gir utsendelse av et foton med bølgelengde på 575,050 nm. Når atomet settes i et magnetfelt observeres det tre linjer med bølgelengder som er 0,0440 nm fra hverandre. Hva er verdien av magnetfeltet?
6. I skallmodellen finner vi at s -tilstandene ligger lavere i energi enn p -tilstandene (det kreves mer energi for å frigjøre et elektron fra en s -tilstand enn fra en p -tilstand). Gi en kvalitativ forklaring på dette ut fra bølgefunksjonene vist i fig 4.4
7.
 - a) Skriv ned elektronkonfigurasjonen for natrium i skallmodellen. Hvilke kvantetall har elektronet med høyest energi ('elektronet i det ytterste skallet')?
 - b) Eksitasjonsenergien for å lage et Na^+ -ion er 5,13 eV. Anta at dette elektronet befinner seg i et Coulombpotensial med 'kjerneladning' tilsvarende selve kjernen samt alle elektronene som befinner seg innenfor. Hva blir den effektive kjerneladningen?
 - c) En natriumlampe sender ut et karakteristisk gult lys med bølgelengde på 589 nm. Dette skyldes overgang fra tilstanden $3p$ til $3s$ -tilstanden. Hvilken energiforskjell svarer dette til. Hva blir den effektive kjerneladningen som $3p$ -tilstanden ser?

- d) Hva hadde 3s og 3p energiene vært dersom det var fullstendig skjerming slik at vi hadde $Z_{eff} = 1$?
- f) D-linjen (overgangen fra 3p til 3s) i natrium er splittet opp. Det er to bølgelengder 588,9950 nm og 589,5924 nm. Hvor stor energiforskjell svarer dette til? Hvor stor vil denne oppsplittingen være i henhold til ligning 4.30?

Kapittel 6

Molekyler og molekylbindinger

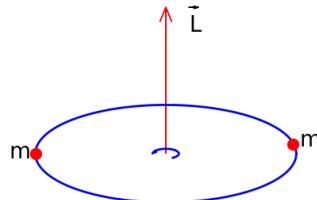
6.1 To-atomige bindinger

Det fins mange toatomige molekyler i naturen. O_2 , H_2 , N_2 , CO for å nevne noen. De nevnte molekylene eksisterer som gasser av frie molekyler, og de klumper seg ikke sammen i væsketilstand eller fast form ved romtemperatur. Bindingene mellom de to atomene er *kovalente*. En del andre stoffer som beskrives som bygd opp som bindinger mellom to atomer i *ionebindinger*. Resultatet er da gjerne en væske eller et fast stoff. stoffer

6.1.1 Kovalente bindinger

Det viser seg at kjemien til stoffene kan beskrives relativt god ved hjelp av elektrontistandene i det ytterste skallet i skallmodellen for atomene. Når det er fullt så ligger alle elektronene i nokså dype tilstander og vi får lite reaktive atomer, nemlig edelgassene Helium, Neon, Argon osv. Nå det ytterste skallet ikke er fullt, vil atomene søke å binde seg til andre atomer, slik at de ytterste elektronene danner ett romlig energiskall (ett hovedkvantetall). To atomer bindes sammen på en slik måte at det ytterste skallet er det samme for begge atomer. Det enkleste er når elektronene i to hydrogenatomer finner sammen i samme romlige tilstand. De har da forskjellig spinntilstand slik at Pauliprinsippet er oppfylt. Her er det full symmetri mellom de to elektronene og de er bundet sammen i en kovalent binding, mellom to nøytrale atomer.

Oksygen har seks elektroner i det ytterste skallet (elektrontistandene er $2s^22p^4$). Her blir det laget en *dobbeltbinding* mellom to elektroner fra 2p tilstandene i hvert atom. Elektronene ksn oppfattes som å være i parrede tilstander med motsatt rettet spinn. Man kan også si at fire elektroner deles mellom de to atomene slik at begge atomene har fullt skall (med $n=2$).



Figur 6.1: To legemer med avstand r roterer rundt hverandre. Her vist for like masser. Den reduserte massen er da $\frac{1}{2}m$, som kan beskrives som om den roterte i avstand r rundt et fast punkt.

Nitrogen har fem elektroner i ytterste skall. Her må tre elektroner fra hvert atom deles, og vi får en trippelbinding. Av dette blir N_2 svært stabilt, og nitrogen er en svært lite reaktiv gass.

Luft består som kjent av ca 78% N_2 og 22% O_2 . Mens oksygen reagerer lett med andre stoffer, og fører til oksydering, så holder nitrogengassen seg stabil. For å øke holdbarheten til matvarer og andre ting, så pakkes de ofte inn i en atmosfære av ren nitrogengass. Ren nitrogengass vil heller ikke brenne eller eksplodere (som jo kan forklares som hurtig oksydering). Man skulle tro at den derfor er helt ufarlig. Dette er en sannhet med modifikasjoner! Om nitrogengass skulle sive ut i et rom, og fortrenge oksygenet, så kan det hende at personer rommet besvimer og dør av oksygenmangel uten å merke noe som helst.

Vi skal her diskutere rotasjons- og vibrasjonstilstandene til disse molekylene ved bruk av kvantemekanikk.

6.1.2 Rotasjonstilstander

Om det ikke er alt for mye energi på molekylene så kan vi se på dem som atomer som roterer rundt hverandre med fast avstand som vi kan kalle r . Vi innfører redusert masse:

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

For like masser, $m_1 = m_2 = m_A$, har vi $m_r = \frac{1}{2}m_A$. Vi kan da studere banespinnet til systemet som om det var ett objekt med masse m_r som roterer

i avstand r rundt et fast punkt. Banespinnen er

$$\vec{L} = m_r \vec{r} \times \vec{v} = m_r r^2 \vec{\omega}$$

Her er $\vec{\omega}$ vinkelhastigheten til rotatoren. Vi kan innføre treghetsmomentet om den fiktive faste aksen, med bare ett ledd i den generelle formelen

$$I = m_r r^2$$

Den samlede kinetiske energien til de to molekylene er

$$E = \frac{1}{2} m_r v^2 = \frac{1}{2} m_r (r\omega)^2 = \frac{L^2}{2I}$$

Kvantisering av banespinn har vi diskutert i detalj for hydrogenatomet. Resultatet er

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1)$$

Vi kan dermed skrive direkte ned energinivåene til de forskjellige rotasjons-tilstandene:

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \quad (6.1)$$

Atomene i O_2 -molekylet har en avstand på 0,121 nm. Det er 16 nukleoner i et oksygenatom, så den reduserte massen er $m_r \approx 8$ u (atomære masseenheter) For $l = 1$ får vi dermed

$$E = \frac{(\hbar c)^2}{16m_u c^2 (0,121\text{nm})^2} = \frac{197^2 eV^2 nm^2}{12 \times 931,5 MeV \times 0,121^2 nm^2} = 1,78 \times 10^{-4} eV$$

Overganger mellom nabotilstander skjer i hopp på

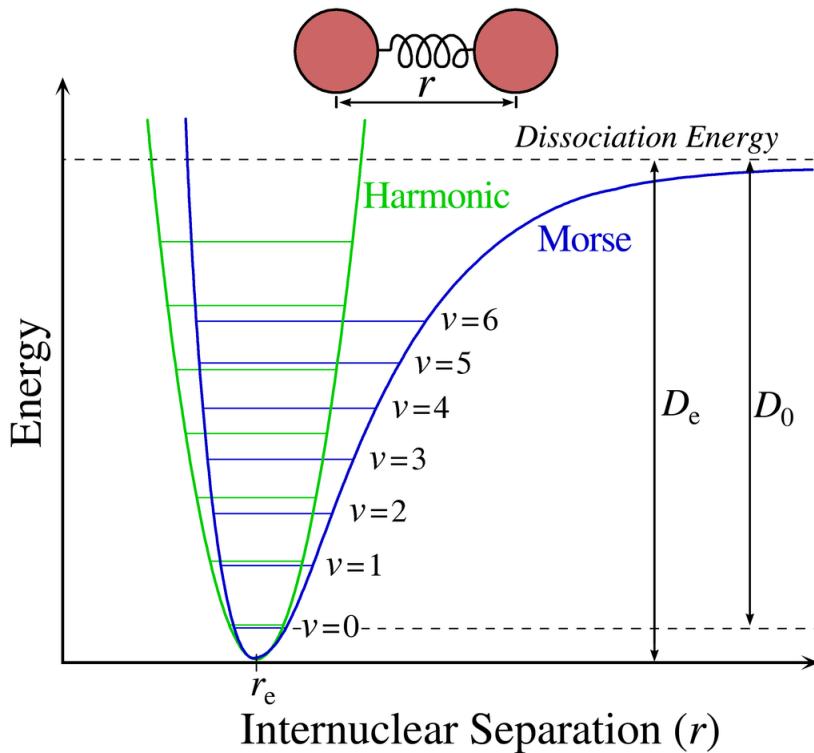
$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2I} [(l+2)(l+1) - l(l+1)] = \frac{\hbar^2}{2I} (2l+2)$$

Bølgelengdene på den emitterte strålingen vil være på noen millimeter.

6.1.3 Vibrasjonstilstande

Atomene i de toatomige molekylene holdes sammen ved kovalent binding mellom de ytterste elektronene i atomene. Bindingene holder atomene i en likevektsposisjon der hvor tiltrekningskraftene er balansert av frastøtning mellom de to negativt ladde elektronskyene innenfor. En måte å beskrive potensialet mellom atomene på er Morse-potensialet:

$$V(r) = D \left(1 - e^{-a(r-r_e)^2} \right) \quad (6.2)$$



Figur 6.2: Sammenligning av Morse-potensial og harmonisk oscillator. Fra Wikipedia

Vi har $V(r) = 0$ for $r = r_e$ og $V(r)$ går mot D når avstanden går mot uendelig. r_e er likevektspunktet, og D kalles deassosieringsenergien. Parameteren a forteller noe om styrken i bindingene. For små avvik fra likevekt kan vi skrive $e^{-a(r-r_e)^2} \approx 1 - a(r - r_e)^2$, slik at

$$V(r) = Da(r - r_e)^2$$

Her kjenner vi igjen Harmonisk-oscillatorpotensialet (se lign. 3.20 og 3.21), med $Da = \frac{1}{2}m_r\omega^2$! Figur 6.2 viser potensialet. Harmonisk oscillatorpotensialet beskriver godt vibrasjonene, som om atomene henger sammen i en fjær. Energinivåene er

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

der $\omega = \sqrt{k/m_r}$. Vi ser at fjærkonstanten i potensialet er gitt som $k = 2Da$. Typiske verdier for $\hbar\omega$ ligger mellom 0,2 og 0,3 elektronvolt. Sprangene er altså ca 1000 ganger større enn sprangene mellom rotasjonstilstandene.

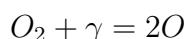
6.1.4 Strålingsoverganger i molekyler

I overganger mellom energinivåene ved utsendelse av et foton må vi huske at fotonet alltid tar med seg angulært moment. Strålingsovergangene er dermed overganger mellom forskjellige rotasjonstilstander, vanligvis med $\Delta l = 1$. Typiske bølgelengder er gitt ved

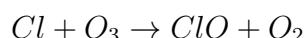
$$\frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{ nm eV}}{\lambda} \approx 0,25 \text{ eV}$$

noe som gir $\lambda \approx 5000 \text{ nm}$. Ut fra dette kan vi lære noe om styrken av bindogene ('fjærkonstanten'). Synlig lys har bølgelengder fra 450 til 600 nanometer. Siden atmosfæren stort sett består av nitrogen- og oksygen-molekyler er den dermed gjennomsiktig ettersom disse molekylene ikke absorberer lyset¹.

Det er interessant å se på hvilken energi som skal til for å lage frie oksygenatomer, reaksjonen



Minsteenergien, separasjonsenergien, er på omtrent 5,1 eV. Fotoner med bølgelengde lavere enn omtrent 240 nm vil forårsake denne reaksjonen. Dette er lys i UV-området. Høyt oppe i atmosfæren vil solas UV-lys forårsake denne reaksjonen. De frie oksygenatomene vil i sin tur reagere med oksygenmolekyler og lage oson, O_3 . Dette betyr at oson ikke forsvinner, det vil stadig lages nyt oson høyt oppe i atmosfæren. Men en klasse tunge, stabile gasser, CFC, KloroFluoroKarboner, som var mye brukt i kjøleindustrien og annet; forårsaker også reaksjoner med oson. Disse gassene brytes ikke ned før de reagerer med UV lys i stratosfæren eller deromkring. Da dannes bl. a fritt klor, og vi får reaksjonen

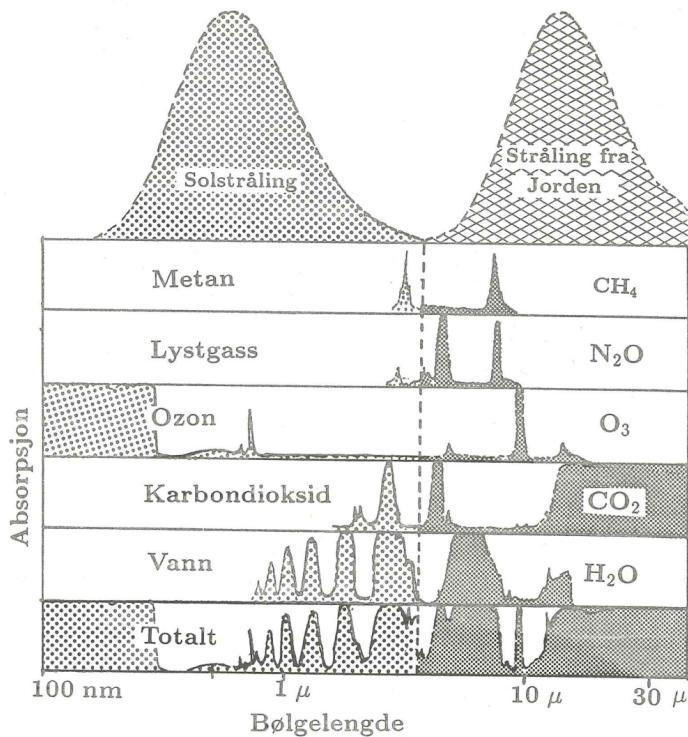


. Dette har vært med å forrykke balansen, og redusert mengden oson. Nå er CFC-gasser forbudt. Dette har vært nokså uproblematisk for fullgode erstatter har vært enkle å finne og ta i bruk.

Molekyler med fler enn to atomer, som Oson og CO_2 , har kompliserte og gjerne brede absorpsjons/emisjonsbånd. Oson høyt oppe i atmosfæren er viktig for absorpsjon av UV-lys i et bredt bølgelengdeområde mellom 200 og 350 nm, og fungerer som beskyttelse mot UV-lys for oss på bakken.

Absorpsjonspekteret til CO_2 er i det infrarøde området. Iblant kalles strålingen i dette området for varmestråling. Jorden kvitter seg med varme

¹Istedent spres sollyset på gassmolekylene som sådan gjennom s.k. Rayleigh-spredning. I bølgelengdeområdet for synlig lys er spredningsvinkelen gjennomgående størst for korte bølgelengder, noe som forklarer fargen på himmelen.



Figur 6.3: Strålingsspektere fra sola og jorda, og absorpsjonsspektra for noen av de viktigste atmosfæregassene. Vi ser at det er klar separasjon mellom strålingsspekturene til den varme sola og den mye kaldere jorda. Absorpsjonspekturene til de forskjellige gassene er skravert forskjellig i to områder, for å vise om det er hovedsakelig solstråling eller jordstråling som absorberes. For de Fra [10]

ved infrarød stråling. En del av dette vil absorberes av CO_2 i atmosfæren, og sendes tilbake igjen mot jorda, og bidra i temperaturbalansen. Vanndamp har samme effekt, men imotsettning til CO_2 har mengden vanndamp i atmosfæren holdt seg relativt stabil over tid (i flg. [10]).

6.2 Ionebindinger

Ionebindinger intreffer mellom atomer med stor asymmetri mellom antall elektroner i ytterste skall. De mest kjente eksemplene er bindinger mellom et atom fra gruppe I og et fra gruppe VII i det periodiske system, for eksempel mellom Natrium (Na) og Klor (Cl). Da vil den laveste energitilstanden dannes

ved at det enslige elektronet i natrium (i 3s tilstand) knyttes til de syv ytterste elektronene i kloratomet slik at det skallet med $n=3$ blir fullt. Dette blir til et atom med stor asymmetri i ladningsfordelingen og man kan se på det som en binding mellom et Na^+ ion og et Cl^- ion. Molekylet får stort dipolmoment, og kleber seg kett til andre molekyler med dipolmoment. Derfor opptrer ikke kombinasjonen NaCl som en gass ved romtemperatur. Isteden blir ansamlinger av NaCl -molekyler til et fast stoff med krystallstruktur - koksalt. Det står mer om dette i kapittelet om faste stoffer.

6.3 Van der Waals bindinger

Veldig mange nøytrale molekyler har en asymmetrisk ladningsfordeling som gir dem et dipolmoment. Dipolmomentet får molekylene til å klebe seg sammen i bindinger som ikke er så sterke som kovalente- eller ionebindinger. Det elektriske feltet rundt en elektrisk dipol avtar som $1/r^3$. Dermed avtar den potensielle energien mellom elektriske dipoler raskt med avstand, som $1/r^6$. H_2O har et dipolmoment som gjør at molekylene kleber seg sammen ved romtemperatur, slik at det blir en væske (vann). Når gasser kondenserer til væsker forklares væsketilstanden med Van der Waals-bindinger. Navnet på denne bindingstypen stammer fra den nederlandske fysikeren Johannes Van der Waals, som studerte molekylstrukturer til væsker.

6.3.1 Hydrogenbindinger

I molekyler som inneholder hydrogen, altså enkeltstående protoner så kan relativt sterke bindinger oppstå mellom protonene og et annet atom. Grunnen til dette er at hydrogenets elektron befinner seg langt unna protonet, og det gir lite skjerming av protonladningen. Feltet rundt protonet avtar mye langsmmere enn for dipoler. Når vann fryser til is så dannes hydrogenbindinger mellom H^+ atomene i de forskjellige vannmolekylene. De to heliksene i DNA-molekyles doble heliks holdes også sammen med hydrogenbindinger i stigetrinnene.

6.4 Oppgaver

1. Beregn den potensielle energien til et Na^+ og Cl^- molekyl som er bundet sammen med en avstand på 0,24 nm. Se på systemet som to punktladninger som er bundet sammen. Beregn treghetsmomentet til molekylet.

2. Molekylet får rotasjonsenergi. Beregn energien til første rotasjonstilstand (med $l = 1$).
3. Avstand mellom atomkjernene i et CO (Karbonmonoksyd)-molekyl er 0,1128 nm. Om det går over fra rotasjonstilstand med $l=2$ til $l=1$, hva blir frekvensen av fotonet?
4. Vibrasjonsnivåene i CO-molekylet har en avstand på 0,2690 eV. Hvilken bølgelengde svarer dette til ved overgang om emisjon av et foton? Som beskrevet vil en slik overgang også gi en endring i angulaert moment. Hvor stor 'korreksjon' til bølgelengde i overgangen fører dette til?
5. Med utgangspunkt i informasjonen i de forrige oppgavene, beregn fjærkonstanten i bindingen i CO-molekylet.

Kapittel 7

Statistisk fysikk

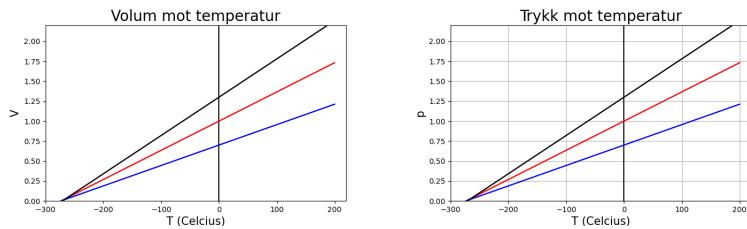
7.1 Bakteppe: termodynamikken

I løpet av 1700-tallet ble dampmaskiner utviklet til å bli nokså effektive, spesielt etter oppfinnelsene til James Watt. Hans oppfinnelser resulterte i svært forbedret utnyttelse av brenselet som var brukt for å omdanne varme til ordnet mekanisk energi. Det var behov for å forstå alle deler av prosessene involvert i omdanningen fra varme til mekanisk energi ('arbeid').

For det første: Hva er varme? Man var selvsagt klar over at det er forskjell på varme og kulde, og det er åpenbart at det er ønskelig å kunne kvantisere graden av varme, noe som ble kalt for temperatur. Det ble klart at forskjellige stoffer trenger forskjellige mengder brensel for å kunne varmes opp til samme temperatur. Stoffene absorberer åpenbart forskjellige mengder varme, (eller *calore* på italiensk) for å oppnå samme temperatur. En nokså plausibel idé var at varmen var noe som omsluttet de forskjellige stoffene på forskjellig vis for å gi samme temperatur.

Temperatur hadde heller ingen presis definisjon, men det kom etterhvert definisjoner basert på hvordan den ble målt. Temperaturen ble definert ut fra volumet til en væske, f.eks. kvikksølv, eller en gass. En gitt endring i temperatur førte til en tilsvarende endring av volum, vel og merke bare hvis trykket på væsken eller gassen kunne holdes konstant. Med oppfinnelsen av kvikksølvtermometeret (av Fahrenheit i 1714), som består av en væske i en forseglet glasskolbe kunne presise temperaturmålinger gjennomføres nokså enkelt ved å observere små volumendringer av væsken mens trykket på væsken holdt seg tilnærmet konstant.

Men hva *er* temperatur? I alle fall kunne man fastslå at et kaldt (lav temperatur) og et varmt (høy temperatur) legeme som ble plassert i nærheten av hverandre etterhvert ville anta samme temperatur. Dette kalles termody-



Figur 7.1: Stiliserte sammenhenger mellom temperatur for gassvolum ved konstant trykk og gasstrykk ved konstant volum

namikkens nullte lov:

TERMODYNAMIKKENS NULLTE LOV

To legemer som er i termisk kontakt med hverandre vil etter en stund anta samme temperatur. De vil være i termisk likevekt.

Man kunne også gi en indirekte definisjon av varme ved bruk av karakteristiske forskjeller stoffenes *varmekapasitet*, C . Temperaturendringen til et legeme er proporsjonal med tilført varme, ΔQ . Proporsjonalitetskonstanten er forskjellig for forskjellige typer materiale. Vi skriver

$$\Delta Q = C\Delta T \quad (7.1)$$

der C avhenger både av stoffmengde og stofftype.

Dette er ikke en bok om termofysikk, men det passer å nevne noen sammenhenger som ble funnet allerede på 1600-tallet ved studier av gasser ved forskjellig temperatur og trykk. Det var Robert Boyle som innførte konseptet *trykk*, p , som kraft pr. arealenhet, $p = F/A$. Han kom fram til Boyle-Mariottes lov:

Ved konstant temperatur er produktet av trykk og volum til en gass konstant. Matematisk: $pV=K$

Målinger viste også (for gasser før de kondenserer) at det var en lineær sammenheng mellom dette produktet, og temperatur (for de temperaturer det var mulig å framstille).

$$pV = aT + b \quad (7.2)$$

Figur 7.1 viser hvordan denne sammenhengen så ut for forskjellige gasser og gassmengder. Om sammenhengen virkelig er lineær ved *alle* temperaturer, så fins det altså en absolutt minste temperatur, ettersom negativt volum og trykk er ufysiske konsepter. Det viser seg at denne temperaturen er på $T = -273,15^\circ$. Skala for absolutt temperatur er i Kelvin (i SI systemet), og

vi har

$$T(K) = T(^{\circ}C) + 273,15$$

Ved hjelp av absolutt temperatur kan man sette konstanten b lik null i ligning 7.2, og man får tilstandsningen for en ideell gass, som i moderne form kan skrives på to måter:

$$pV = nRT = NkT \quad (7.3)$$

Her er n gassmengde i mol, og $R = 8,3 \text{ J/(K mol)}$ er den universelle gasskonstanten. I statistisk fysikk er det vel så relevant å uttrykke dette ved N lik antall molekyler i gassen, og $k = 1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$, Boltzmanns konstant.

Ettersom man kan utvide en gass ved å varme den opp, og dermed f.eks. drive et stempel, så ble det ettervert klart at varme har en sammenheng med mekanisk arbeid, og dermed energi. Det var James Joule som etablerte en slik sammenheng midt på 1800-tallet¹. Man kan altså se på varmemengde som et mål for *indre energi* i et stoff. Dette banet veien for formuleringen av termodynamikkens første lov.

TERMODYNAMIKKENS FØRSTE LOV

Tilførsel av energi kan medføre et utført stykke arbeid (W), og/eller det kan gå med til å endre et systems temperatur.

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W = C\Delta T - p\Delta V \quad (7.4)$$

Her er C systemets varmekapasitet, og p er trykket systemet er utsatt for. Med ord sier vi:

Endring i indre energi = tilført varme + mekanisk arbeid utført på gassen.

Siden arbeidet er utført *på* gassen, har den blitt komprimert til et lavere volum en den hadde opprinnelig ($\Delta V < 0$).

Tilført arbeid er enklest forstått når en gass med trykk p komprimeres: $W = -p\Delta V$, (med ΔV negativ). Om gassen utvider seg, så utfører den arbeid ved å miste indre energi. Da er W negativ. Det er selvsagt kompliserende at trykk er en funksjon av både volum og temperatur. Vår behandling av den statistiske fysikken i denne boka dreier seg i all hovedsak om beskrivelsen av stoffenes indre egenskaper, der tilførsel av energi går med til oppvarming og ikke til deformering (så $\Delta V = 0$). Tilført varme kan gå med til en temperaturøkning, men kan også føre til f.eks. smelting ved konstant temperatur. Dette er svært kort omtalt i seksjon 7.3

¹Han slapp et lodd fra en gitt høyde. Loddets bevegelse fikk en visp til å røre rundt i en beholder med vann. Vannet ble dermed varmere (se artikkel om James Joule i Wikipedia).

7.2 Maxwells hastighetsfordeling

Rundt 1850 var det allerede mange som hadde foreslått at gasser besto av mange bittesmå partikler i rask bevegelse, og at egenskaper til gassen, slik som temperatur og varmekapasitet kunne være en funksjon av partiklenes kinetiske energier. Dette kaltes for kinetisk gassteori, og Maxwell var en av dem som utviklet konseptet.

Partiklenes kinetiske energier er

$$\epsilon_i = \frac{1}{2}mv_i^2$$

for partikkelen i . Vi antar at gassen består av identiske partikler med masse m . Hva kan man si om hastighetene v_i ?

J.C. Maxwell publiserte i 1860 forslag om hvordan disse hastighetene var fordelt mellom molekylene i gassen, noe som gir rett form av *Maxwell-Boltzmann fordelingen*, som er sentral i statistisk fysikk. Vi skal her gjengi Maxwells utledning.²

Det antas at det totale antall partikler i gassen, N , er så stort at det er hensiktsmessig å erstsatte summer over partiklene med integraler. Vi antar at sannsynligheten for at en partikkelen har hastighet langs x -aksen mellom v_x og $v_x + dv_x$ er $f(v_x)dv_x$. Videre antar vi at ingen av de tre hastighetskomponentene er foretrukne, slik at vi snakker om den samme fordelingsfunksjonen for de tre retningene; $f(v_x) = f(v_y) = f(v_z)$ når $v_x = v_y = v_z$.

Antall partikler med hastighet mellom (v_x, v_y, v_z) og $(v_x + dv_x, v_y + dv_y, v_z + dv_z)$ er således

$$Nn(v_x, v_y, v_z)dv_xdv_ydv_z = Nf(v_x)f(v_y)f(v_z)dv_xdv_ydv_z \quad (7.5)$$

Siden ingen retninger er foretrukket, så antar Maxwell videre at $n(v_x, v_y, v_z)$ bare er en funksjon (Φ) av absoluttverdien av hastigheten, som i kvadrat er $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$, altså:

$$n(v_x, v_y, v_z) = B\Phi(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = f(v_x)f(v_y)f(v_z) \quad (7.6)$$

Eksponentialfunksjoner har denne egenskapen. Dersom man velger $f(v_x) = B^{\frac{1}{3}}e^{-\beta v_x^2}$, og tilsvarende for y og z komponenter, så ser vi at ligningen er tilfredsstilt ved

$$\Phi(v^2) = Be^{-\beta(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)} \quad (7.7)$$

²Maxwells orginalpublikasjon, "Illustrations of the dynamical theory of gases, part I: "On the motions and collisions of perfectly elastic spheres" *Philosophical Magazine, 4th series* **19**, 19-32, kan finnes fra Wikipedia (engelsk) sin omtale av Maxwell-Boltzmannfordelingen (konsultert 8/8-2016)

For at funksjonen ikke skal divergere for høye hastigheter så setter man minustegn i eksponenten og velger β positiv. Dermed er hastighetskomponentene gaussfordelte med middelverdi 0 og standardavvik gitt ved $\sigma = 1/\sqrt{1/(2\beta)}$.

Hvordan går vi fram for å finne fordelingen av hastighetene ($v = \sqrt{v^2}$)? Hastighetene kan jo ikke være mindre enn 0 i absoluttverdi, og det er symmetri i retningene. Da er det hensiktsmessig å skrive volumelementet (i hastighetsrommet) $dv_x dv_y dv_z$ i polarkoordinater. Regelen er at vi må skrive

$$dv_x dv_y dv_z = v^2 dv \sin \theta d\theta d\phi$$

I polarkoordinater³ erstatter vi $n(v_x, v_y, v_z) dx dy dz$ med:

$$n'(v, \theta, \phi) dv d\theta d\phi = B e^{-\beta v^2} v^2 dv \sin \theta d\theta d\phi$$

Vi gjentar at det er symmetri i retningene, ingen avhengighet av vinkel, slik at integralet over vinkel blir enkelt

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\phi = 4\pi$$

Dermed blir antall partikler med hastighet mellom v og $v + dv$

$$dN(v) = 4\pi B v^2 e^{-\beta v^2} dv \quad (7.8)$$

Dette er rett form av Maxwell-Boltzmanns fordelingslov, som gir antall partikler i gassen som har hastighet mellom v og $v + dv$. Det totale antall partikler i gassen er altså $N = \int_0^\infty \frac{dN}{dv} dv$.

Dette kan brukes til å eliminere konstanten B . Fra tabeller har vi nemlig

$$\int_0^\infty x^2 e^{-\beta x^2} dx = \frac{1}{4\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

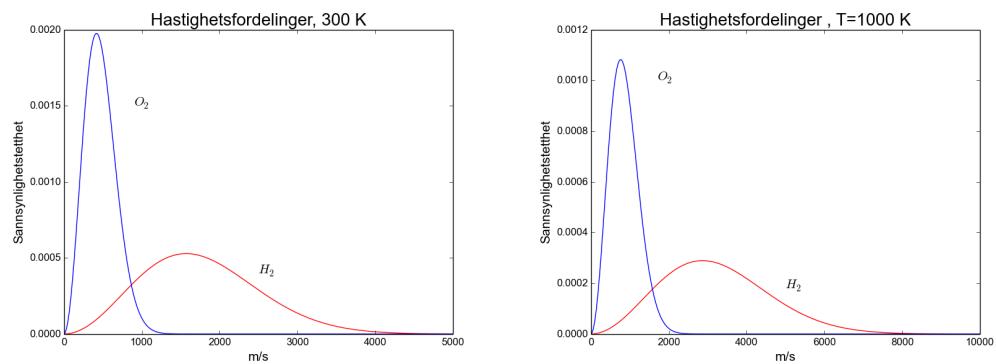
slik at vi finner

$$B = N \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{3/2} \quad (7.9)$$

Vi begynte med å skrive ned den kinetiske energien til en partikkel i gassen. Den gjennomsnittlige kinetiske energien til partiklene kan relateres til temperatur (*absolutt* temperatur, målt i Kelvin) gjennom *Boltzmanns konstant*:

$$\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} kT \quad (7.10)$$

³Se fig. 4.2. Men her har vi erstattet romlige koordinater med hastighetskomponenter.



Figur 7.2: Maxwell-Boltzmanns hastighetsfordelinger for to gasser og temperaturer (Legg merke til at aksene er forskjellige i de to plottene).

der $\langle v^2 \rangle$ middelverdien til kvadratet av hastighetene. Verdien av Boltzmanns konstant⁴, er $k = 1,3807 \times 10^{-23} J/K$. Ved hjelp av denne 'linken' til den makroskopiske størrelsen temperatur finner vi $\beta = \frac{m}{2kT}$ (se oppgaver i slutten av kapittelet), og vi kan eksplisitt plotte fordelingsfunksjonen for forskjellige gasser og temperaturer, finne gjennomsnittshastigheter av molekylene og andre egenskaper, for eksempel trykket ved gitt temperatur og volum. Multipliseres k med Avogadros tall, $N_A = 6,022 \times 10^{-23}/mol$ så får man den molare gasskonstanten, $R = 8.315 JK^{-1}mol^{-1}$. Boltzmanns konstant er så fundamental at defineres med eksakt verdi i den siste versjonen av SI-systemet, og danner grunnlaget for definisjonen av enheten Kelvin for temperatur.

7.3 Entropi og termodynamikkens andre hovedsetning

'Any method involving the notion of entropy, the very existence of which depends on the second law of thermodynamics, will doubtless seem to many far-fetched, and may repel beginners as obscure and difficult of comprehension.'

W. Gibbs, sitat kopiert fra Wikipedia.

Ordet *Entropi* ble innført tidlig på 1850 tallet av en av termodynamikkens grunnleggere, Rudolf Clausius, for å beskrive *transformasjonsprosesser*.

⁴Korrekt (iflg. vedtatte konvensjoner) betegnelse for Boltzmanns konstant er k . Men mange føyer på en indeks og skriver k_B for å unngå misforståelser.

Spesielt ville man gjøre rede for energiforholdene i forbrenningsprosesser, idet man observerte at den mekaniske energien man kunne få ut av en maskin (f.eks. en dampmaskin) var langt mindre enn den energien, eller varmen, man måtte tilføre. Selve ordet kommer fra gresk, og betyr noe slikt som 'evne til transformasjon', og er valgt for å ligne på ordet 'energi' som betyr omrent 'evne til arbeid'. Entropiendringer uttrykkes i Joule pr. Kelvin. Differensielt så gjelder

$$dU = \delta Q + \delta W \quad (7.11)$$

Clausius skilte ut temperaturen, og skrev, for reversible prosesser:

$$\delta Q = T dS \quad (7.12)$$

der størrelsen S kalles *entropi*. Man kan beregne entropiendringer for et system ved

$$\Delta S = \int_i^f \frac{dQ}{T}$$

Det er viktig å vite hva som endres når systemet går fra begynnelsestilstand i til slutttilstand f . Endring kan være i temperatur, $dQ = mCdT$.

Her er m massen og C varmekapasiteten til systemet. Men entropien kan også endres uten at temperaturen endres. Det kan tilføres varme som går med til f.eks. smelting. Da har vi $dQ = L_f dm$, der dm er masse-endringen, mengden stoff som har smeltet. L_f er spesifikk smeltevarme. Man fant også at entropien i et system bare avheng av systemets tilstandsvariable (som trykk, volum og temperatur). Om stoffet størkner igjen til sin opprinnelige form, så er entropien slik den var før smeltingen begynte.

Det har vist seg at det er en nøye sammenheng mellom entropiendringer og termodynamikkens andre lov som i Clausius matematiske formulering er slik:

$$I alle isolerte prosesser gjelder: \Delta S \geq \frac{\Delta Q}{T}$$

For å sitere norsk wikipedia (15/8 2016)

TERMODYNAMIKKENS ANDRE LOV

I et isolert system kan entropien aldri avta

Inntil den statistiske mekanikken var formulert av Boltzmann, så var det bare entropi- *endringer* som kunne beregnes meningsfylt.

Boltzmann foreslo en statistisk definisjon av entropi der selve verdien av entropien gav mening i absolutt forstand, uten valg av referansepunkt. I statistisk mekanikk er det denne definisjonen som postuleres for å gi oss tilgang til makrofysiske størrelser, spesielt til størrelsen temperatur, og dessuten til omtalen av entropi som 'grad av uorden' i et system.

7.4 Noen termodynamiske størrelser

I statistisk fysikk så har vi ambisjoner om å gjøre teoretiske beregninger av størrelser som varmekapasitet og entropi, samt utlede tilstandslikninger for gasser. Her er derfor en oppsummering av størrelser fra termodynamikken.⁵ Varmekapasitet er innført for å karakterisere ulike stoffers temperaturøkning for en gitt tilførsel av energi i form av varme. Med utgangspunkt i termodynamikkens første lov (ligning 7.4) så blir varmekapasiteten ved konstant volum

$$C_V \equiv \frac{dQ}{dT}_V = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (7.13)$$

siden $dV = 0$. For faste stoffer og væsker endrer volumet seg lite ved tilførsel av varme, og C_V er den størrelsen vi kan få bruk for. For gasser er situasjonen en annen, siden de eksander ved temperaturøkning. Da kan vi definere en varmekapasitet ved konstant trykk

$$C_p \equiv \frac{dQ}{dT}_p = \frac{\partial U}{\partial T} + p \frac{\partial V}{\partial T} \quad (7.14)$$

C_p er alltid større enn C_V , fordi gassen må ta opp energi for å kunne utføre arbeidet som kreves for å kunne eksandre. Når vi har en tilstandslikning mellom variablene p , V og T , for eksempel den for ideell gass $\mathbf{pV} = \mathbf{nRT}$ kan vi komme fram til interessante sammenhenger. Ved konstant trykk er $\frac{\partial V}{\partial T} = nR/p$, og vi får $C_p - C_V = nR$. Vi kan også definere *Entalpien* som:

$$H = U + pV \quad (7.15)$$

Da har vi $C_p = (\frac{\partial H}{\partial T})_p$. Det er forståelig at entalpiforskjeller blir nyttig i kjemi - For at en reaksjon skal kunne foregå så er det ikke nok at energi blir frigjort isolert sett. Man må også ha tilstrekkelig energi til å kunne rydde plass til sluttproduktet, noe entalpien tar med i energiregnskapet.

Når vi skriver $dQ = TdS$, så ser termodynamikkens første lov slik ut:

$$TdS = dU + pdV \quad (7.16)$$

En annen nyttig størrelse er *Helmholtz' frie energi*

$$F = U - TS \quad (7.17)$$

som gir

$$dF = dU - TdS - SdT \quad (7.18)$$

⁵Kapittel 17 i Generell fysikk" av Lillestøl, Lien og Hunderi er et greit sted å lese mer om dette [11]

Med termodynamikkens første lov kan vi eliminere dU og skrive

$$dF = -SdT - pdV \quad (7.19)$$

Ved konstant temperatur ser vi at ΔF gir det rent mekaniske arbeidet. Vi har tatt det med her fordi det vil komme til nytte når vi skal utlede egenskapene til ideelle gasser i statistisk mekanikk.

7.5 Statistikk: Oppelling av tilstander

Nå er det på tide å gi seg i kast med den statistiske fysikken, som baserer seg på oppelling av tilstander for et antall partikler som typisk er 10^{24} . Er dette mulig? Det skal vise seg at det er det!⁶

La oss begynne med 'enkle' eksempler. Grunnlaget for statistisk fysikk er en diskusjon om hvordan man fordeler et antall partikler, N , på forskjellige energinivåer ϵ_r . Hva er sannsynligheten for at et antall n_r partikler ligge på dette energinivået? Antallene på de forskjellige nivåene kan realiseres på mange forskjellige måter, og vi vil telle opp mulighetene.

7.5.1 Mynt og kron (og en paramagnet)

La oss først se på et eksempel med kun to tilstander som kan oppnås med samme sannsynlighet (de har da gjerne samme energi): Her tenker vi oss at vi har en mynt, og slår kron og mynt N ganger. For å gjøre analogien med partikler tydeligere kan vi også tenke oss at vi har N mynter som vi kaster en gang. Hvor mange ganger får vi kron (K), og hvor mange ganger får vi mynt? Intuitivt vil si at vi får dette utfallet i 50% av tilfellene. Dette kan vi komme fram til ved oppelling av antall måter vi kan få n_K kron, og $n_M = N - n_K$ mynt. Vi antar:

1. Hver måte vi kan få et gitt resultat på, har samme sansynlighet
2. Det resultatet som kan oppnås på flest mulige måter er det mest sannsynlige resultatet

La oss tenke oss at vi har ti kast ($N=10$). Vi kan oppnå $n_K = 0$ kron på kun en måte, nemlig at alle kastene gir utfallet M . $n_K = 1$ kan vi oppnå på 10 måter. Ett av de ti kastene kan gi kron.

⁶Dette kapittelet er veldig inspirert av framstillingen i [12]

På hvor mange måter kan vi få 2 kron? Jo, først kan vi velge at ett av 10 kast, som gir kron, altså ti mulige valg. Etterpå er det ni mulige valg som kan gi kron, så totalt $10 \times 9 = 90$ muligheter Dette kan vi skrive slik:

$$10 \times 9 = \frac{10!}{8!}$$

Men rekkefølgen mellom den første utfallet med K, og det andre er uvesentlig; vi teller bare opp to K som sluttresultat. Det er to rekkeføringer som gir samme resultat, så vi må dele på dette antallet: Antall måter å få to kron på er dermed

$$\Omega_2 = \frac{10!}{2!8!}$$

Det er enkelt å se at vi får

$$\Omega_3 = \frac{10!}{3!7!}$$

Generelt for n_K av N mulige har vi

$$\Omega(n_K) = \frac{N!}{n_K!(N-n_K)!} \equiv \binom{N}{n_K} \quad (7.20)$$

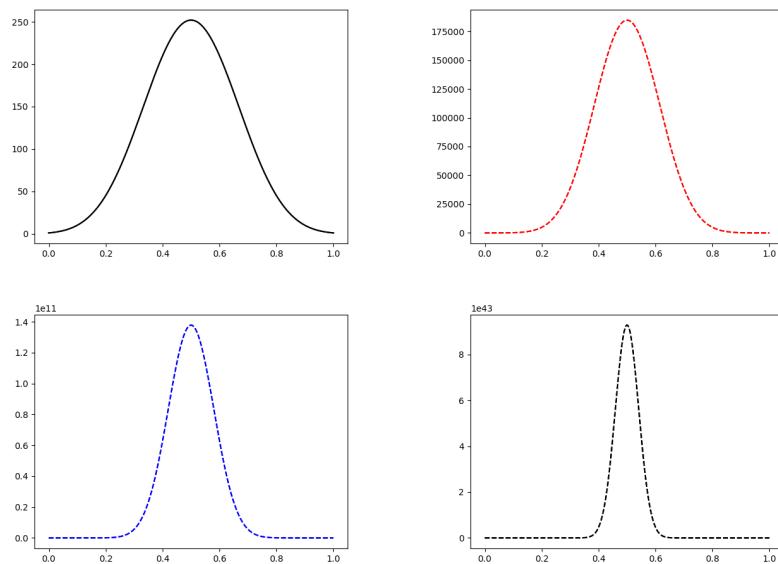
Dette kalles for **binomialkoeffisienten**. I dette tilfellet er det binomialkoeffisienten som gir *antall mikrotilstander*, Ω_K , for en gitt *makrotilstand*, spesifisert ved n_K . Vi kan plotte $\Omega(n_K)$ for forskjellige N. For å sammeligne resultatene velger vi x-akse som n_K/N i plottene. Resultat er i figur 7.3. Strengt tatt så antar abscissen her bare heltallsverdier (dividert med N). Svært ofte, for eksempel i scientific python blir fakultetsfunksjonen ('factorial') definert som en kontinuerlig funksjon ved hjelp av Γ – *funksjonen*, $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$, som gir $\Gamma(n) = (n-1)!$ for heltall. For våre anvendelser vil n alltid være svært stor, og vi kan behandle n som om den var kontinuerlig av den grunn. Vi ser av fig. 7.3 at det er svært plausibelt at den mest sannsynlige n_K er $n_K = N/2$.

For å vise det matematisk, kan vi derivere $\Omega(n_K)$ og finne maksimum. Men istedenfor å derivere direkte så tar vi logaritmen av den Ω , og deriverer den isteden. Vi innfører først en approksimasjon for $\ln n!$ som gjelder for store n . Dette er **Stirlings approksimasjon**:

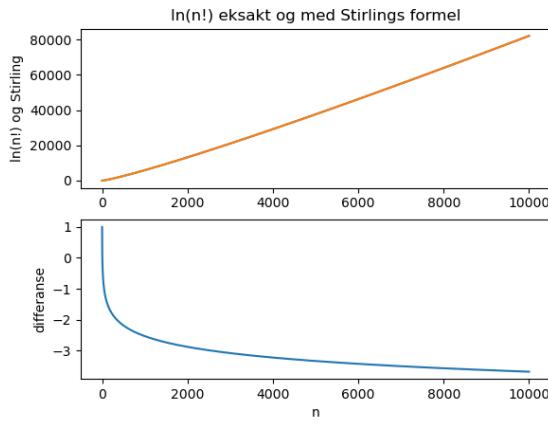
$$\ln n! \approx n \ln n - n \quad (7.21)$$

Figur 7.4 viser en sammenligning mellom den eksakte formelen og tilnærmingen. I relativ forstand er tilnærmingen svært god for store n .

Nå prøver vi å finne den maksimale verdi av Ω ved å ta logaritmen. Deretter anvender vi Stirlings tilnærming, deriverer, og setter den deriverte



Figur 7.3: Fordeling av antall måter man får utfall 'kron' på, når man har kastet h.h.v. 10, 20, 40 og 150 mynter. Antallene er plottet som funksjon av andel 'kron'. Legg merke til at fordelingen blir smalere etterhvert som N øker. Legg også merke til hvor stor funksjonsverdien $\Omega(n_k) = N/2$ blir for store N . Når du gjør 150 kron/mynt kast, så kan man få 75 'kron' og 75 'mynt' på omtrent 9×10^{43} måter!



Figur 7.4: Stirlings formel for tilnærming av $\ln n!$. Det øverste panelet viser den eksakte formelen og tilnærmingen. Siden den relative forskjellen er så liten, er det ikke mulig å skjelne de to kurvene fra hverandre. Den nederste figuren viser forskjellen mellom de to kurvene. Vi har altså en relativ feil i Stirlings formel på omtrent 3/80000 når $n = 10000$.

lik 0. Vi får:

$$\begin{aligned}\ln \Omega(n_K) &= \ln N! - (\ln n_K! + \ln(N - n_K)!) \\ &\approx N(\ln N - 1) - [n_K(\ln n_K - 1) + (N - n_K)(\ln(N - n_K) - 1)]\end{aligned}$$

Så deriverer vi m.h.p. n_K (og da må man huske at $\frac{d \ln f(x)}{dx} = \frac{1}{f(x)} \frac{df}{dx}$)

$$\begin{aligned}\frac{d \ln(\Omega)}{dn_K} &= - \left[(\ln n_K - 1) + n_K \frac{1}{n_K} - (\ln(N - n_K) - 1) + (N - n_K) \frac{-1}{N - n_K} \right] \\ &= -[\ln n_K - \ln(N - n_K)]\end{aligned}$$

For $n_K = N/2$ blir uttrykket til $-[\ln \frac{N}{2} - \ln \frac{N}{2}] = 0$. Så maksimum er altså ved $n_K = N/2$ som forventet.

Eksempelet med kron og mynt kan føles fjernt fra fysikk. Men i fysikken fins flere eksempler på systemer med bestanddeler som kan være i to tilstander. For eksempel vil en samling atomer med spinn lik $1/2$ være et slikt system. Disse atomene har gjerne et oddet antall elektroner. De andre elektronspinnene kansellerer parvis, slik at spinntilstanden er gitt av tilstanden til det uparrede elektronet. Man kan klassifisere atomene etter spinntilstanden langs en valgt z-akse. Hvert atom har et magnetisk moment langs denne aksen, enten gitt som $\vec{\mu} = \frac{e}{m} \frac{\hbar}{2} \vec{u}_z$, eller $\vec{\mu} = -\frac{e}{m} \frac{\hbar}{2} \vec{u}_z$ (se formel 4.27). Av

et totalt antall atomer, N , kan vi ha N_+ atomer med positivt magnetisk moment, og N_- atomer med negativt magnetisk moment. Materialet kan være paramagnetisk, noe som betyr at det blir magnetisk når det plasseres i et ytre magnetisk felt. Da opplinjerer spinnene seg i samme retning som magnetfeltet, og materialet blir magnetisert. Magnetiseringen er lik

$$\vec{M} = (N_+ - N_-) \frac{e \hbar}{m} \vec{u}_z \quad (7.22)$$

der \vec{u}_z er retningen til det ytre magnetfeltet. Det en viss sannsynlighet pr. tidsenhet for at spinnet til et atom 'flipper'.

Når magnetfeltet er slått av er sannsynligheten for spinnflipp fra + til - lik sannsynligheten for spinnflipp andre veien. Etterhvert fører denne antakelsen til at det blir like mange atomer med spinnretning langs \vec{u}_z (N_+) som atomer med motsatt rettet spinn. Vi får $N_+ = N_- = N/2$ siden dette kan realiseres på flest antall måter (og null magnetisering).

7.5.2 Mikrotilstand - makrotilstand

Vi innførte disse ordene ovenfor, og de kan oppsummeres kort:

Makrotilstanden til et legeme er spesifisert ved de egenskaper vi kan måle på det: temperatur, volum, trykk, magnetisering. Temperaturen står forøvrig i direkte sammenheng med energi-innhold, eller varmeinnhold.

En *mikrotilstand* er en tilstand som er nøyaktig spesifisert ved å identifisere tilstanden (energi, rotasjonstilstand...) til hvert eneste atom i systemet. Det makroskopiske legemet kan anta sin makrotilstand på mange forskjellige måter. Det fins mange mikrotilstander som gir samme makrotilstand. Om det fins Ω mikrotilstander som gir denne makrotilstanden, så er entropien til legemets makrotilstand proporsjonal med $\ln \Omega$. Mer om dette senere.

7.6 Identifiserbare partikler

Vi kan nå overføre dette til mer generelle fysiske systemer som inneholder en eller annen form for energi. La oss se på et system med N like, men, i første omgang *identifiserbare* partikler, altså at vi til enhver tid i prinsippet skal kunne vite hvor hver partikkelf befinner seg. Vi vil vite hvor mange partikler som befinner seg på et definert energinivå, ϵ_r

Man antar at alle konfigurasjoner (*mikrotilstander*) av disse partiklene på de forskjellige nivåene er like sannsynlige. Vi skal vise at konfigurasjonen av antallene n_r som kan realiseres på flest mulig antall måter vil være den

makrotilstanden som realiseres i naturen. Dermed blir oppgaven å telle opp antall mikrotilstander for en gitt makrotilstand.

Først plasserer vi n_1 partikler på nivå ϵ_1 . De første partikkelen kan trekkes fra et utvalg av N , så på N måter. Neste partikkel trekkes på $N - 1$ mulige måter. Den deretter kan trekkes på $N - 2$ mulige måter. Når vi har trukket n_1 partikler, så har det kunnet skje på

$$N(N-1)(N-2)\cdots(N-n_1+1) = \frac{N!}{(N-n_1)!}$$

måter. Men rekkefølgen partiklene er trukket ut på er uvesentlig. Vi kunne byttet om på rekkefølgen på $n_1!$ måter. Antall måter vi kan havner med n_1 partikler på nivå 1 er dermed (igjen) gitt ved binomialkoeffisienten.

$$\frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \equiv \binom{N}{n_1} \quad (7.23)$$

Så plasserer vi n_2 partikler på nivå ϵ_2 . Ettersom vi bare har $N - n_1$ partikler igjen, så kan dette gjøres på

$$\frac{(N-n_1)!}{n_2!(N-n_1-n_2)!}$$

måter, hvor vi har dividert med $n_2!$ siden rekkefølgen er uvesentlig. Antall måter vi kan plassere n_1 partikler i ϵ_1 og n_2 partikler i nivå ϵ_2 blir produktet:

$$\frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \times \frac{(N-n_1)!}{n_2!(N-n_1-n_2)!} = \frac{N!}{n_1!n_2!(N-n_1-n_2)!}$$

ettersom vi kan forkorte faktoren $(N-n_1)!$.

Vi må holde på til vi har plassert alle partiklene, og ser at antall måter partiklene kan plasseres på er:

$$\Omega = \frac{N!}{\prod n_r!} \quad (7.24)$$

Symbollet Π (gresk P) betyr produkt, og produktet er (underforstått) over alle r . Ligning 7.24 gjelder dersom en partikkel kan legge seg på alle energinivåer med samme underliggende sannsynlighet. Men mange fysiske energitilstander kan besettes på mer enn én måte. Vi har *degenerasjon*, med en degenerasjonsgrad g_n . g_n angir antall måter et energinivå kan besettes på. I kapittel 5.2 har vi funnet at energinivå E_n i hydrogenatomet kan besettes på $2n^2$ måter. Vi har også beregnet antall tilstander vi har pr. energiintervall $g(E)$ for 'partikkel i boks'-problemets (seksjon 4.1.1). Antallet øker som kvadratroten av energien. Dette resultatet skal vi benytte i flere sammenhenger etterhvert.

I første omgang skal vi anta at det er plass til mange tilstander på et gitt energinivå, slik at plasseringen av en partikkel på nivået ikke reduserer sannsynligheten for at vi kan plassere en partikkel til på nivået. Med degenrasjonsgrad g_r så kan vi plassere n partikler på nivå r på $g_r^{n_r}$ måter. Da blir antallet

$$\Omega = N! \prod \frac{g_r^{n_r}}{n_r!} \quad (7.25)$$

7.6.1 Maksimering av antall mikrotilstander

Med ligning 7.25 som utgangspunkt skal vi utlede Boltzmann sin sannsynlighetsfordeling for antall partikler på hvert energinivå, og finne at dette er godt nok for 'klassisk' statistisk fysikk. Senere skal vi ta for oss situasjoner der det er begrenset med plass på et gitt energinivå. Dette er tema for kvantestatistikk, men optimeringsprosedyren er den samme, med litt andre uttrykk for Ω .

Vi skal nå finne det settet av verdier for n_r som gjør Ω størst mulig, ved derivasjon, og sette den deriverte lik null. Først tar vi logaritmen til Ω og skriver ut det tilnærmede resultatet etter å ha brukt Stirlings tilnærming:

$$\begin{aligned} \ln \Omega &= \ln N! + \sum n_r \ln g_r - (\sum \ln n_r!) \\ &\approx N \ln N - N + \sum n_r \ln g_r - \sum (n_r \ln n_r - n_r) \end{aligned}$$

Den partielt deriverte med hensyn på n_r er

$$\frac{\partial(\ln \Omega)}{\partial n_r} = \ln g_r - \left(\ln n_r + \frac{n_r}{n_r} - 1 \right) = \ln g_r - \ln n_r = -\ln \frac{n_r}{g_r}$$

Men det er mange partielt deriverte, og det er summen av dem som blir null ved maksimum:

$$d \ln \Omega = \sum \frac{\partial(\ln \Omega)}{\partial n_r} dn_r = - \sum \ln \frac{n_r}{g_r} dn_r = 0 \quad (7.26)$$

Vi har to *føringer* i systemet:

1. For det første antar vi at vi kjenner det totale antallet partikler i systemet, og at dette ikke vi endre seg:

$$\sum n_r = N$$

2. For det andre skal vi se på et isolert system, uten utveksling av energi med omgivelsene. I termodynamikken er totalenergien i systemet ofte betegnet med symbollet U (istedenfor E), og definert som

$$U = \sum \epsilon_r n_r$$

Disse føringene skal holdes konstant gjennom prosessen. Dette betyr at variasjonen av dem må være null, altså:

$$dN = \sum dn_r = 0 \quad \text{og} \quad dU = \sum \epsilon_r dn_r = 0$$

Nå kan vi innføre **Lagrange-multiplikatorer** foran variasjonen av føringene. Dette er mulig fordi variasjonen av dem jo er null, og når vi multipliserer at tall med null så er svaret stadig vekk null.

$$\alpha \sum dn_r = 0 \quad \text{og} \quad \beta \sum \epsilon_r dn_r = 0$$

Vi summerer de tre uttrykkene, som hver for seg altså er lik null. Da ser det slik ut:

$$d \ln \Omega = - \sum \ln \frac{n_r}{g_r} dn_r + \alpha \sum dn_r + \beta \sum \epsilon_r dn_r = 0 \quad (7.27)$$

La oss gjenta hva vi søker å finne, nemlig settet av verdier av n_r . Vi ordner summene etter dn_r :

$$\sum \left(-\ln \frac{n_r}{g_r} + \alpha + \beta \epsilon_r \right) dn_r = 0 \quad (7.28)$$

Lagrange-multiplikatorene gjør at det faktisk er to fler ukjente enn det er ligninger. Denne friheten bruker vi til å kreve at hvert ledd i summen settes lik null!

Altså

$$-\ln \frac{n_r}{g_r} + \alpha + \beta \epsilon_r = 0 \quad (7.29)$$

Dette gir oss

$$n_r = g_r e^{\alpha} e^{\beta \epsilon_r} = A g_r e^{\beta \epsilon_r} \quad (7.30)$$

der vi har skrevet $A = e^\alpha$. La oss sammenligne dette med Maxwells hastighetsfordeling, ligning 7.7. Bortsett fra faktoren $1/(2m)$ ser vi at det er samme resultat når energiene er atomenes kinetiske energier, $\epsilon_r = \frac{1}{2}mv_r^2$!

Det gjenstår å finne verdiene av A og β . Om vi kjenner β , så ser vi at antallsnormeringen gir

$$N = A \sum g_r e^{\beta \epsilon_r} \quad (7.31)$$

7.6.2 Temperatur

Konstanten β har altså med energibevaring å gjøre. Utgangspunktet vårt er å beskrive et termodynamisk system, for eksempel en gass. Vi kjenner til termodynamikkens nullte lov, at to legemer i termisk kontakt vil anta samme temperatur. Dessuten sier termodynamikkens første lov at økning av temperatur skjer gjennom tilførsel av energi. La oss se på to gasser som er skilt med en tynn membran, men i termisk kontakt (fig. 7.6 er en grei illustrasjon). Hvordan teller vi opp antall tilstander? For hver tilstand på den ene siden av membranen, så har vi Ω tilstander på den andre siden, så det kombinerte antall mikrotilstander er helt klart :

$$\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2 = \left[\frac{N_1!}{\prod n_r!} \right] \times \left[\frac{N_2!}{\prod n'_r!} \right]$$

hvor n'_r er antallet på nivå ϵ'_r i boks 2 (I denne seksjonen har vi tillatt oss å sette alle $g_r = 1$). Legg merke til at $\ln \Omega = \ln \Omega_1 + \ln \Omega_2$, så vi kan overføre resultatet for derivasjon av $\ln \Omega$ fra det vi allerede har gjort.

Hvilke føringer kan vi innføre? Vi har to føringer på antallene:

$$N_1 = \sum n_r \quad \text{og} \quad N_2 = \sum n'_r$$

Men, ettersom vi har termisk kontakt mellom boksene, så har vi utveksling av energi. Dermed er det bare en føring på energi:

$$U = U_1 + U_2 = \sum \epsilon_r n_r + \sum \epsilon'_r n'_r$$

Vi har dermed tre føringer som kan multipliseres med vilkårlig konstant:

$$\alpha_1 \sum dn_r = 0 \quad , \quad \alpha_2 \sum dn'_r = 0 \quad \text{og} \quad \beta(\sum \epsilon_r dn_r + \sum \epsilon'_r dn'_r) = 0$$

Alle summene er lik null, og kan omskrives til

$$\begin{aligned} \sum (-\ln n_r + \alpha_1 + \beta \epsilon_r) dn_r &+ \\ \sum (-\ln n'_r + \alpha_2 + \beta \epsilon'_r) dn'_r &= 0 \end{aligned}$$

Vi ser at leddene i summen er identiske med leddene i ligning 7.28, men med *samme* β . Vi kan fortsatt kreve at hvert ledd i summen er lik null. Dermed har vi

$$n_r = A_1 e^{\beta \epsilon_r} \quad \text{og} \quad n'_r = A_2 e^{\beta \epsilon'_r}$$

Det er nærliggende å anta at β er en entydig funksjon av temperatur, idet vi da har termodynamikkens nullte lov oppfylt.

For å komme videre i vår søken etter hva som ligger i β , så må vi se det i lys av termodynamikkens første og andre lov. Sentralt i den andre lov er begrepet entropi, der varmetilførsel ikke nødvendigvis førte til temperaturøkning, men også til entropiøkning. Spesielt kan prosessen der et stoff smelter beskrives som noe som øker entropi, uten at temperaturen øker. Boltzmann *postulerte* en definisjon av entropi i sin statistiske beskrivelse, nemlig:

DEN STATISTISKE DEFINISJONEN AV ENTROPI

$$S = k \ln \Omega \quad (7.32)$$

Her er k Boltzmanns konstant, $1,3807 \times 10^{-23}$ J/K.

Vi skal se at det er et svært nyttig postulat, som faller sammen med definisjonen fra termodynamikken, men som også gir en absolutt definisjon av entropi, ikke bare av endringer. I termodynamikk så vil et system som går mot likevekt bevege seg mot en tilstand med maksimal entropi. Dette faller jo godt sammen med Boltzmanns definisjon, idet den statistiske formalismen nettopp går ut på å maksimere $\ln \Omega$.

La oss se på innholdet i termodynamikkens første lov. Vi har formler 7.11 og 7.12 for reversible prosesser:

$$dU = dQ + dW = TdS - pdV$$

Hvordan gir vi en mikroskopisk beskrivelse av dette? Vi har at den indre energien er

$$U = \sum \epsilon_r n_r$$

Endring i U kan enten skje ved endring i antallene på hvert nivå, eller i en endring av nivåene selv:

$$dU = \sum \epsilon_r dn_r + \sum n_r d\epsilon_r$$

Det er klart at det første leddet i denne summen endrer entropien, siden antallene, n_r , på nivåene endres. Andre ledd endrer ikke på disse antallene, og dermed ikke på entropien; kun på energinivåene. (Endring av energinivåene kan gjøres ved endring av systemets volum, slik vi for eksempel har sett for kvantemekaniske partikler i boks.) Vi gjør identifikasjonen

$$TdS = \sum \epsilon_r dn_r \quad (7.33)$$

Ved hjelp av definisjonen av entropi, ligning 7.32 har vi

$$Tk d \ln \Omega = \sum \epsilon_r dn_r.$$

Om vi konsulterer 7.26 så ser vi at $d \ln \Omega = - \sum \ln n_r dn_r$ og dermed kan vi skrive :

$$d \ln \Omega = - \sum \ln n_r dn_r = \frac{1}{kT} \sum \epsilon_r dn_r$$

Men vi kom fram til ligning 7.29, altså $\ln n_r = \alpha + \beta \epsilon_r$. Antallsbevaringen betyr jo $\alpha \sum dn_r = 0$ så vi må ha

$$-\beta \sum \epsilon_r dn_r = \frac{1}{kT} \sum \epsilon_r dn_r$$

altså

$$\beta = -\frac{1}{kT} \quad (7.34)$$

Ettersom vi begynte med å sette $dQ = \sum \epsilon_r dn_r$ så får vi tilbake

$$TdS = dQ$$

Om det ikke gjøres ytre arbeid på systemet så er dQ ofte lik hele endringen i energi i systemet, så i mange bøker finner man temperatur definert ved $TdS = dE$, og en presisering av at symbolet dE er endring i energi som følge av varmestrøm.

7.6.3 Oppsummering, og et uttrykk for entropi

Vi oppsummerer uttrykkene basert på en Ω som gitt av ligning 7.25, *Boltzmannstatistikk*: Fordeling av antall partikler på hver energitilstand

$$n_r = A g_r e^{-\frac{\epsilon_r}{kT}} \quad (7.35)$$

Antall partikler kan skrives

$$N = \sum n_r = A \sum g_r e^{-\frac{\epsilon_r}{kT}} \quad (7.36)$$

Indre energi

$$U = A \sum \epsilon_r g_r e^{-\frac{\epsilon_r}{kT}} \quad (7.37)$$

La oss også finne et uttrykk for entropien ved denne likevektstilstanden.

$$\begin{aligned} S = k \ln \Omega &= k \left[N \ln N - N + \sum n_r \ln g_r - \left(\sum n_r \ln n_r - \sum n_r \right) \right] \\ &= k \left[N \ln N - \sum n_r \ln \frac{n_r}{g_r} \right] \end{aligned}$$

Vi setter inn for n_r (ligning 7.35) i logaritmen. Da forsvinner g_r :

$$\begin{aligned} S &= k \left[N \ln N - \sum n_r \left(\ln A - \frac{\epsilon_r}{kT} \right) \right] \\ &= k \left[N \ln N - N \ln A + \frac{U}{kT} \right] \end{aligned}$$

Men ved ligning 7.36 har vi $\ln N = \ln A + \ln \sum g_r e^{-\epsilon_r/(kT)}$, så termen med $N \ln A$ kansellerer og vi får

$$S = kN \ln \sum g_r e^{-\epsilon_r/kT} + \frac{U}{T} \quad (7.38)$$

7.6.4 Partisjonsfunksjonen

Summen

$$Z_{sp} = \sum g_r e^{-\epsilon_r/(kT)}$$

er tilstede mange steder. Det har fått et eget navn, *Partisjonsfunksjonen*. På tysk heter den *Zustandsumme*. Vi har satt på en indeks 'sp', fordi det fulle navnet er 'Single Particle Partition function'. Det skal bli klart etterhvert at det også fins en partisjonsfunksjon, Z for hele systemet.

Uttrykt ved partisjonsfunksjonen har vi

STATISTISKE EGENSKAPER TIL SYSTEMER

Enkeltpartikkel-partisjonsfunksjonen:

$$Z_{sp} = \sum g_r e^{-\epsilon_r/(kT)} \quad (7.39)$$

Antall partikler:

$$N = \sum n_r = AZ_{sp} \quad (7.40)$$

(Hendig for å eliminere A i ligningene nedenfor)

Indre energi

$$U = \sum \epsilon_r n_r = NkT^2 \frac{\partial \ln Z_{sp}}{\partial T} \quad (7.41)$$

Entropi for skillbare partikler:

$$S = Nk \ln Z_{sp} + NkT \frac{\partial \ln Z_{sp}}{\partial T} \quad (7.42)$$

Om vi kjenner partisjonsfunksjonen så kan vi beregne alle termodynamiske størrelser til et system.



Bilde kopiert fra Wikipedias biografi. Legg merke til innskripsjonen øverst.

7.6.5 Varmekapasiteten til et krystall

Det er på tide med et eksempel. Og vi har et svært godt eksempel ved beregning av varmekapasiteten til krystaller som funksjon av temperatur. Det var Einstein som først utførte en slik beregning i 1907, ut ifra Max Plancks forestilling om energikvanter, nemlig at energinivåene til atomene i krystallet bare kunne anta diskrete verdier, hele multipla av Plancks konstant. Senere kom kvantemekanikken, og vi fikk en modell for vibrasjonene av atomene i gitteret basert på Schrödingerligningen. Den gir også en nullpunktssenergi, som ikke var del i Einsteins beregninger.

Vi antar altså at krystallet opptar varme ved at atomene i krystallene begynner å vibrere. Vi tenker oss at atomene er bundet til sin plass i krystallen ved noe som ligner fjærer. Da kan vi anta at energinivåene er de vi har funnet for en harmonisk oscillator (se seksjon 3.3.4), nemlig

$$\epsilon_r = \hbar\omega(r + \frac{1}{2})$$

der $r = 0, 1, 2, \dots$. Siden atomene er bundet til sine plasser, så kan vi også identifisere hver partikkel sin posisjon i gitteret. Da skal Boltzmanns stati-

stikk gjelde. Videre antar vi at det er bare en tilstand pr. energi, slik at vi kan sette $g_r = 1$.

Vi får dermed at partisjonsfunksjonen er (fra ligning 7.39).

$$Z_{sp} = \sum e^{-\epsilon_r/kT}.$$

Antall atomer på energi tilstand ϵ_r blir

$$n_r = \frac{N}{Z_{sp}} e^{-\epsilon_r/kT}.$$

Det totale antallet atomer gitt som:

$$N = \sum n_r = \frac{N}{Z_{sp}} \sum e^{-\epsilon_r/kT}$$

Energi i systemet

$$U = \sum \epsilon_r n_r = \frac{N}{Z_{sp}} \sum \epsilon_r e^{-\epsilon_r/kT} = Nk_B T^2 \frac{\partial \ln Z_{sp}}{\partial T}$$

Til nå har vi skrevet ned generelle uttrykk. Nå setter vi inn modellen for energiene. Vi setter $a = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$ og får:

$$Z_{sp} = e^{-\frac{a}{2}} \sum_{r=0}^{\infty} e^{-ar} = e^{-\frac{a}{2}} \sum_{r=0}^{\infty} (e^{-a})^r \quad (7.43)$$

Man må kjenne igjen formelen for en geometrisk rekke: $\sum_{r=0}^{r=n} x^r = \frac{1-x^n}{1-x}$ for å se at resultatet blir

$$Z_{sp} = e^{-\frac{a}{2}} \frac{1}{1 - e^{-a}}$$

siden e^{-a} er mindre enn 1. (slik at $(e^{-a})^r \rightarrow 0$ for store r . Vi kan nå finne U :

$$U = \frac{N}{Z_{sp}} \hbar\omega \sum_{r=0}^{\infty} \left(r + \frac{1}{2}\right) e^{-ar}$$

Vi *kan* beregne denne summen (som to delsummer, og observere at $-\frac{\partial}{\partial a} \sum e^{-ar} = \sum r e^{-ar}$).

Men vi bruker heller partisjonsfunksjonen og ligning 7.41. Vi har

$$\ln Z_{sp} = -\frac{1}{2}a - \ln(1 - e^{-a})$$

Da får vi følgende

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial T} \ln Z_{sp} &= \frac{\partial}{\partial a} \left[-\frac{1}{2}a - \ln(1 - e^{-a}) \right] \frac{\partial a}{\partial T} \\ &= \left[-\frac{1}{2} - \frac{e^{-a}}{1 - e^{-a}} \right] \frac{-\hbar\omega}{kT^2} \\ &= \frac{\hbar\omega}{kT^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \right]\end{aligned}$$

$$U = NkT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_{sp} = N\hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \right) \quad (7.44)$$

For høye temperaturer blir $\frac{\hbar\omega}{kT}$, liten, og vi kan skrive $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}$. Da blir

$$U \approx N\hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{kT}{\hbar\omega} \right) \approx NkT$$

Vi har kanskje lært at energien er $\frac{1}{2}NkT$ pr. frihetsgrad. Lærebøker som ref. [13] argumenterer for at for oscillatorer så er, i snitt, bare halvparten av energien kinetisk, mens den andre halvparten er potensiell, slik at dette svarer til to frihetsgrader totalt.

Vi vil vite hvor mye energi krystallen absorberer, og hvor mye energi som må tilføres for å oppnå en gitt temperaturendring, *varmekapasiteten*

$$C = \frac{dU}{dT}$$

Resultatet er:

$$C = Nk \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta/T}}{(e^{\theta/T} - 1)^2} \quad (7.45)$$

Her har vi innført en karakteristisk temperatur definert som $\theta = \frac{\hbar\omega}{k}$.

7.6.6 Flere dimensjoner

I eksempelet har vi bare tillatt vibrasjon langs en akse. I virkeligheten fins det tre vibrasjonsakser, og totalenergien er

$$E = \frac{3}{2}\hbar\omega + (n_x + n_y + n_z)\hbar\omega$$

For hver mikrotilstand langs x fins det $\Omega_y \times \Omega_z$ mikrotilstander langs de to andre aksene. Det viser seg at man kan håndtere dette ved å definere en

ny partisjonsfunksjon som produktet av de individuelle. Denne utvidelsen vil gjelde helt generelt for alle tredimensjonale systemer der ingen av aksene skiller seg ut.

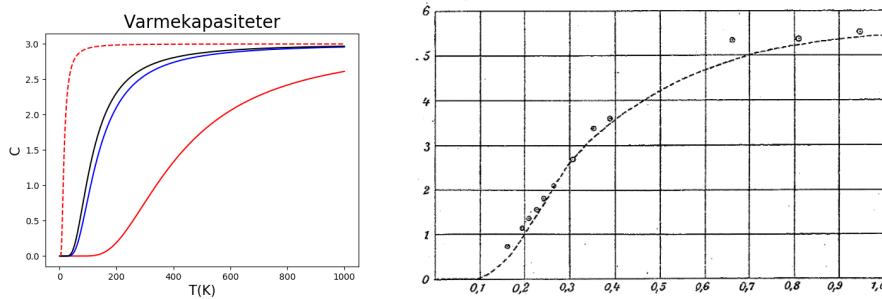
$$Z_{sp,3d} = Z_{sp,x} \times Z_{sp,y} \times Z_{sp,z}$$

Nå er energinivåene langs aksene like, og vi kan skrive

$$Z_{sp,3d} = Z_{sp}^3$$

Benytter man ligning 7.41 til å beregne energien, så ser man at energi og varmekapasitet blir det vi alt har funnet multiplisert med 3. Altså

$$C_{3d} = 3Nk \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta/T}}{(e^{\theta/T} - 1)^2} \quad (7.46)$$



Figur 7.5: Einsteins modell for varmekapasiteter, for stoffer med forskjellig karakteristisk temperatur, altså forskjellig fjærkonstant i vibrasjonene (til venstre). Denne modellen var publisert i 1907. Figuren til høyre er tatt fra Einsteins publikasjon og viser modellen sammenlignet med datapunkter for diamant.

7.6.7 Partisjonsfunksjon for systemer

Naturlig nok avhenger energier osv. av antall partikler til stede i systemet, noe som kommer tydelig fram i uttrykkene, der N er en multiplikativ konstant. Z_{sp} sier noe om sannsynligheter for tilstanden til én partikkel. Men hver partikkel har en uavhengig sannsynlighetsfunksjon. Partisjonsfunksjonen for hele systemet av *skillbare* partikler er

$$Z_N = (Z_{sp})^N$$

Med denne definisjonen kan vi rett og slett droppe faktoren N i uttrykkene 7.37 og 7.42 slik at vi har:

$$U = kT^2 \frac{\partial \ln Z_N}{\partial T}$$

og

$$S = k \ln Z_N + kT \frac{\partial \ln Z_N}{\partial T}$$

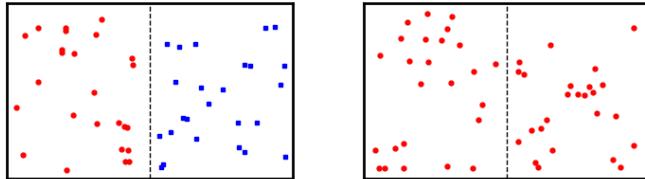
Vi må altså være påpasselige med å skille mellom Z_N og Z_{sp} .

7.7 Identiske partikler og ideelle gasser

Vi kan nå gå løs på en diskusjon av gasser av identiske molekyler. Boltzmanns Ω , ligning 7.25 viste seg å være et svært godt utgangspunkt for å få fram størrelser som indre energi og varmekapasitet. Men en annen av den statistiske fysikkens grunnleggere, J.W.Gibbs (1839-1903) påpekte et en inkonsistens i entropiberegningen. Denne inkonsistensen kalles for *Gibbs' paradoks*. Det fikk sin løsning ved å si at molekylene virkelig er *identiske*! I en makroskopisk beholder av identiske frie partikler kan man ikke følge posisjonen til hver partikkel, f.eks. ved å se på et filmopptak av molekylene i beholderen. Vi kan ikke lage film uten å belyse partiklene, og dermed påvirke dem, og dermed identifisere dem. Molekylene av samme slag er identiske, og den kombinerte bølgefunksjonen er antisymmetrisk eller symmetrisk under ombytte (akkurat som elektronene i et atom slik det er omtalt i seksjon 5.1). Men to molekyler av forskjellig type (f.eks. et H_2 molekyl og et O_2 molekyl) kan identifiseres som forskjellige, f.eks. ved massen. Om to gasser med forskjellig type molekyl blander seg, så vil entropien øke og det vil kreve mye energi å få skilt gassene fra hverandre igjen. Men om to beholdere med identiske gasser slås sammen, så er det ingen forandring på entropien. Vi kan bare sette ned skilleveggene igjen for å komme tilbake til den opprinnelige tilstanden, og vi har *ingen* mulighet for å samle de 'oprinnelige' molekylene i en av boksene tilbake i den boksen. I dette tilfellet har skilleveggene ingen betydning for entropien. Figur 7.6 illustrerer dette.

Ligning 7.25 gir en Ω som er alt for høy, for her har vi plassert en og en partikkel i rekkefølge, og ombytte av to partikler har ført til en ekstra mikrotilstand, i alle fall om de er på forskjellig energinivå. Vi må dele på antall mulige ombytter, nemlig $N!$. Dermed er antall mikrotilstander for identiske partikler gitt som

$$\Omega = \prod \frac{g_r^{n_r}}{n_r!}. \quad (7.47)$$



Figur 7.6: Gibbs paradoks. Om skilleveggen fjernes vil gassmolekylene blande seg. Entropien vi øke om gassene på hver side er forskjellig, men være uendret om det er samme gass på hver side av skilleveggen. Entropiberegningen blir rett hvis to identiske partikler som byttes om ikke gir forskjellige mikrotilstander.

Her blir det ekstra tydelig at dette bare kan gjelde dersom g_r er mye større enn n_r . Ω antas jo å være et stort helt tall.

Med utgangspunkt i ligning 7.47 kan vi igjen gå løs på beregning av partisjonsfunksjon ved maksimering av $\ln \Omega$, stirlings teorem, derivasjon, Lagrange multiplikatorer.., men det er slett ikke nødvendig, for det er kun en konstant, $\ln N!$ som skiller logaritmen av ligning 7.47 fra prosedyren vil alt har vært igjennom. Dette ledet har ingen betydning for maksimeringen.

Men i entropiberegningen er denne konstanten viktig. Istedentfor

$$S = k \left[\ln N! + \sum n_r \ln g_r - \sum \ln n_r! \right]$$

har vi

$$S = k \left[\sum n_r \ln g_r - \sum \ln n_r! \right].$$

ENTROPI FOR SYSTEMER AV IDENTISKE PARTIKLER

Enkeltpartikkell-partisjonsfunksjonen (som før ligning 7.39)

$$Z_{sp} = \sum g_r e^{-\epsilon_r/(kT)}$$

Entropi for identiske, ikke skillbare partikler:

$$S = k \left[N \ln Z_{sp} + NT \frac{\partial \ln Z_{sp}}{\partial T} - \ln N! \right] \quad (7.48)$$

Vi ønsker også å finne systemets partisjonsfunksjon, Z_N . For identiske partikler tar vi hensyn til at ombytte ikke har noen effekt på systemet. Dermed defineres systemets partisjonsfunksjon for *identiske* partikler slik:

$$Z_N = \frac{Z_{sp}^N}{N!}.$$

Med denne definisjonen kan de termodynamiske størrelsene skrives med samme formel for både identiske og skillbare partikler.

TERMODYNAMISKE STØRRELSER FRA PARTISJONSFUNKSJONEN

Alle termodynamiske størrelser kan beregnet ut fra partisjonsfunksjonen til systemet. Uttrykket for energi er

$$U = kT^2 \frac{\partial \ln Z_N}{\partial T} \quad (7.49)$$

og entropi:

$$S = k \ln Z_N + kT \frac{\partial \ln Z_N}{\partial T} \quad (7.50)$$

Systemets partisjonsfunksjon defineres ut fra Z_{sp} . For skillbare partikler har vi:

$$Z_N = Z_{sp}^N \quad (7.51)$$

For identiske partikler har vi:

$$Z_N = \frac{Z_{sp}^N}{N!} \quad (7.52)$$

7.7.1 Partisjonsfunksjonen for en ideell gass

For å finne de termodynamiske egenskapene i en ideell gass må vi nå finne degenerasjonen, g_r . Det viser seg at det er fullgott å finne denne faktoren ved å anta at beholderen er en kubisk boks, og finne den kvantemekaniske degenerasjonsfaktoren for identiske partikler i boksen. Denne beregningen er gjort i seksjon 4.1.1. Vi gjengir resultatet, ligning 4.5 som er:

$$g(\epsilon)d(\epsilon) = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}}\sqrt{\epsilon}d\epsilon = \frac{4V\sqrt{2\pi m^{\frac{3}{2}}}}{\hbar^3}\sqrt{\epsilon}d\epsilon$$

der V er volumet av boksen og m er massen av et gassmolekyl, og vi har satt inn for $\hbar = h/(2\pi)$. Vi kan anta at energinivåene ligger svært tett, slik at Boltzmannfordelingen blir

$$n(\epsilon) = Ag(\epsilon)e^{-\frac{\epsilon}{kT}} = AV\frac{4\sqrt{2\pi m^{\frac{3}{2}}}}{\hbar^3}\sqrt{\epsilon}e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \quad (7.53)$$

Det totale antallet gassmolekyler blir

$$N = AV\frac{4\sqrt{2\pi m^{\frac{3}{2}}}}{\hbar^3} \int_0^\infty \sqrt{\epsilon}e^{-\frac{\epsilon}{kT}} d\epsilon$$

Vi kan beregne integralet fra et integral oppgitt i appendikset, ligning A.3 $\int_0^\infty 2u^2 e^{-a^2 u^2} du = \frac{\sqrt{\pi}}{a^3}$. Vi setter $a = 1/\sqrt{kT}$ og

$$u = \sqrt{\epsilon}, du = d\epsilon/(2\epsilon^{1/2}) \text{ så } d\epsilon = 2\sqrt{\epsilon}du = 2udu.$$

Dermed er integralet lik $\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}$ og siden vi har $N = AZ_{sp}$ så blir

$$Z_{sp} = \frac{N}{A} = V \left[\frac{2\pi mkT}{h^2} \right]^{3/2} \quad (7.54)$$

7.7.2 Egenskaper til en ideell gass

Med partisjonsfunksjonen på plass kan vi beregne alle egenskaper teromodynamiske egenskaper til en ideell en-atomig gass.

Vi begynner med indre energi:

$$U = kT^2 \frac{\partial \ln Z_N}{\partial T} = kT^2 \frac{\partial(N \ln Z_{sp} - \ln N!)}{\partial T} \quad (7.55)$$

Vi setter inn for

$$\ln Z_{sp} = \frac{3}{2} \ln T + \ln \left(V \left(\frac{2\pi k}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right)$$

Den deriverte til konstantene er null, så $d \ln Z_{sp}/dT = 3/(2T)$ så

$$U = \frac{3}{2}NkT \quad (7.56)$$

Så bruker vi ligning 7.50 til å finne entropien i gassen:

$$S = k \ln Z_N + kT \frac{\partial \ln Z_N}{\partial T}$$

som gir

$$S = Nk \left[\ln V + \frac{3}{2}(\ln T + \ln \frac{2\pi mk}{h^2}) - \ln N + \frac{5}{2} \right] \quad (7.57)$$

Dette kalles for Sackur-Tetrode ligningen.

Vi kan også utlede tilstandsligningen til den ideelle gassen. For dette trenger vi trykket i gassen. Dette kan vi innføre ved hjelp av Helmholtz frie energi, ligning 7.17. Den frie energien, $F = U - TS$ lar seg lett beregne ut fra ligning 7.49 og 7.50. Den blir

$$F = -kT \ln Z_N \quad (7.58)$$

Her er altså

$$Z_N = \left(V \left[\frac{2\pi mkT}{h^2} \right]^{3/2} \right)^N / N!$$

Endringer i F frie energi kan uttrykkes ved ligning 7.19 som er

$$dF = -SdT - pdV.$$

Ved *konstant temperatur* har vi dermed

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = kT \frac{\partial \ln Z_N}{\partial V}$$

Men $\ln Z_N = N \ln V + \text{konstanter}$, så vi får at tilstandsligningen er

$$p = \frac{NkT}{V} \quad (7.59)$$

Partisjonsfunksjonen gir oss all informasjon om termodynamikken til systemet!

Med informasjon om energien til en ideell gass, så er det enkelt å finne varmekapasiteten til den, i alle fall i situasjoner der man ikke tillater at gassen skal gjøre arbeid ved å utvide seg. Når volumet holdes konstant så er varmekapasiteten til ideelle monatomiske gasser gitt som:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3}{2}Nk \quad (7.60)$$

ved bruk av ligning 7.56. Dette er et velkjent resultat, og det er kanskje også kjent for mange at varmekapasiteten er gitt som $\frac{1}{2}Nk$ pr. frihetsgrad, altså pr. dimensjon i det tredimensjonale rom. Vi kan bemerke at i denne beregningen er det allerede tatt hensyn til alle tre romlige dimensjoner i beregningen av degenerasjonen $g(\epsilon)$, så resultatet stemmer med dette.

7.7.3 Hastighetsloven fra Boltzmannfordelingen

Vi har altså

$$n(\epsilon) = A \frac{4\pi m V}{h^3} \sqrt{2m\epsilon} e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} d\epsilon$$

Nå er det totale antallet partikler gitt som $N = AZ_{sp}$ der Z_{sp} er partisjonsfunksjonen vi har funnet:

$$Z_{sp} = V \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2}$$

så vi setter inn for

$$A = \frac{N}{Z_{sp}} = \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2}$$

og får:

$$n(\epsilon) d\epsilon = \frac{2\pi N}{(\pi k T)^{3/2}} \sqrt{\epsilon} e^{-\frac{\epsilon}{k T}} d\epsilon$$

Hastighetene kommer inn ved $\epsilon = \frac{1}{2}mv^2$ slik at

$$n(v) dv = n(\epsilon) \frac{d\epsilon}{dv} dv = n(\epsilon) mv dv$$

Vi har $d\epsilon = mv dv$, og $\epsilon^{\frac{1}{2}} = (\frac{m}{2})^{\frac{1}{2}}v$, så vi får

$$n(v) dv = N \left(\frac{2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m}{k T} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv \quad (7.61)$$

Altså det samme som Maxwell fikk med sine argumenter (lign. 7.8). I dette tilfellet er det degenerasjonsfaktoren, $g(\epsilon)$, som er beregnet i det tredimensjonale rommet som gjør at vi får samme resultat som ved å transformere v^2 til kulekoordinater i et hastighetsrom.

Vi kan også legge merke til at Plancks konstant kansellerer, slik at vi får samme uttrykk. Men mens Maxwell nok måtte se på trykkforhold i en ideell gass for å si noe om konstanten β og temperatur, har vi her allerede innført temperaturen utfra Boltzmanns postulat om entropi.

7.8 Diatomiske gasser

Gasser som består av fleratomiske molekyler har større varmekapasitet enn de monatomiske gassene. Forklaringen på dette er at de fleratomige molekyler har flere måter å ta opp energi på enn å øke hastigheten. Vi skal se på dette diatomiske gasser, som oksygen, hydrogen og nitrogen (O_2 , H_2 og N_2). Diatomiske gasser kan ta opp energi uten å øke hastigheten på to måter:

- De kan rotére, altså få tilført rotasjonsenergi. Å få et molekyl til å rotere krever lite energi, så dette skjer allerede ved lave temperaturer.
- De to atomene kan begynne å vibrere. Energivårene for vibrasjon er relativt høye, så dette inntreffer gjerne ved høye temperaturer.

Molekylene har dermed tre typer energi, fra translasjon, rotasjon og vibrasjon. Totalenergien er

$$\epsilon_{tot} = \epsilon_{trans} + \epsilon_{rot} + \epsilon_{vib}$$

Sannsynligheten for at en partikkel skal ha energi ϵ_{tot} er fortsatt gitt av Boltzmannfordelingen

$$n(\epsilon_{tot}) = g_{tot}(\epsilon_{tot}) e^{-\frac{\epsilon_{tot}}{kT}}$$

For hver romlige tilstand fins det også $g_{rot} \times g_{vib}$ tilstander, så når vi setter alt sammen får vi

$$n(\epsilon_{tot}) = g_{trans} e^{-\frac{\epsilon_{trans}}{kT}} g_{rot} e^{-\frac{\epsilon_{rot}}{kT}} g_{vib} e^{-\frac{\epsilon_{vib}}{kT}}$$

Dermed blir partisjonsfunksjonen

$$Z_{sp} = Z_{trans} \times Z_{rot} \times Z_{vib}$$

7.8.1 Rotasjonsenergi

Toatomige rotasjonstilstander er diskutert i seksjon 6.1.2. Energivårene er gitt ved ligning 6.1 altså

$$\epsilon_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$

der I er trehetsmomentet til molekylet, og l er et helt tall, $l = 0, 1, 2, \dots$. I kvantemekanikken har vi også lært at det fins $2l + 1$ mulige z-komponenter for hver verdi av l . Dermed har vi $g_l = 2l + 1$ og partisjonsfunksjonen for rotasjonstilstander blir

$$Z_{rot} = \sum_0^{\infty} (2l+1) e^{-\frac{\hbar^2}{2IkT} l(l+1)} \quad (7.62)$$

Vi definerer en karakteristisk temperatur

$$\theta_{rot} = \frac{\hbar^2}{2Ik}$$

Når temperaturen i systemet er lavere enn dette så vil ha veldig lite rotasjonsenergi i systemet, for da er eksponenten i uttrykket stor og negativ. θ_{rot} er mye lavere enn romtemperaturen for alle gasser. Derfor er det svært relevant se på hvordan partisjonsfunksjonen blir når $T \gg \theta_{rot}$.

For høye temperaturer har vi mye rotasjon, altså høy verdi av l . Da kan vi sette $l(l+1) \approx l^2$. Partisjonsfunksjonen kan da skrives

$$Z_{rot} = \int_0^\infty 2le^{-\frac{\theta_{rot}}{T}l^2} dl$$

Løsningen av integralet er $\frac{T}{\theta_{rot}}$. Dermed er, for høye temperaturer

$$U = NkT^2 \frac{\partial \ln(T/\theta_{rot})}{\partial T} \approx NkT$$

(observer at $\ln(T/\theta) = \ln T - \ln \theta$) Dette er som forventet for et energibidrag fra et system med to frihetsgrader, nemlig to rotasjonsaksjer.

Den karakteristiske temperaturen θ_{rot}

Hva er 'høye temperaturer' for rotasjonsenergier? Det er lett å forestille seg at det ikke skal mye energi til før et toatomig molekyl begynner å rotere. Hva skal til for at molekylet skal hoppe fra $l = 0$ til $l = 1$, eller mer? Den karakteristiske temperaturen sier noe om dette.

Trehetsmomentet til et O_2 -molekyl er gitt av atommassen, omtrent 16u og avstanden mellom atomene, som er omtrent 0,12 nm.

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} d^2 \approx 8 \times 1,66 \times 10^{-27} \times (0,12 \times 10^{-9})^2 \text{ kgm} = 0,19 \times 10^{-45} \text{ kgm}$$

Da blir den karakteristiske temperaturen

$$\theta_{rot} = \frac{\hbar^2}{2Ik} = \frac{(6,63 \times 10^{-34})^2}{8\pi^2 \times 0,19 \times 10^{-45} \times 1,38 \times 10^{-23}} = 4,9 \text{ K}$$

Dermed kan vi for alle vanlige anvendelser si at rotasjonsbidraget til varmekapasiteten (konstant volum) til diatomiske gasser er

$$C_{rot} = \frac{\partial U_{rot}}{\partial T} = Nk$$

7.8.2 Vibrasjonsenergi

Vibrasjoner har vi alt gått igjennom i omtalen av varmekapasiteter for krys-taller. Utgangspunktet er at energinivåene for vibrasjonsenergi er gitt som

$$\epsilon_{vib} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

der $n = 0, 1, 2, \dots$. Partisjonsfunksjonen er gitt som summen, ligning 7.43 og ble utregnet til

$$Z_{vib} = \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{1 - e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}} \quad (7.63)$$

Det er igjen naturlig å definere en karakteristisk temperatur

$$\theta_{vib} = \frac{\hbar\omega}{k}$$

Varmekapasiteten på grunn av vibrasjon blir den samme som den vi har regnet ut for et endimensjonalt krystall ligning 7.45. Men i motsetning til tredimensjonale krystaller, der vi tenker oss at atomene henger i fjærer langs alle de tre romlige aksene, så har vi her bare en fjær, slik at ligning 7.45 ikke multipliseres med 3.

Den karakteristiske temperaturen θ_{vib}

For toatomige molekyler er θ_{vib} forholdsvis høy, flere tusen kelvin. Over denne temperaturen vil bidraget til varmekapasiteten til gassen gå mot $C_{vib} = Nk$. For mer komplekse molekyler, som f.eks. metan og CO_2 fins det imidlertid mange vibrasjonsmodi med mye lavere energinivåer. Dette er også nevnt i seksjon 6.1.4. Dette vil resultere i en mye lavere karakteristisk temperatur, og dessuten en karakteristisk temperatur for hvert mulige vibrasjonsmodus, og bidrag til varmekapasiteten på Nk for hvert modus.

7.8.3 Oppsummering for diatomiske gasser

For diatomiske molekyler skriver vi partisjonsfunksjonen slik:

$$Z = Z_{trans} \times Z_{rot} \times Z_{vib}.$$

Den indre energien i gassene får dermed tre bidrag som for høye temperaturer blir

$$U = U_{trans} + U_{rot} + U_{vib} = (\frac{3}{2} + 1 + 1)NkT = \frac{7}{2}NkT$$

For romtemperaturer vil rotasjonsenergier alltid bidra til U , mens vibrasjonsbidraget vil være ubetydelig, slik at $U \approx \frac{5}{2}NkT$

7.9 Kvantestatistikk

Til nå har vi sett på systemer uten degenerasjon, eller med en svært høy degenerasjonsfaktor sammenlignet med antall partikler som kan plasseres på hver mulige energi. Da har vi kunnet bruke Maxwell-Boltzmanns fordelingslov for å beskrive systemene i noe som kan kalles klassisk statistisk fysikk. Vi likevel tatt en kvantemekanisk 'snarvei' for å beregne degenerasjonsfaktoren g_r , ved å benytte det kvantemekaniske resultatet for en partikkel i boks. Dette resultatet kunne Boltzmann og Gibbs og de andre grunnleggerne ikke ha visst om da de la grunnlaget for det statistiske fysikken. De utviklet termodynamikken ved å studere tilstander i et seksdimensjonalt *faserom* isteden. Hver tilstand er spesifisert med en posisjon, (x, y, z) , og en bevegelsesmengdevektor (p_x, p_y, p_z) i faserommet. Da kommer det også fram en 'degenerasjonsfaktor' basert på å oversette bevegelsesmengden til sfæriske koordinater slik Maxwell benyttet seg av for å finne hastighetsfordelingen. Denne, mer generelle beskrivelsen av statistisk fysikk er ikke tema for denne læreboken.

Videre må Gibbs paradoks virkelig ha vært et ubehagelig paradoks før kvantemekanikken ble oppfunnet med sine bølgefunksjoner og sannsynlighetsfortolkning av denne. Konseptet med komplett symmetrisering av systemer av partikler under ombytte av ethvert par av partikler ble innført, og som vi har sett fikk paradokset sin løsning. Pauli kunne også bruke symmetri under ombytte til å komme med sitt eksklusjonsprinsipp som postulerte antisymmetrisering av bølgefunksjonene til et system av *fermioner*. Den andre muligheten, nemlig bølgefunksjoner som er symmetriske under ombytte, gir en beskrivelse av *bosoner*. Det er videre etablert at fermioner har halvtallig spinn, mens bosoner har heltallig spinn. I forbindelse med diskusjonen av atomer med flere elektroner, seksjon 5.1, har vi diskutert hvordan vi symmetriserer bølgefunksjonen.

Kvantestatistikken omhandler systemer der symmetrisering under ombytte er nødvendig, og der degenerasjonsfaktoren ikke nødvendigvis må være stor sammenlignet med antall partikler.

7.9.1 Fermi-Dirac-statistikk

To fermioner kan altså ikke være i samme tilstand. Derfor må vi omformulere antall tilstander for identiske partikler for å ta hensyn til det. Uttrykket vi har arbeidet med til nå er (ligning 7.47)

$$\Omega = \prod \frac{g_r^{n_r}}{n_r!}$$

For hver partikkel vi fyller opp i tilstand r må vi nå anta at det blir tilgjengelig en plass mindre. Dette gjelder helt til vi har fått n_r partikler på plass. Antall måter som disse partiklene kan plasseres på er dermed $\frac{g_r!}{(g_r - n_r)!}$. Dermed skal faktoren $g_r^{n_r}$ erstattes med dette. Men ombytte av rekkefølge i plasseringen av partiklene er uvesentlig, så antall mulige tilstander for et sett fermioner er gitt som

$$\Omega = \prod \frac{g_r!}{n_r!(g_r - n_r)!} \quad (7.64)$$

Prosedyren for å komme fram til den mest sannsynlige konfigurasjonen er nøyakig den samme som før, se seksjon 7.6.1, og vi går ikke igjennom den en gang til. Dermed blir det en regneoppgave å vise at uttrykket fører til Fermi-Dirac fordelingen av antallene på hvert energinivå:

$$n_r = \frac{g_r}{e^{-\alpha + \beta \epsilon_r} + 1}$$

Her er igjen $\beta = 1/(kT)$, mens α er lagrange-multiplikatoren knyttet til kravet om konstant antall partikler.

I det kontinuerlige tilfelle skriver vi

$$n(\epsilon) = \frac{g(\epsilon)}{e^{-\alpha + \epsilon/(kT)} + 1} \quad (7.65)$$

Vi har konstant antall partikler:

$$N = \int_0^\infty \frac{g(\epsilon)d\epsilon}{e^{-\alpha + \epsilon/(kT)} + 1} \quad (7.66)$$

Vi knytter α til antallsnormalisering, men kan ikke lenger definere partisjonsfunksjonen på samme måte. For å sikre antallsnormalisering ved alle temperaturer, så må også α være en funksjon av temperaturen. Vi setter

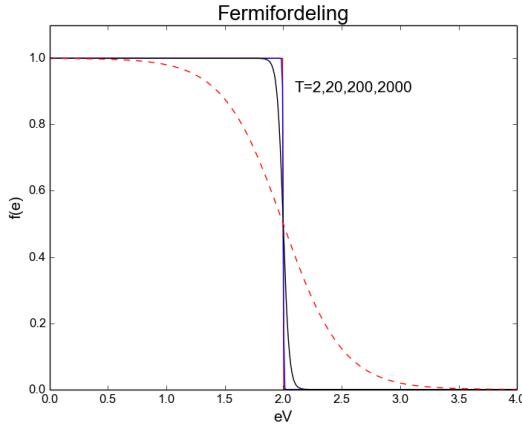
$$\alpha = \frac{\mu}{kT}$$

μ kalles *det kjemiske potensial*. μ er ofte selv en funksjon av temperaturen, men vi skriver fordelingsfunksjonen slik:

$$n(\epsilon) = \frac{g(\epsilon)}{e^{(\epsilon - \mu)/(kT)} + 1} \quad \text{eller} \quad \frac{n(\epsilon)}{g(\epsilon)} = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/(kT)} + 1} \quad (7.67)$$

For store ϵ ser vi at vi får igjen Boltzmannfordelingen $n/g = Ae^{-\epsilon/(kT)}$ med $A = e^{\mu/(kT)}$.

Hva skjer med fordelingsfunksjonen for lave temperaturer? La oss plotte $n(\epsilon)/g(\epsilon)$ for forskjellige temperaturer (fig. 7.7). Fra figuren kan vi bemerke følgende:



Figur 7.7: Fermi-Dirac-fordelingen for forskjellige temperaturer. I figuren er μ satt lik 2 elektronvolt.

- For lave temperaturer er $f(\epsilon)$ nær 1 for $\epsilon < \mu$, og nær 0 for $\epsilon > \mu$.
- $f(\epsilon = \mu) = 1/2$
- Når temperaturen øker vil fordelingen rundes av rundt $\epsilon = \mu$. I et lite intervall rundt dette punktet blir fordelingen tilnærmet $\frac{1}{2+x}$ med $x = (\epsilon - \mu)/(kT)$
- Den 'klassiske' grensen inntreffer når degenerasjonsgraden er mye større enn antall partikler som skal plasseres. Da er altså $n(\epsilon)/g(\epsilon) \ll 1$. og termen $e^{(\epsilon-\mu)/(kT)}$ vil være stor. Dette er bare mulig når ϵ er mye større enn μ . Når dette er tilfelle, så ser vi at fordelingen kan tilnærmes med $n(\epsilon) = g(\epsilon)e^{-\epsilon/(kT)}$

For våre anvendelser så bruker vi en annen betegnelse for μ . Vi kaller det for *Fermienergien*, $E_F = \mu$.

Til slutt nevner vi at denne funksjonen opptrer i andre sammenhenger: Om man skifter fortegn foran eksponenten ser vi at Fermi-Dirac fordelingen, n/g , er en *logistisk funksjon* som generelt skrives

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-r(x-x_0)}}$$

Denne beskriver eksponensiell vekst som etterhvert bremses opp og flater ut mot et maksimum. For $x \ll x_0$ får vi igjen loven for eksponentiell vekst $f(x) \approx Ae^{rx}$, og ved $x = x_0$ har vi $f(x_0) = 1/2$, altså halvveis til maksimum

($f = 1$). Dette er utgangspunkt for diskusjoner av for eksempel pandemier, der man begynner med eksponensiell vekst. Men antall mennesker som kan bli smittet er endelig, så veksten vil avta etterhvert som antallet usmittede reduseres, inntil hele befolkningen er smittet.

7.9.2 Fermigass

En Fermigass består av en ansamling fermioner som ikke vekselvirker med hverandre og er sperret inni et volum, V . Hvordan fordeler energiene seg når temperaturen er lav, tilnærmet null? Da er de *termiske* energiene til partiklene mye lavere enn E_F .

Fermifordelingen kan da antas konstant lik 1 opp til en terskel, der den brått skifter til verdien 0. Når tettheten er stor nok vil fermigassen inneholde mange flere partikler enn det er plass på nivåer svarende til den termiske energien for frie partikler. Dermed må partiklene i gassen anta energier som kan være mye høyere enn dette. Degenerasjonsfaktoren forteller hvor mange partikler det er på hvert nivå, og vil også gi energinivået til partikkelen med høyest energi.

Fermioner har halvtallig spinn. For hver romlige tilstand til en partikkel er det da to spinntilstander, $s_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$ langs en kvantiseringsakse, og plass til to partikler med motsatt rettet spinn. Vi kan som sagt sette nevneren i ligning 7.66 lik 1, og antallsnormeringen blir

$$N = 2 \times \int_0^{E_F} g(\epsilon) d\epsilon$$

Vi har multiplisert med 2 siden vi har to spinntilstander pr. energitilstand. Den romlige degenerasjonen, $g(\epsilon)$, kan vi anta er den samme som vi har brukt før, nemlig den vi har funnet for en kvantemekanisk partikkel i boks, se seksjon 4.1.1. Vi har

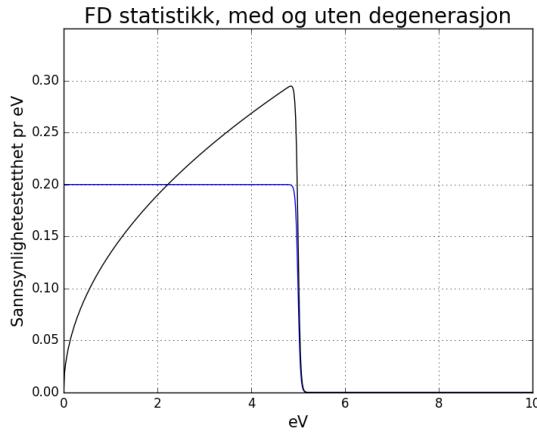
$$2g(\epsilon) = 4\pi m V \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar^3} = 4\pi m V \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (7.68)$$

Legg merke til at vi har fått inn volumet av gassen. Vi integrerer opp (en konstant ganger $\int_0^\infty \sqrt{\epsilon} d\epsilon = \frac{2}{3}\epsilon^{3/2}$) og får

$$N = \frac{(2mE_F)^{3/2}}{\hbar^3} \frac{V}{3\pi^2} \quad (7.69)$$

Dermed er Fermienergien gitt som

$$E_F = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (7.70)$$



Figur 7.8: Fermifordelingen, og Fermi-Diracfordinelen multiplisert med degenerasjonsfaktoren (lign. 7.68), normerte, når det antas at temperaturen (mer presist: kT), er mye lavere enn Fermienergien.

Den gjennomsnittlige energien til partiklene i en Fermigass blir

$$\langle E \rangle = \frac{2 \times \int_0^{E_F} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon}{N} = \frac{2\pi V \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}}{N} \int_0^{E_F} \epsilon^{3/2} d\epsilon$$

Integralet er lik $\frac{2}{5}\epsilon^{5/2}$ og vi setter inn for N (lign. 7.69)

$$N = \frac{(2mE_F)^{3/2}}{\hbar^3} \frac{V}{3\pi^2}$$

og vi får

$$\langle E \rangle = \frac{3/2}{E_F^{3/2}} \times \frac{2}{5} E_F^{5/2} = \frac{3}{5} E_F \quad (7.71)$$

Det er altså tettheten av de frie fermionene som bestemmer Fermienergien i et system. I seksjon 8.4.1 skal vi lage en modell for de 'frie' elektronene i et metall som en fermigass. Her skal vi bare vise hva fermienergien blir for et stoff med antallstetthet $N/V = 10^{24}/cm^3$. Den blir ca 5eV. Dette er svært høyt sammelignet med energien til frie 'termiske' partikler ved romtemperatur. Ved 300K har vi ($kT = 0,0000862eV/K \times 300K = 0,026eV$), så typisk termisk energi er $\frac{3}{2}kT = 0,035eV$.

Nukleonene i en atomkjerne er enda mer tettpakket enn elektronskyer i ledningsbåndet. I kapittelet om kjernefysikk skal vi se at Fermienergien i en kjerne er rundt 40 MeV!

7.9.3 Bose-Einstein statistikk

Man skulle tro at faktoren $g_r^{n_r}/n_r!$ gav et korrekt bilde av hvordan man kan plassere så mange partikler man vil på antallet tilstander som fins på gitt energinivå, nemlig g_r . Men den indiske fysikeren Satyendra Bose så annerledes på det. Han sendte sine betraktninger til et engelsk tidsskrift, men ble refusert. Så tok han kontakt med Einstein som oversatte manuskriptet og fikk det publisert i et tysk tidsskrift i 1924.

Det er altså g_r tilstander å velge mellom for hver partikkell på nivå ϵ_r . Vi må se på de g_r tilstandene som $g_r - 1$ skillevegger mellom partiklene som plasseres. Disse skilleveggene skal kunne plasseres tilfeldig mellom partiklene med samme energi. Dermed skal vi totalt plassere n_r partikler og $g_r - 1$ skillevegger. Dette kan gjøres på $(n_r + g_r - 1)!$ måter når det holdes orden på rekkefølgen av partiklene og skilleveggene som plasseres. Men ombytte av to identiske partikler, og ombytte av to skillevegger gir ingen ny mikrotilstand.

Antall mulige tilstander for et sett bosoner er dermed gitt som

$$\Omega = \prod \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i! (g_i - 1)!} \quad (7.72)$$

Vi kan igjen gå gjennom maksimeringsprosedyren og ser at dette fører til Bose-Einstein fordelingen av antallene på hvert energinivå

$$\frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{e^{-\alpha + \epsilon_i/(kT)} - 1} \quad (7.73)$$

α er lagrange-multiplikatoren knyttet til kravet om konstant antall partikler. Legg merke til at vi får tilbake Boltzmannfordelingen når temperturen blir høy. Da ser vi at $n_i/g_i \ll 1$.

7.9.4 Fotoner og sort stråling

Sort stråling ble omtalt i denne boka allerede i kapittel 2.1. Men det er først med kjennskap til statistisk fysikk og kvantemekanikk at vi kan utlede formelen for spektralfordelingen. Alle legemer med temperatur sender ut elektromagnetisk stråling! Frekvens-spekteret av strålingen avhenger bare av temperaturen. Den sorte strålingen kan forklares som en 'gass' av fotoner som er i termisk likevekt med legemet som sender ut strålingen.

Fotoner er bosoner, og kan dessuten skapes og annihileres. Derfor har vi ingen betingelse på antallet. For å oppheve antallsbevaring kan vi ikke ha Lagrangemultiplikatoren α . Vi setter den lik 0, altså $e^{-\alpha} = 1$.

Da er B.E. fordelingen

$$\frac{n_r}{g_r} = \frac{1}{e^{\epsilon_r/(kT)} - 1}$$

Vi må finne ut av tilstandstettheten $g(\epsilon)$ for fotoner innestengt i en boks med side L . Vi antar at feltet (lyset) ikke trenger igjennom boksen, altså er E-feltet lik null i veggene. Løsninger for E-feltet må skrives:

$$\psi = A \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z$$

med føringer

$$\psi(0, 0, 0) = \psi(L, 0, 0) = \psi(0, L, 0) = \psi(0, 0, L) = 0$$

Da må vi ha $k_x L = k_y L = k_z L = n\pi$ der n er et helt tall. Husk også at bølgetallet er gitt ved bølgelengden som $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Vi har altså en bølgetallsvektor \vec{k} som må oppfylle

$$k^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Dette gjelder enten vi løser Maxwell's ligninger, eller om vi ser partikler i boks som oppfyller Schrödingerligningen (S.L.).

Degenerasjonen for partikkelen i boks er utledet i seksjon 4.1.1, og vi fant at degenerasjonen $g(\epsilon)$ var proporsjonal med $\sqrt{\epsilon}$.

Men fotoner er noe annet enn ikke-relativistiske partikler. Framgangsmåten for å finne degenerasjonsgraden er likevel den samme, men det er en annen sammenheng mellom energiene og bølgetallet k . Vi definerer en radius i rommet av kvantetall på samme måte som i seksjon 4.1.1

$$R_N = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \frac{L}{\pi} |k|$$

Vi beregner så antall tilstander, $G(k)$, med bølgetall mellom 0 og k som volumet i en åttendels kule:

$$G(k) = \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi \frac{L^3}{\pi^3} k^3$$

og deriverer m.h.p. k for å finne antallet i et 1/8 kuleskall med radius k

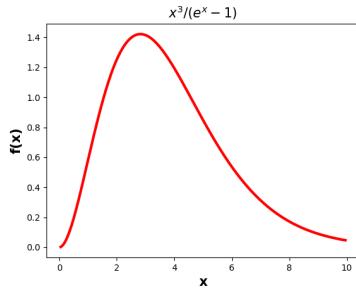
$$g(k) dk = \frac{V k^2}{2\pi^2} dk$$

Fotonenergien er

$$\epsilon = h\nu = hc/\lambda = \hbar ck$$

Videre har vi $d\epsilon = \hbar c dk$ slik at vi får

$$g(\epsilon) d\epsilon = 2 \times \frac{V \epsilon^2}{2\pi^2 (\hbar c)^3} d\epsilon \quad (7.74)$$

Figur 7.9: Funksjonen $x^3/(e^x - 1)$.

Faktoren 2 kommer av at fotonet har spinn $j=1$. Dette skulle tilsi tre mulige spinnkomponenter. Når man velger z-akse langs flygeretningen burde man kunne ha $m = -1, 0$ eller -1 . Imidlertid viser det seg at fotoner med lyshastighet bare har spinnkomponenter $m = 1$ eller $m = -1$, altså bare to mulige spinntilstander. (Klassisk svarer dette til at elektromagnetiske bølger i vakuum er *transverse* med to polarisasjonsretninger, og ingen longitudinell polarisasjon)

Dermed får vi en energifordeling i volumet på grunn av sort stråling gitt som

$$U(\epsilon)d\epsilon = \epsilon n(\epsilon)d\epsilon = \frac{V\epsilon^3}{\pi^2(\hbar c)^3} \frac{1}{e^{\epsilon/(kT)} - 1} d\epsilon$$

Eller som funksjon av frekvens ν

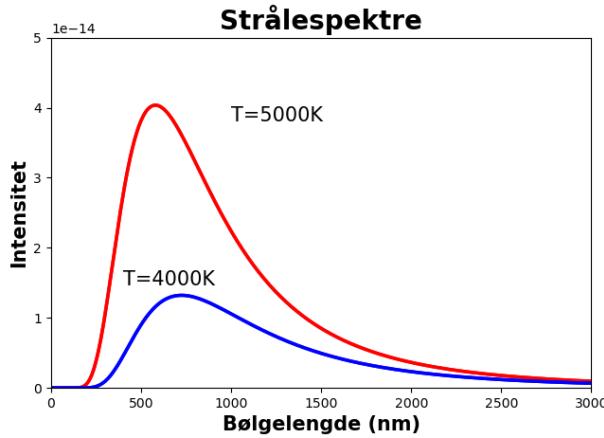
$$U(\nu)d\nu = h\nu n(\epsilon)d\nu = V \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/(kT)} - 1} d\nu \quad (7.75)$$

Det var Max Planck som kom fram til dette resultatet. Klassisk elektromagnetisme gav et divergerende (uendelig) resultat for høye frekvenser ("ultrafiolett katastrofe"). Planck fant først loven som en empirisk korreksjon som var nødvendig for å beskrive eksperimentelle data. Senere utledet han samme resultatet utfra statistisk mekanikk.

Total energi p.g.a sort stråling i volumet blir $\int_0^\infty U(\epsilon)d\epsilon$. For å finne dette setter vi $x = \epsilon/(kT)$, slik at $\epsilon = kTx$ og $d\epsilon = kTdx$. Dermed får vi en total energi som er proporsjonal med T^4 .

$$U = \frac{V}{\pi^2(\hbar c)^3} (kT)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Integralet har verdi $\pi^4/15$, slik at den totale utstrålte energi er



Figur 7.10: Plancks strålingslov for forskjellige temperaturer. Siden total intensitet er proporsjonal med T^4 så blir høydene og arealet under kurvene svært forskjellig.

$$U = \frac{\pi^2 V k^4}{15(\hbar c)^3} T^4 \quad (7.76)$$

Energitettheten er U/V , og hvis man tenker seg at den sorte strålingen kan komme ut av et lite hull i boksen, så kan det vises at energifluksen gjennom en enhetsflate er

$$\eta = \frac{U}{4V} c$$

slik at vi har

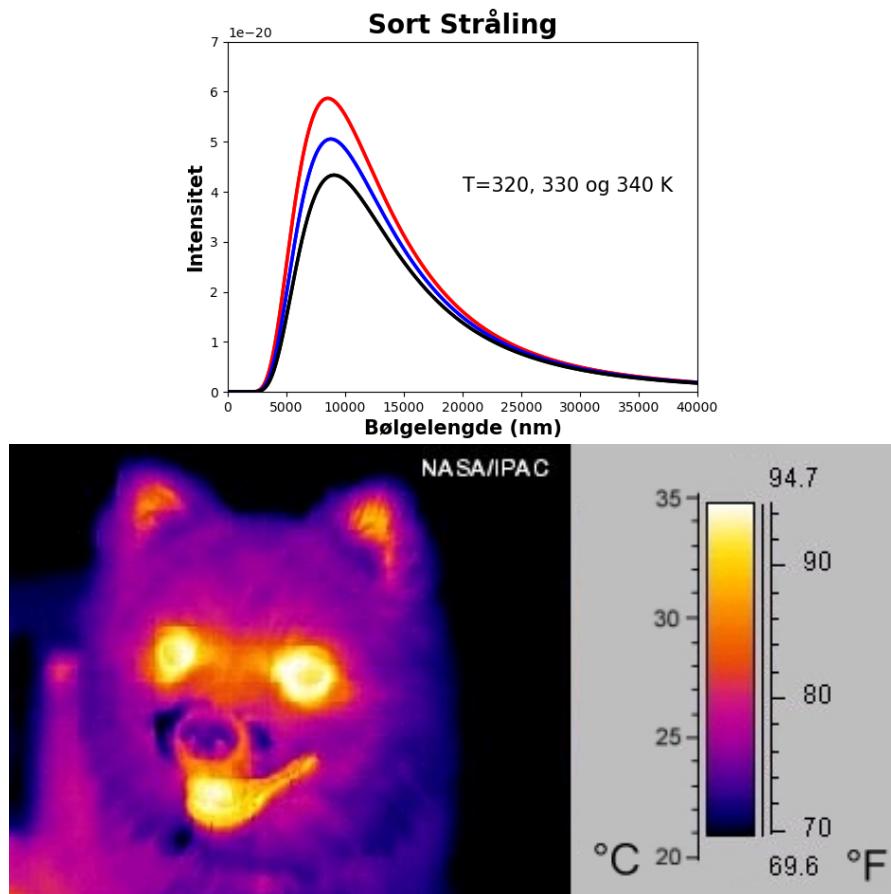
$$\eta = \frac{\pi^2 k^4}{60 \hbar^3 c^2} T^4 = \sigma T^4 \quad (7.77)$$

Dette kalles Stefans lov, og σ er Stefans konstant⁷. Ofte beskriver man elektromagnetisk stråling med bølgelengden den har. Vi har $\epsilon = hc/\lambda$, og $d\epsilon = -(hc/\lambda^2)d\lambda$ ⁸, så

$$U(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi V}{(hc)^3} \frac{(hc)^4}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/(\lambda kT)} - 1} d\lambda$$

⁷Josef Stefan: Østerisk fysiker som fant sammenhengen utfra eksperimentelle data noen år før den ble utledet teoretisk (av Boltzmann). Sammenhengen kalles også Stefan-Boltzmanns lov. Vår utledning er basert på Bose-Einstein statistikk, så Boltzmanns utledning må ha vært gjort på en annen måte.

⁸Minustegnet betyr at λ synker når ϵ stiger. Men i det endelige uttrykket multipliserer vi funksjonen med enda et minustegn for å framstille den som funksjon av en stigende verdi av λ

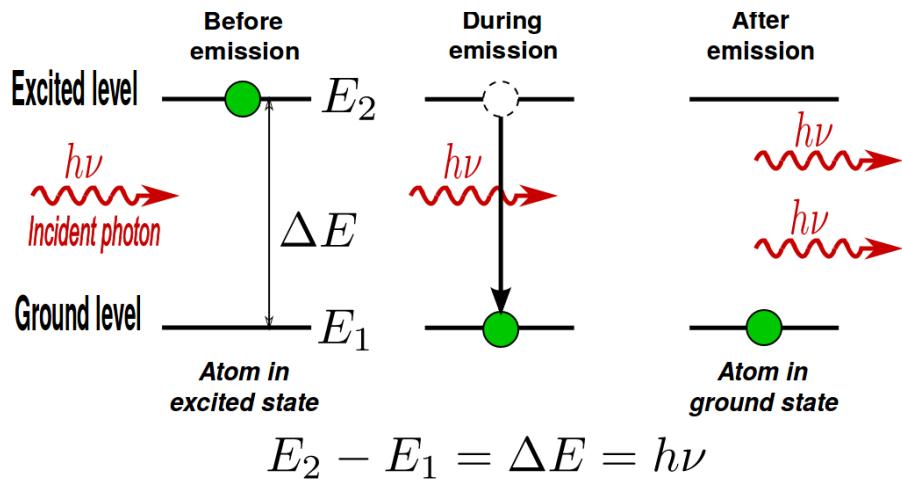


Figur 7.11: Strålingsintensitet varierer sterkt med temperaturen til objektet som stråler. Nederst er et nattbilde med kamera som er følsomt for infrarødt lys. Fra Wikipedia. Strålingsintensitet er gjort om til passende farger.

7.9.5 Einstein's tilnærming til sort stråling - og laser

I det ovenstående har vi diskutert sort stråling som egenskaper til en fotongass. 'Gassen' er i termodynamisk likevekt med et sort legeme. Planck's opprinnelige utledning baserte seg ikke på fotoner, men på at likevekten mellom lyset og legemet oppsto gjennom at energiutvekslingen bare foregikk gjennom kvantiserte sprang med energiendringer $\Delta E = h\nu$. Antakelsen var at det var 'resonatorer' i det sorte legemet.

Einstein foreslo i 1905 at lys besto av fotoner med energi $h\nu$, og kunne med dette forklare den fotoelektriske effekt. (se kapittel 2.2.1) I 1917 publiserte han en utledning av Plancks strålingslov ved bruk av denne ideen om at



Figur 7.12: Figur fra wikipedias artikkel om laser (forfatter ”vladislav”)

lys består av fotoner. Vekselvirkningen med veggene antas at kan foregå gjennom stimulert emisjon og absorbsjon av stråling: Krystallstrukturene i veggene absorberer og emitterer fotoner med energi $\epsilon = h\nu$ der $\epsilon = E_j - E_i$. Denne ideen viste seg å være riktig. Fri atomer og molekyler kan også både emittere og absorbere stråling, og fenomenet ligger til grunn for lyskilder basert på laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation)

Stimulert absorpsjon og emisjon må gjelde alle typer overganger, også de som finner sted ved langbølget sort stråling. Emisjon av fotoner kan skje både *spontant* og *stimulert*. Absorbsjon er nødvendigvis *stimulert* p.g.a. energibevaring.

Anta at vi har:

- En tetthet, $n(\nu)$, av fotoner med frekvens ν .
- En sannsynlighet, A_{ji} for overgang fra nivå j til nivå i ved emisjon av et foton.
- En sannsynlighet B_{ji} for overgang fra j til i ved *stimulert* emisjon.
- En sannsynlighet B_{ij} for overgang fra i til j ved absorbsjon.

Antall overganger fra nivå i til j ved absorbsjon:

$$N_{ij} = N_i B_{ij} n(\nu)$$

Antall overganger fra j til i , og emisjon av et foton:

$$N_{ji} = N_j (A_{ji} + B_{ji}n(\nu))$$

Antall overganger fra eller til et nivå j eller i er også proporsjonal med antallene som fins på nivåene i utgangspunktet, N_j og N_i . Videre skal vi ha termisk likevekt, altså $N_{ij} = N_{ji}$, så

$$N_i B_{ij} n(\nu) = N_j (A_{ji} + B_{ji}n(\nu))$$

Løst m.h.p. $n(\nu)$

$$n(\nu) = \frac{A_{ji}/B_{ij}}{\frac{N_i B_{ij}}{N_j B_{ji}} - 1}$$

Maxwell-Boltzmann statistikk (som var den typen statistikk man kjente til i 1917) sier: $N_i = Ce^{-E_i/kT}$ (og tilsvarende for j), så:

$$\frac{N_i}{N_j} = e^{-(E_i - E_j)/kT} = e^{h\nu/kT}$$

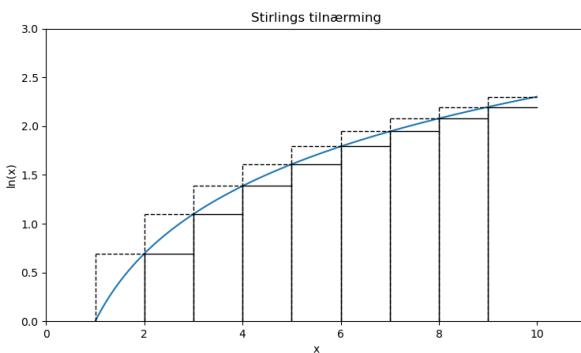
Hvis vi antar at sannsynligheten for stimulert emisjon er lik sannsynligheten for absorpsjon, altså $B_{ij} = B_{ji}$ (se også seksjon 5.3.2); så får vi

$$n(\nu) = \frac{A_{ji}}{B_{ij}} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Hvert lyskvant har energi $\epsilon = h\nu$, så energitettheten som funksjon av frekvens blir

$$U(\nu) = h\nu \frac{A_{ji}}{B_{ij}} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Forholdet $\frac{A_{ji}}{B_{ij}}$ kan vi identifisere med degenerasjonsfaktoren ligning 7.74 som er proporsjonal med $\epsilon^2 = (h\nu)^2$. Vi ser at vi da kommer tilbake til Plancks strålingslov, ligning 7.75.



Figur 7.13:

7.10 Oppgaver

1. Lag et plott som viser sannsynlighetsfordelingen for en av hastighetskomponentene (f.eks. v_x) i en gass.
2. Beregn middelverdiene $\langle v^2 \rangle$ og $\langle v \rangle$ ved bruk av ligning 7.8
Hint: Integraler finnes i appendiks. Om man ønsker en forklaring på hvordan disse integralene blir beregnet, så kan man se på <http://mathworld.wolfram.com/GaussianIntegral.html>.
3. Sett resultatet du fant for $\langle v^2 \rangle$ inn i ligning 7.10 for å finne sammenhengen mellom β og temperatur.
4. a) Lag figur(er) som viser hastighetsfordelingene til gassene helium og nitrogen ved temperaturene 100 K og 800 K
b) Hva er midlere hastighet til molekylene ved disse temperaturene?
5. Ved hjelp av fig. 7.13 kan vi vise gyldigheten av Stirlings approksimasjon. Figuren viser $f(x) = \ln(x)$.
 - a) Beregn $\int_1^n \ln x dx$
 - b) Forklar at integralet må nærme seg $\ln n! = \sum_1^n \ln i$ (i er et helt tall).
 - c) Vis at vi dermed kan skrive $\ln n! \approx n \ln n - n$
6. Spillet Lotto består (i Norge) i å lage enkelttrekker av 7 tall trukket blant 34 mulige. Hvis alle tall i rekka er riktige i forhold til trekningen av 7 vinnertall, så vinner man førstepremie.

- a) Hva er sannsynligheten for førstepremie med en enkelttrekke?
 - b) Man kan spille 'system', noe som går ut på å velge 12 tall, der man vinner førstepremie om syv av dem er rette. Hvor mange enkeltrekker svarer dette til? Hva blir vinnersjansen nå?
 - c) Hva er sannsynligheten for tredjepremie, 6 rette av de 7 trukne (uten tilleggstall)?
 - d) Under trekningen trekkes ett ekstratall. Om man har en rekke med 6 rette tall + ekstratallet så vinner man andrepremie. Hva er sannsynligheten for andrepremie?
7. Bursdag på samme dag? Anta at folks bursdager er jevnt fordelt over året, Et antall personer, N , er samlet i samme rom. Hva er sannsynligheten for at minst to av dem har bursdag på samme dag? Hvor mange personer må være tilstede for at denne sannsynligheten skal være 50%?
8. Vi har et stoff med $N=10000$ atomer. Ved tiden $t = 0$ har alle atomene samme spinnretning, slik at magnetiseringen er (se ligning 7.22):

$$M = 10000 \times \frac{g}{m} \frac{\hbar}{2}$$

Anta at det er en sannsynlighet, λ , på 5% pr. sekund for at et atom skal flippe (skifte spinnretning).

- a) Hvilk verdi tror du magnetiseringen konvergerer mot etter en stund?
- b) Skriv et dataprogram som simulerer spinnflippene og beregner og plotter magnetiseringen som funksjon av tiden, fra $t = 0$ til $t = 200$ sekunder.

Ekstraoppgave for spesielt interesserte: Man kan sette opp en diff. ligning for antall spinnflipp når man har en flippsannsynlighet λ pr. tidsenhett. Vis at differensialligningen for antallet med (f.eks.) positiv spinnkomponent er $N_+(t)$ er $dN_+ = N_+(0)\lambda - 2N(t)\lambda$. Løs denne, og vis at løsningen passer med simuleringens resultatet. (Her passer det fint å bruke den generelle formelen for løsning av en førsteordens diffligning som finnes i mange matematikkbøker.)

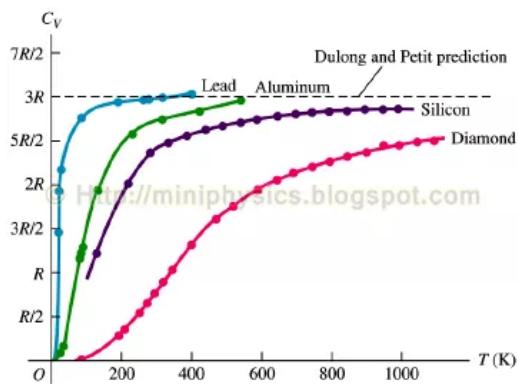
9. Modifiser dataprogrammet i oppgave 8 til å beregne utviklingen av entropi isteden. (Beregn entropien fra formel 7.20, bruk Stirlings approksimasjon.)

10. Binomialkoeffisienten plottet i fig 7.3 følger en sannsynlighetsfordeling som heter *binomialfordelingen*. Matematisk ser den slik ut (med korrekt normalisering til 1, $\sum_{r=0}^{r=N} B(r) = 1$):

$$B(r; N, p) = \binom{N}{r} p^r (1-p)^{N-r} \quad (7.78)$$

Av N kast viser den sannsynligheten for r 'kron'. Men den er generalisert med en underliggende sannsynlighet, p , for 'kron' som er et sted mellom 0 og 1. I myntkast er altså $p = \frac{1}{2}$. I mange sammenhenger ønsker man å beregne p , og finne usikkerheten i beregningen. (p kan f.eks. være sannsynligheten for å bli rammet av en sykdom, på grunnlag av å studere et utvalg av N personer). Usikkerheten er gitt av standardavviket som teoretisk er $s = \sqrt{Np(1-p)}$.

- a) Vis at det bare er en konstant som skiller $B(r)$ fra fordelingene vist i fig. 7.3.
 - b) Beregn forholdet s/N for fordelingene vist i fig. 7.3, og sammenligne med de viste fordelingene.
 - c) Vis at s går mot \sqrt{r} når p nærmer seg null. Kommenter resultatet.
11. Vis at lign. 7.41 og 7.42 er korrekte.
12. I atomer er avstanden mellom energinivåene typisk noen eV. Anta at avstanden mellom grunntilstanden og første eksitere tilstand er 1 eV. Hvor stor andel av en samling atomer ved romtemperatur vil befinner seg første eksitere tilstand. (Se bort fra muligheten for enda høyere eksitasjonsnivåer).
- 13.
- a) Gjennomfør alle skritt i beregningen for å komme fram til varmekapasiteten, C , til et krystall, ligning 7.45
 - b) Finn grenseverdien for C når $T \rightarrow 0$ og $T \rightarrow \infty$. Hvilken verdi har C når $\theta/T = 2$?
14. I fig. 7.14 er det plottet molare varmekapasiteter for noen faste stoffer, i enheter av gasskonstanten $R = N_A k$ (N_A er Avogadros tall).
- a) Benytt figuren og verdien av C ved $\theta/T = 2$ fra forrige oppgave til å bestemme den karakteristiske temperaturen, θ , for de fire stoffene.
 - b) Bestem videre den karakteristiske frekvensen ω , og $\hbar\omega$ (i elektrovolt) for de fire stoffene. Benytt dette sammen med atomære masser til å oversette til fjærkonstanter, k . ($k = m\omega$)



Figur 7.14: Varmekapasitet for forskjellige stoffer

- c) Plott Einsteins modell for varmekapasitet for de fire stoffene som funksjon av temperatur.
15. Kvantemekaniske bundne partikler har alltid en nullpunktsenergi. Vis at i Einsteins modell for krystaller så bidrar nullpunktsenergien ikke til varmekapasitet og entropi av krystallet.
16. Paramagneter og en del andre faste stoffer består av atomer med spinn lik $1/2$. Når de plasseres i magnetfelt vil grunntilstanden splittes i to energinivå: $\pm \Delta E$. Anta at vi har et krystall med N slike atomer.
- Vis at partisjonsfunksjonen blir
- $$Z_{sp} = 2 \cosh \frac{\Delta E}{kT}$$
- Beregn indre energi og entropi av systemet ved bruk av formlene 7.41 - 7.42
 - Verifiser resultatene ved direkte innsetting i formler 7.37 og 7.38
17. Programmet fra oppgave 8 kan beskrive hvordan det går med magnetiseringen til en paramagnet når utgangspunktet er 100% magnetisering og vi slår av magnetfeltet. Vi slår nå på magnetfeltet igjen, men til en nokså lav verdi. Da blir det asymmetrisk sannsynlighet for de to spinntilstandene siden de har forskjellig energi. Anta at verdien av $\Delta E/(kT) = 0,2$. Beregn de to sannsynlighetene ved bruk av ligninger 7.35 og 7.36. Bruk denne informasjonen til å fortsett simuleringen videre fra $t = 200$ til $t = 300$ sekunder.

18. Todimensjonal gass: I analogi med diskusjonen i kap. 7.6, beregn degenerasjon og partisjonsfunksjon for en gass i to dimensjoner, og finn indre energi, U , og varmekapasitet.
19. Vis at forholdet mellom gjennomsnittlig hastighet og standardavvik av hastighetsfordelingen til partiklene i en gass er $\sqrt{3\pi/8}$.
20. Gibbs paradoks: Beregn entropien for de to beholderne vist i fig 7.6 med og uten skillevegg, med to forskjellige utgangspunkt, h.h.v. formel 7.25 og 7.47. Vis at formel 7.47 gir selvkonsistent resultat.
21. Beregn θ_{rot} for oksygengass (O_2). Midlere avstand mellom atomene i O_2 er 0,11 nm.
22. θ_{rot} for hydrogengass er 82 K. Finn midlere avstand mellom atomene i hydrogenmolekylet.
23. Luft består nesten bare av nitrogen (78%) og oksygen (21%). Hva er C_V for luft ved romtemperatur ($T >> \theta_{rot}$), når du ser bort fra bidraget fra vibrasjonsstilstander? N_2 og O_2 har θ_{vib} på henholdsvis 3340 og 2200 Kelvin. Estimér bidraget fra C_{vib} i luft ved romtemperatur. Kommenter resultatet, gjerne i lys av eksperimentelle målinger.
24. Karbonmonoksyd absorberer lys med frekvens $6,42 \times 10^{13}$ Hz ved eksitasjon til en høyere vibrasjonsstilstand. Beregn ΔE mellom tilstandene. Beregn varmekapasiteten, C_V til CO ved 1000 K.
25. CO_2 molekylenes vibrasjonsmoder domineres av lavfrekvente transversale svingninger. Konsultasjon av absorpsjonspektre viser et bredt absorpsjonsbånd på bølgelengder mellom 14 og 16 mikrometer. Det er åpenbart mange vibrasjonsmoder involvert, dermed mange frihetsgrader (eller høy degenerasjon). Finn θ_{vib} svarende til absorpsjon ved 15 mikrometer. Beregn deretter bidraget til C_V ved romtemperatur for én slik absorpsjonsmodus.
26. Beregn Fermienergien i en gass med 10^{24} elektroner pr. kubikkcentimeter.
27. Sola har en overflatetemperatur på omrent 5800 K.
 - a) Finn total intensitet (energi/sekund) som sendes ut fra sola.
 - b) Hvor stor intensitet treffer jorda (før lys absorberes i atmosfæren) pr. kvadratmeter?

28. Finn utstrålt energi for et legeme med volum 100 liter og en temperatur på 37 grader Celsius
29. Einsteins antok i sin tilnærming til sort stråling at $n_r = e^{-E_r/kT}$ (betegnet med N_i i seksjon 7.9.5). Hvis vi skriver $\epsilon_r = rh\nu$ der r er et helt tall, 0,1,2,3...; vis at vi får Plancks strålingslov ved bruk av den termodynamiske partisjonsfunksjonen

$$Z_{sp} = \sum e^{-\epsilon_r/(kT)}$$

dersom vi benytter degenerasjonsfaktoren for fotoner, $g(\epsilon)$ (ligning 7.74).

Kapittel 8

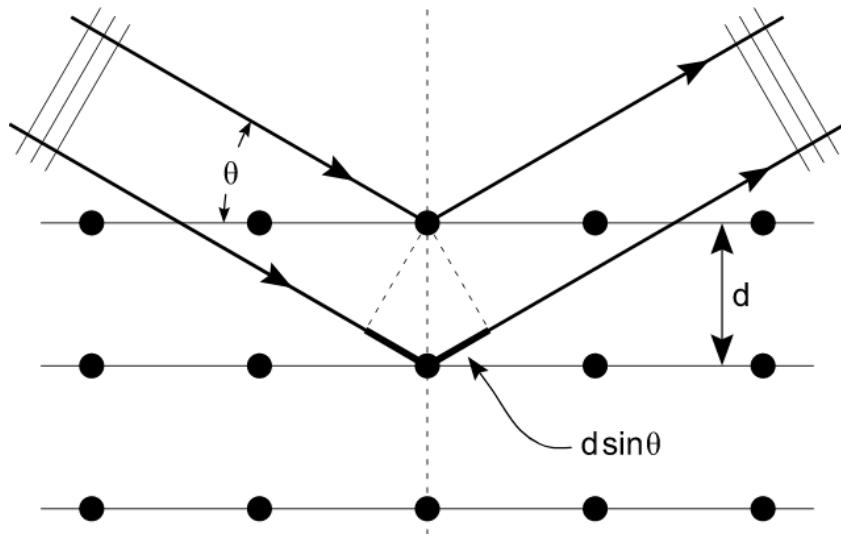
Faste stoffer

De faste stoffers fysikk handler om å studere og utvikle egenskaper til stoffer av makroskopisk størrelse, basert på erkjennelser fra mikroverdenen. Grunnlaget for den moderne beskrivelsen av faste stoffer er dermed kvantefysikk og kvantestatistikk. Mye av den rivende teknologiske utviklingen vi har vært vitne til de siste hundre årene skyldes forskning på dette feltet, med utvikling av nye materialer og forbindelser. Spesielt gjelder dette halvlederteknologien som har revolusjonert utviklingen av elektroniske kretser, og deres anvendelsesområder, f.eks. innen informasjonsteknologi. Men også innen materialteknologi har det skjedd mye, med utvikling av materialer med helt nye styrke- og elastisitetsegenskaper. Vi må begynne med forklare hvordan vi kan studere og klassifisere stoffene og deres oppbygning.

8.1 Studier av faste stoffer

For å studere faste stoffer kan de beskytes med røntgenstråling. Pioneren på dette området var den engelske fysikeren William Henry Bragg, og hans sønn William Lawrence Bragg. De delte Nobelprisen for dette arbeidet i 1915. I arbeidet med krystallografi hadde W.H. Bragg en rekke PhD studenter, også kvinnelige som senere gjorde karrière innen forskning. Men tidlig på 1900-tallet ble innsatsen til de kvinnelige forskerne dessverre ofte oversett, bl.a. på grunn av problemer forbundet med å få dem med på forfatterlister.

Når bølgelengden på røntgenstråling er betydelig kortere enn gitteravstanden i krystallen så er det mulig å studere krystallstrukturene. Røntgenstrålingen reflekteres av atomene i gitteret, og fra det reflekterte interferensmønsteret kan man finne avstanden mellom atomene. Hvis bølgelengden til det inkommande lyset er gitt lik λ så blir avstanden, d , mellom gitterplanene (fig. 8.1) ut fra spredningsvinkler som gir konstruktiv interferens. Dette får vi



Figur 8.1: Fra Wikipedia

når veilengden, L , til bølgen som treffer lag nr. 2 i krystallen er et helt antall bølgelengder, $n\lambda$, lenger en veilengden til bølgen som treffer det øverste laget. For $n = 1$ inntreffer dette ved en vinkel:

$$2d \sin \theta = \lambda \quad (8.1)$$

Ligning 8.1 er kjent som Braggs lov. Røntgenstråling har vært brukt både til studier av krystaller og molekyler, og det har vært behov for stadig mer intense lyskilder og kortere bølgelengder.

Som beskrevet i kapittel 2, så kan man lage røntgenstråling ved å sende elektroner mot et materiale. Det sendes ut bremsestråling når elektroner mister hastighet eller skifter retning. Men man får også relativt monokromatisk røntgenstråling med bølgelengder som er karakteristiske for materialet som beskytes.

Bremsestrålingen fra elektroner er fortsatt metoden som benyttes for å få fram best mulig egnede kilder for strukturundersøkelser. Utstyret har blitt stadig mer avansert, og nytt utstyr har åpnet stadig nye muligheter for studier. For å lage stråling av høy intensitet og kort bølgelengde har man konstruert store elektronringer for å produsere bremsestrålingen. Man får elektronene til å gå gjennom spesielle 'wiggler'-magneter, der akselerasjonen de påføres gir røntgenstråling med de ønskede egenskaper. Elektronene må først akselereres opp til høy energi for at strålingen som sendes ut skal være så kortbølget som mulig. Akseleratorene blir dermed nokså store anlegg. Bildet viser en lagringsring ved universitetet i Lund, Sverige (fig. 8.2). Mange forskningsgrupper



Figur 8.2: Elektronringen MAX-IV i Lund.

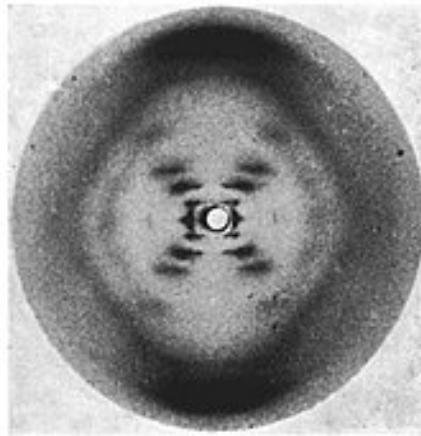
<https://www.maxiv.lu.se/news/max-iv-paves-the-way-for-ultimate-x-ray-microscope/>

gjør eksperimenter ved slike anlegg, for mange typer material- og molekystudier. Strukturundersøkelser ved hjelp av røntgenstråling har gjort det mulig å bestemme strukturen av alle mulige molekyler, og er blitt en særedels viktig del av både kjemi og biologi. For eksempel ble 'dobel-heliks'-strukturen av arvestoff, DNA, identifisert ved bruk av røntgenstråling. Et av bildene, 'Photo 51'(fig. 8.3), som var viktig for identifiseringen ble tatt av en PhD student i forskningsgruppen til Rosalind Franklin (1920-1953) ved Kings College i London.

Det sier seg selv at det har blitt utviklet svært avanserte analyseverktøy for å kunne fastlegge molekyl- og krystallstrukturer ut fra bilder som fig. 8.3. Dette kan vi ikke komme inn på her.

8.2 Klassifisering av krystaller

Krystallstrukturer kjennetegnes ved at de er periodiske. Man kan finne en enhetscelle i materialet som gjentas i alle retninger. En slik struktur kalles for et *Bravaisgitter*, etter fysikeren Arthur Bravais som arbeidet med krystallografi midt på 1800-tallet. Verktøyene for å studere krystallene er som sagt lys i en eller annen form, og handler om hvordan lyset transmitteres eller reflekteres. Som kjent kan lys beskrives på kompleks form som bølgetog, med en bølgevektor. Av stor interesse er lysbølger med samme periodisitet som



Figur 8.3: Diffraksjonsbilde tatt under studium av DNA-molekylet (Fra Wikipedia, artikkel om Rosalind Franklin)

atomene i krystallen. Hvis vi skriver

$$e^{ikr} = \cos kr + i \sin kr$$

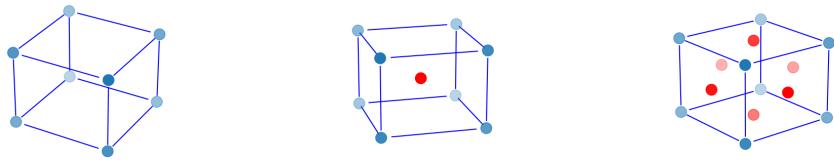
så kan vi sette bølgetallet $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{d}$ for å beskrive en slik bølge, om den går loddrett nedover i figur 8.1. Men det fins andre retninger med litt annen periodositet. Krystaller kan beskrives ved hjelp av et sett k -vektorer i det *resiproke gitteret*. Braggs lov kan omformes til å skrives ved hjelp av bølgetallene isteden.

Vi skal ikke introdusere formalismen for krystallanalyse her, verken i det vanlige rommet, eller i det resiproke rommet av bølgetall. Vi ønsker bare å for å nevne noen av de enkleste og vanligste strukturene.

Mange stoffer er bygd gjennom kovalente bindinger. Dette gjelder bl.a. de vanligste metallene. Den enkleste strukturen får vi når det er bare en type atomer. Man kan ta utgangspunkt i et gitter bygd opp av enkle kuber. Dette kalles en sc-struktur (Simple Cubic). Men en i en så enkel struktur vil det være plass til atomer enten i midten av kuben, eller på endeflatene. Atomene vi pakkes tettere enn i en sc-struktur. Materialer som også har ett atom midt i kuben sies å være i en bcc-struktur, ('Body Centered Cubic'). Jern, krom og wolfram er eksempler på elementer som er bygd opp på denne måten.

En annen måte å få ekstra atomer inn i kuben på, er på plassere ett atom i hver endeflate av kuben. Da får vi en fcc-struktur (Face Centered Cubic). Aluminium, kobber, gull og sølv har denne krystallstrukturen.

Fig. 8.4 illustrerer disse strukturene. Mange viktige metaller er dermed enten bcc- eller fcc-krystaller. Men for metaller vil de ytterste elektronene



Figur 8.4: Kubiske gitter. Atomer blir tettpakket ved enten å fylle midten med et atom (figur i midten), eller midten av hver av de seks endeflatene av terningen (til høyre)

fra hvert atom kunne vandre fritt mellom atomene, slik at metallene leder elektrisk strøm. Dette vil beskrives i mer detalj i seksjon 8.4.

En annen type kovalent binding kan oppstå i stoffer med fire elektroner i det ytterste skallet, slik som karbon og silisium. Strukturer av karbon kan oppstå i mange former. Kull består hovedsakelig av karbon med innslag av andre stoffer som hydrogen og oksygen i en nokså uordnet struktur.

Rent karbon kan binde seg i flate sekskantede ringer, til grafitt. Dette kan gi tynne lag med lite innbyrdes friksjon. Man har etterhvert fått teknologi til å manipulere disse sekskantede strukturene som enkle flak, og også binde flak sammen i hver ende til å lage tynne 'nanorør'. Dessuten har man kunnet lage et rundt molekyl bestående av seksti karbon-atomer. Her er danner bindingene sekskanter og femkanter på samme måte som i en fotball.

Diamant er en spesielt robust kjemisk forbindelse. Her er bindingene i en tetrahedrisk form, med gitteravstand 154 pm. Dette er betydelig kortere enn avstanden mellom ionene i f.eks. koksalt. Bindingene blir dermed ekstra sterke, og diamant er et svært hardt stoff. Diamant finner man dypt i bergrunnen, der krystallene er dannet under ekstremt trykk. Det er mulig å danne kunstige diamanter rundt et lite 'frø' ('seed'), ved å sette den sammen med rent karbon under høyt trykk.

En rimeligere måte å framstille diamant på er oppstått i løpet av de seneste tiårene ved hjelp av en metode som heter 'Chemical Vapor Deposition', CVD. Man trenger fortsatt et frø som man gror krystallen rundt. Frøet settes i en blanding av metan og hydrogengass. Gassen ioniseres, og karbonmolekyler kan bindes opp til frø-krystallen. Dersom fritt karbon dannes uten å binde seg i diamantstrukturen så vil dette binde seg til hydrogenioner, og fjernes. Her er temperaturen, ca 1100 K, men trykket er bare et par atmosfærer. Ved nanofysikkgruppen ved Universitetet i Bergen fins det et laboratorium for framstilling av diamant på denne måten. Figur 8.5 viser noen former for

karbon, og molekylstrukturer.

Koksalt har to typer atomer, og er bygd opp ved hjelp av ionebindinger. Negative klorioner er bundet til positive natriumioner i en kubisk gitterstruktur. Man kan gjenkjenne atomene i kuber uten noe atom i midten. En slik struktur kalles en fcc-struktur. (Face Centered Cubic). Kubiske strukturer med et atom i midten kan man få om man skyver en sc-strukturer halv-veis inn i en annen sc-structur. Da får man en bcc-struktur (Body Centered Cubic) (fig. 8.6) Om atomene er tilnærmet runde kuler, så blir dette den tettest mulige pakkingen av kulene.

En heksagonal struktur har atomer som danner hjørner i en sekskant som grunnelement. Grafitt (av karbon) er eksempel på et slikt materiale.

8.3 Krystaller med ionebindinger

Når et fast stoffer består av mer enn en type atomer, så kan de bygges opp ved ionebindinger. De enkleste forbindelsene vil være mellom et element fra gruppe 1 og et fra gruppe 7 i det periodiske system. Koksalt, NaCl, er en slik forbindelse. De to elementene Na og Cl er hver i en fcc-struktur som er vevd inni hverandre slik figuren viser. Kan vi si noe om styrken på bindingene (og dermed egenskaper som f.eks. smeltepunkt)? Vi kan se på den potensielle energien som en partikkel i krystallet føler dersom vi kan behandle alle atomene som punktladninger

$$U = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \frac{z_j}{r_j}$$

der r_j er avstand til ion med ladning z_j . Dette kan formuleres som en alternérende sum over ioneladningene som er h.h.v. positive og negative.

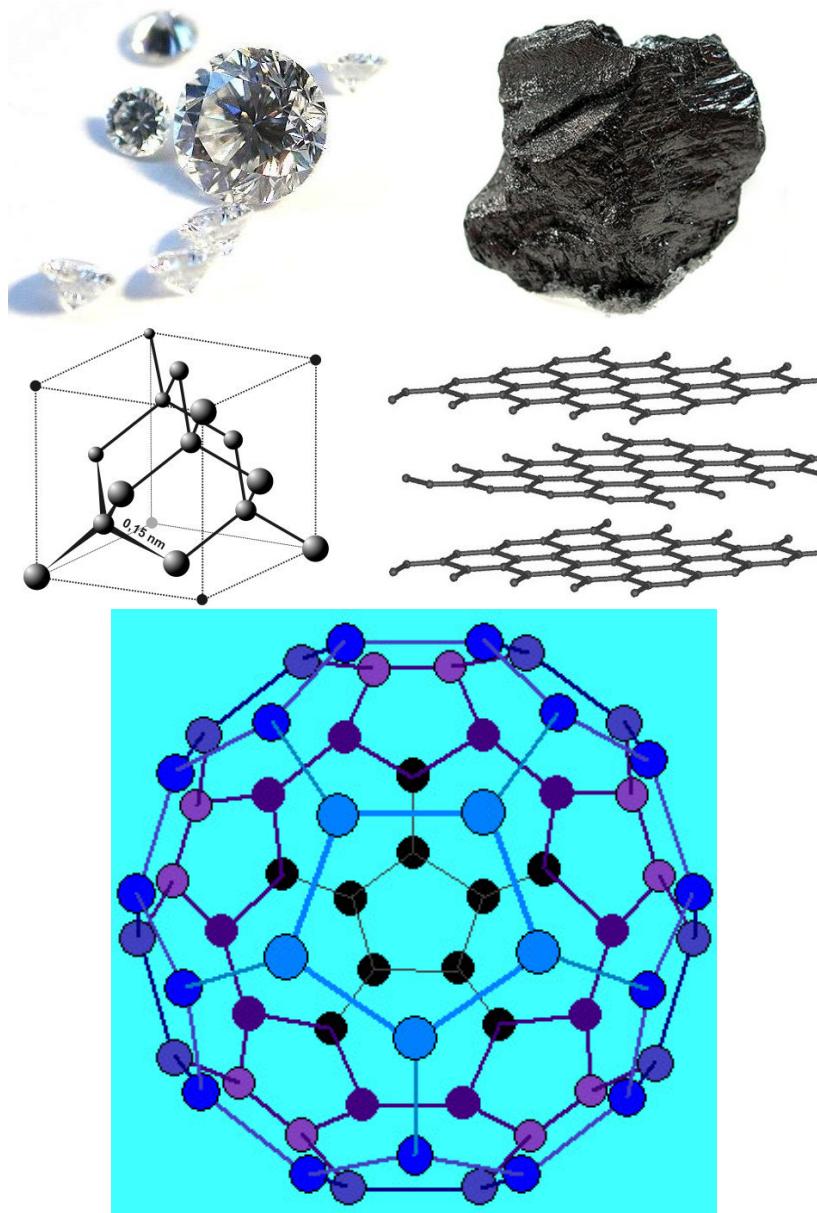
Vi kan se på et endimensjonalt gitter med gitteravstand a , og alterneren-de positiv og negativ ladning på ionet (se figur 8.7):

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_j (-1)^j \frac{2}{na} = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 a} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \frac{1}{j}$$

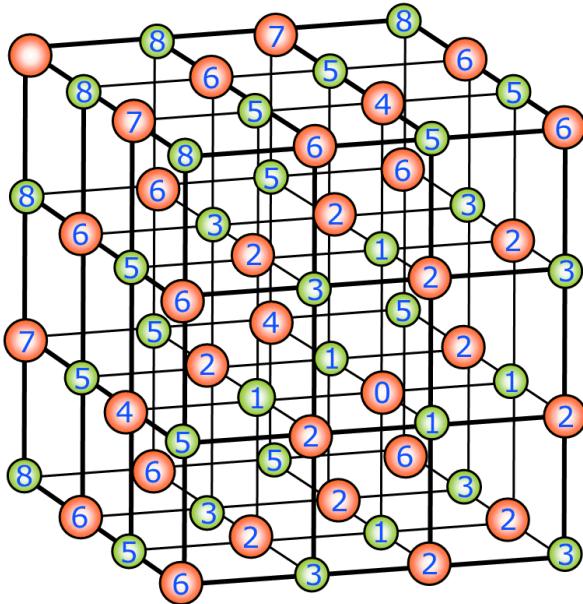
2-tallet kommer av at vi tenker oss adderer bidragene symmetrisk rundt et ion i midten.

Taylor rekka til $\ln(1 + x)$ er

$$\ln(1 + x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$$



Figur 8.5: Karbonformer: fra Wikipedia



Figur 8.6: NaCl krystall (Fra Wikipedia, forfatter Lanzi")



Figur 8.7: En endimensjonal rekke av positive og negative ladninger med gitteravstand a

så summen er lik $\ln(1+1) = \ln(2) = 0,69314$. Dermed er altså

$$U = -\alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

U er mindre enn null, så vi kan slå fast at strukturen er stabil. α kalles *Madelungkonstanten*, og i eksempelet så har vi funnet

$$\alpha = 2\ln(2) = 1,3863$$

Man kan beregne Madelungkonstanten for tredimensjonale gitttere også. For eksmpel kan det gjøres en sum utfra observasjon av at man kan se på avstandene til positive og negative ioner ligge som h.h.v. positive og negative kuleskall av ladninger. Men for å få en matematisk rekke som konvergerer, så må man summere ladningen fra overflaten til terninger rundt sentrum (ifg. Wikipedia artikkel "Madelung Constant"). For NaCl krystallet er $\alpha = 1,748$.

8.3.1 Form av potensialet følt av et ion i gitteret

Grunnet eksklusjonsprinsippet så kollapser ikke krystallene. Det er en frastøtningskraft som kan parametriseses som

$$U = \frac{B}{r^n}$$

slik at den totale potensielle energi til enkeltionet blir

$$U = -\alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^n}$$

Denne potensielle energien har et minimum ved en avstand $r = r_0 \equiv a$ som man finner ved

$$\frac{dU}{dr} = \alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{nB}{r^{n+1}} = 0$$

noe som gir

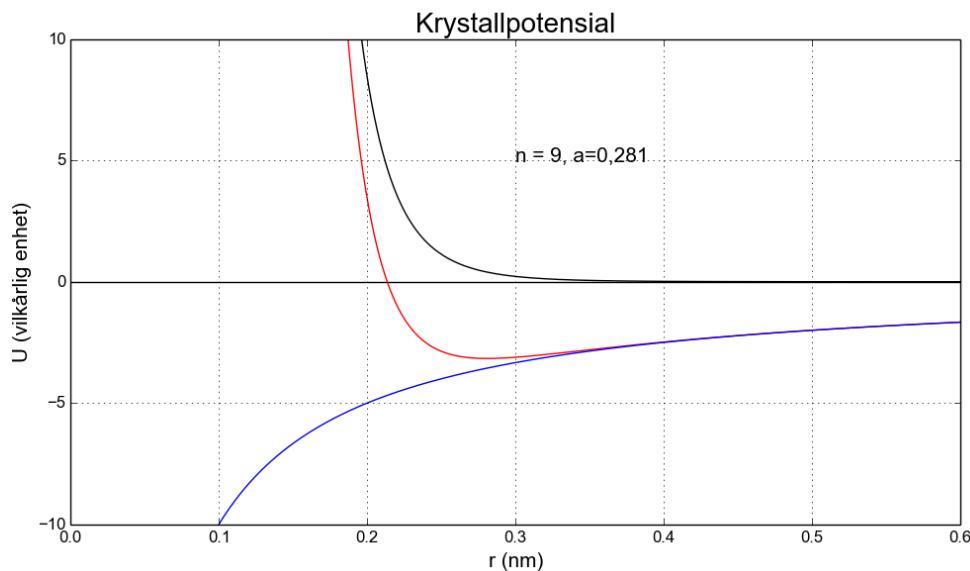
$$B = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 n} r_0^{n-1}$$

Den totale potensielle energi blir

$$U(r) = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{r_0^{n-1}}{nr^n} - \frac{1}{r} \right)$$

Ved minimum ($r = r_0$) har vi

$$U_0 = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$



Figur 8.8: NaCl krystall $U(r)$ med $n=9$ og $r_0 = a = 0, 281$ nm

r_0 kan måles eksperimentelt (krystallograf), og eksponenten, n kan måles ved kompressibilitet av stoffet. Man finner at $n \approx 9$. Gitteravstand er målt til $r_0 = 0, 281\text{nm}$ for NaCl, og som nevnt har man funnet $\alpha = 1, 748$. Da kan man beregne potensiell energi ved minimum. Man finner $U_0 = -7, 96\text{eV}$. Om man tilfører denne energien til ioneparet, så vil de separeres. Om man regner pr. atom, må det tilføres halvparten av dette, 3,98 eV. Men tilbakeføring av elektronet fra Cl^- ionet til Na^+ ionet vil frigjøre noe energi. *Kohesjonsenergien* er målt til 3,28 eV pr. atom.

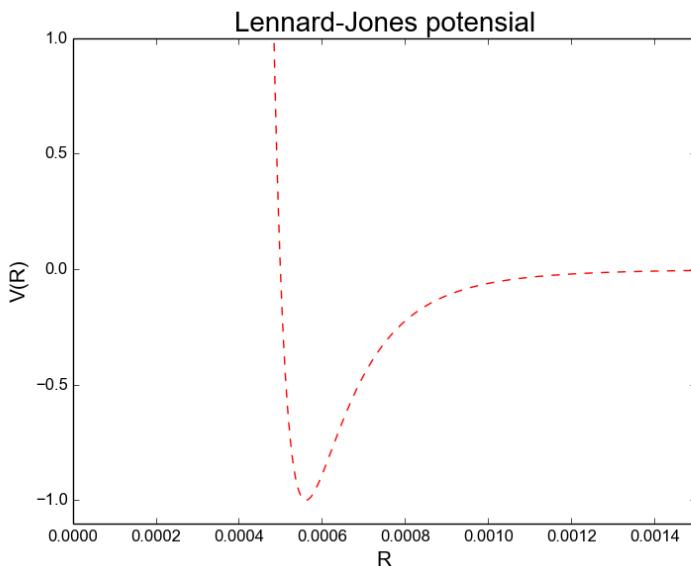
For små vibrasjoner rundt r_0 kan vi Taylor-utvikle potensialet:

$$U(r - r_0) = U(r_0) + \frac{dU(r)}{dr}|_{r_0}(r - r_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2U(r)}{dr^2}|_{r_0}(r - r_0)^2 + \dots$$

Men i minimum er $\frac{dU(r_0)}{dr} = 0$, så det første meningsfulle ledet i utviklingen gir Harmonisk Oscillator potensialet. Dette forklarer at vibrasjonstilstander og energier beskrives godt med resultatene for en Harmonisk oscillator. Dette gjelder selvsagt også for andre typer bindinger enn ionebindinger.

8.3.2 Van der Waals bindinger

Væsker er ikke krystallinske. Hvordan holdes molekylene sammen i væsker? I stor grad skyldes dette at det er en usymmetrisk fordeling av ladning i



Figur 8.9: Lennard-Jones potensialet mellom polariserte molekyler.

molekylets elektronsky. Molekylene har et *dipolmoment* som gjør at de henger sammen. Dette kalles Van der Waals krefter. En idealisert dipol har to ladninger med motsatt fortegn, q og $-q$, plassert i avstand a fra hverandre. Dipolmomentet defineres som $\vec{p} = q\vec{a}$. Det elektriske feltet rundt en dipol avtar som $1/r^3$:

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\vec{p}}{r^3} - \frac{3(\vec{p} \cdot \vec{r})}{r^5} \vec{r} \right)$$

Energien i vekselvirkningen mellom to dipoler vil være proporsjonal med produktet av feltene de setter opp. Siden feltene avtar som $1/r^3$, så blir dette:

$$U(r) = -B/r^6$$

Matematikeren John Lennard-Jones innførte frastøtningen med et positivt bidrag til energien proporsjonal med $1/r^{12}$, og laget en modell for Van der Waals energiene basert på Lennard-Jones potensialet

$$U(r) = A/r^{12} - B/r^6 \quad (8.2)$$

Hydrogenbindinger er spesielt sterke Van der Waals bindinger som oppstår mellom et polarisert hydrogenatom og et annet atom i molekylene. Styrken på disse bindingene er opp til ca $1/10$ av styrken til kovalente bindinger.

Eksempel 1: Vann, is

<https://en.wikipedia.org/wiki/Ice#Slipperiness>
https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_bond

Eksempel 2: stigetrinnene i den dobbelte DNA-heliksen

<https://en.wikipedia.org/wiki/DNA>

8.4 Metaller

Den største gruppen av grunnstoffene er metaller. Dette er krystallinske stoffer, med få elektroner i ytterste atomære skall. Disse elektronenes bølgefunksjoner overlapper med hverandre slik at elektronene kan vandre nokså fritt mellom atomene. Tilstand der elektronene blir nokså frie til å bevegelsen. Disse elektronene befinner seg i *ledningsbånd*, og kan bevege seg nokså fritt i krystallstrukturen. Metaller har sine ytterste elektroner i *ledningsbåndet*, mens de andre elektronene er i et av *valensbåndene*.

8.4.1 Elektroner som Fermigass

Man kan modellere elektronene i ledningsbåndet (gjerne ett eller to elektroner pr. atom) som en gass av ikke-vekselvirkende fermioner. Man antar at elektronene i ledningsbåndet ikke vekselvirker med hverandre. For metaller er Fermienergien typisk 5 eV. Fordeling av elektronenergi blir proporsjonal med $\sqrt{\epsilon}$.

Den midlere energien i systemet blir

$$U = 2 \times \int_0^{E_F} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon$$

Hva blir varmekapasiteten, $\frac{dU}{dT}$? Dette er ikke helt enkelt, for alle beregninger til nå har vært gjort ved $T = 0$. Man kan argumentere for at tilførsel av energi medfører at de elektronene som har høyest energi får et lite puff av størrelsesorden kT . For temperaturer som er mye lavere enn $kT = E_F$ finner man at varmekapasiteten er proporsjonal med temperaturen.

Eksempel

Kobber har tetthet 8940 kg/m^3 , atomær masse $63,5 \text{ u}$ (med $u = 1,66 \times 10^{-27} \text{ kg/u}$). Vi regner at det er ett elektron pr. kobberatom i ledningsbåndet, altså er antallstettheten

$$\frac{N}{V} = \frac{\text{masse}/\text{m}^3}{\text{masse}/\text{atom}} = \frac{8940}{63,5 \times 1,66 \times 10^{-27}} \text{ atomer}/\text{m}^3$$

så

$$\frac{N}{V} = 8,48 \times 10^{28} \text{ elektroner}/\text{m}^3$$

Nå er $(\hbar c) = 1,97 \times 10^{-7} \text{ eVm}$ og elektromassen er $mc^2 = 0,511 \times 10^6 \text{ eV}$, så

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{(\hbar c)^2}{2mc^2} = \frac{1,97^2}{1,022} \times 10^{-20} \text{ eVm}^2$$

Så vi får:

$$E_F = (3\pi^2 \times 84,8 \times 10^{27})^{2/3} \times 3,8 \times 10^{-20} \text{ eV}$$

$$E_F = 2511^{2/3} \times 10^{18} \times 3,8 \times 10^{-20} \text{ eV} = 7,02 \text{ eV}$$

Dette er en svært høy energi sammenlignet med typiske kinetiske energier for gasser ved romtemperatur. ($kT = 0,0000862 \text{ eV/K} \times 300 \text{ K} = 0,026 \text{ eV}$).

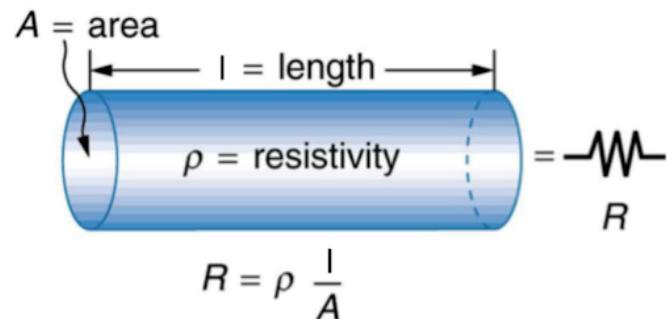
Som analogi kan man si at vi har stablet elektronene oppå hverandre i et trangt konisk vinglass. Energiene til elektronene som er øverst blir svimlende høy sammenlignet med den termiske energien. Dersom vinglasset hadde vært videre, så hadde det vært plass til flere partikler nær bunnen. Dette ville svart til lavere elektrontetthet. (Diameteren i glasset øker som $V\sqrt{\epsilon}$ fra bunnen, mens høyden av glasset er E_F , proporsjonal med $(1/V)^{2/3}$)

Det er *tettheten* av partikler som avgjør verdien av Fermienergien (og massen av partiklene).

8.4.2 Ohms lov

For å beskrive ledningsevne i metaller er Ohms lov sentral. La oss utlede den ut fra klassiske forestillinger om de frie elektronenes oppførsel i metallet. Se på en leder med lengde, l og tverrsnitt A . Det kan settes opp et elektrisk felt i lederen, som får elektronene til å drifte i en bestemt retning. Det elektriske feltet i lederen kan regnes som homogent og gitt ved

$$E = -\frac{V}{L}$$



Figur 8.10: Elektriske størrelser i metaller. Bilde fra 'Kahn Academy'.

der V er potensialforskjellen mellom de to endeflatene av lederen. Den empiriske ohms lov sier:

$$I = \frac{V}{R}$$

Hastigheten til elektronene i det elektriske feltet når et maksimum som følge av kollisjoner med ionene i gitteret. Det kan være rimelig at kollisjonene er med de tunge atomkjernene i metallgitteret. Etter Thompson's oppdagelse av elektronet i 1897 var det *Paul Drude* som foreslo at elektrisk konduktivitet kunne beskrives på denne måten i år 1900, under en antakelse om at elektronene kolliderte med de tunge ionene i metallet. Vi skal se at *Formen* av loven blir rett iflg. Ohms lov.

Hvor hurtig beveger elektronene seg når det settes opp en strøm? Gitt strøm, I , kan vi enkelt finne den gjennomsnittlige drift-hastigheten v_d :

$$I = \frac{Q}{t} = -neAv_d$$

n er antallstetthet av elektroner, e er elektrisk ladning til elektronet og A er tverrsnittet av lederen.

For kobber kan man anta ett fritt elektron pr. kjerne, noe som gir en elektronstetthet på $8,5 \times 10^{28} m^{-3}$. En strøm på 1 Ampere gjennom en ledning med tverrsnitt $1 mm^2$ gir dermed $v_d = 7,4 \times 10^{-5} m/s$

Det elektriskefeltet i lederen, $E = V/L$ fører til en kraft på elektronene, og derfor en akselerasjon

$$a = \frac{F}{m} = \frac{eE}{m}$$

Denne akselrasjonen pågår til neste kollisjon, som i snitt finner sted etter

en tid τ . Da ender vi opp med en snittfart langs E-feltet på:

$$v_d = a\tau = \frac{eE}{m}\tau$$

Dette kan vi sette inn i uttrykket for strømmen

$$I = nAev_d = \frac{nAe^2E}{m}\tau$$

Nå setter vi inn for feltet, $E = V/L$ og får:

$$I = \frac{nAe^2V}{mL}\tau = \frac{ne^2\tau A}{mL}V$$

Dette er rett form av Ohm's lov, med resistivitet

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau}$$

Det gjenstår å sette inn en verdi for τ ut fra kjente verdier av resistiviteten. Resistiviteten til kobber ved romtemperatur er $\rho = 1,68 \times 10^{-8} \Omega m$. Hvis vi antar ett fritt elektron pr. kobberatom så er $n = 6,02 \times 10^{23} \times \frac{8,9}{63,55} = 0,85 \times 10^{23}$ pr. kubikkcentimeter. Vi får

$$\tau = \frac{9,1 \times 10^{-31}}{0,85 \times 10^{29} \times (1,6 \times 10^{-19})^2 \times 1,68 \times 10^{-8}} s$$

Innsatt blir dette: $\tau = 2,5 \times 10^{-14}$ s.

Vi har altså funnet tidsrommet mellom hver kollisjon. Men hvor langt elektronet beveger seg mellom hver kollisjon vil avhenge av hastigheten til elektronet. Den midlere fri veilengden, λ , finner vi ved å sette inn i antakelsen $\tau = \lambda/v$. Her er det ikke snakk om driftshastigneten langs med det elektriske feltet. (I så fall ville vi fått en fri veilengde på ca 10^{-17} m.) Man kunne prøvd den termiske hastigheten til elektroner ved 300 K. Da er $kT \approx 0,025$ eV noe som gir en elektronhastighet på 10^5 m/s. Dette gir en $\lambda = v\tau$ på ca 2,5 nm. Men ut fra tettheten og atomær masse til kobber kan vi slutte at avstanden mellom hvert atom er ca 0,25 nm. På Drude's tid var det naturlig å sette inn dette som midlere veilengde, og en midlere hastighet på elektronene svarende til romtemperatur. Dette gir dermed ti ganger så høy resistivitet som den målte (avhengig av 'rekkevidden' til atomene som kolledeerer med elektronene).

Man kunne anta at det er elektronene nær Fermienergien som kan akseleteres, siden elektronene med lavere energi ikke kan hoppe opp i energitilstander som allerede er fylt opp. Den klassiske hastigheten til elektroner med

kinetisk energi lik E_F er enorm!

$$v_F = \sqrt{\frac{2\epsilon_F}{m}} = 1,57 \times 10^6 m/s$$

i kobber. Man kan bruke denne hastigheten for beregning av kollisjonslengde utfra målt τ . For gitt kollisjonstid øker λ proporsjonalt med hastigheten som settes inn, og setter man inn Fermihastigheten så blir $\lambda = 40$ nm.

Det er klart at en korrekt kvantemekanisk beskrivelse er mye mer innfløkt. For det første er ikke elektroner punktpartikler i bevegelse, men snarere bølgepakker. Dessuten vil vi ikke kunne følge ett og ett elektron for seg, idet alle elektronene er identiske. Vi må se på elektronenes bølgefunksjon i mer detalj.

Det er viktig å merke seg at formidling av elektriske *signaler* ikke har sammenheng med en netto bevegelse av elektroner. Istedent handler dette om at varierende elektromagnetiske felt settes opp og transporteres fordi elektronene i lederen utsettes for små perturbasjoner. Signalene transporteres som en elektromagnetisk bølge gjennom kabelen. De kan f.eks. formidles gjennom koaksialkabler som har en ledende kjerne, en ledende kappe, og et isolerende plasmateriale imellom. Da fungerer plastmaterialet i kablene som *bølgeledere*. Den ledende ytterkappen skjermer også signalet mot elektromagnetisk støy. I mange eksperimenter i kjerne- og partikkelfysikk så er det viktig å vite propagasjonstiden av signalene. I koaksialkabler er den ca. 5 ns pr. meter kabel (lyshastigheten i vakuum gir omtrent 3,3 ns pr. meter).

8.4.3 Periodiske potensial og Blochtilstander

Elektronene i ledningsbåndet føler et potensial som er satt opp av kjernene i en periodisk struktur. Potensialet er altså periodisk.

Den sveitiske fysikeren Felix Bloch viste at et periodisk potensial med periode a ,

$$V(x + a) = V(x)$$

har løsninger av Schrödingerligningen som skrives

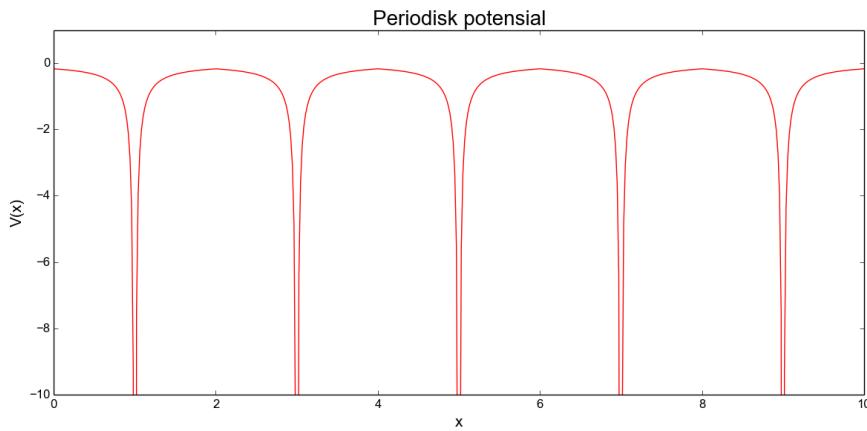
$$\psi(x) = e^{ikx} u(x)$$

der $u(x)$ også er periodisk: $u(x+a) = u(x)$. Det er jo nokså naturlig, ettersom det er naturlig at sannsynligheten for partikkelenes posisjon er periodisk i et slikt potensial:

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2$$

noe som gir at

$$\psi(x+a) = e^{ika} \psi(x)$$



Figur 8.11: Coulomb-potensialet fra en rekke positive ladninger

Faktoren e^{ikx} kjenner vi igjen som løsningen for en fri partikkell der vi har sammenhengen $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, der k kan velges vilkårlig. Her har vi imidlertid krav på k på grunn av kravet om periodisitet, og sammenhengen med energien er ikke så enkel. Det viser seg at de mulige energinivåene ligger i bestemte områder, *bånd* mens andre energier er forbudte (ingen løsning av Schrödingerligningen).

En modell tilnærmer potensialet som elektronet opplever fra atomkjernerne med en serie med deltafunksjoner¹,

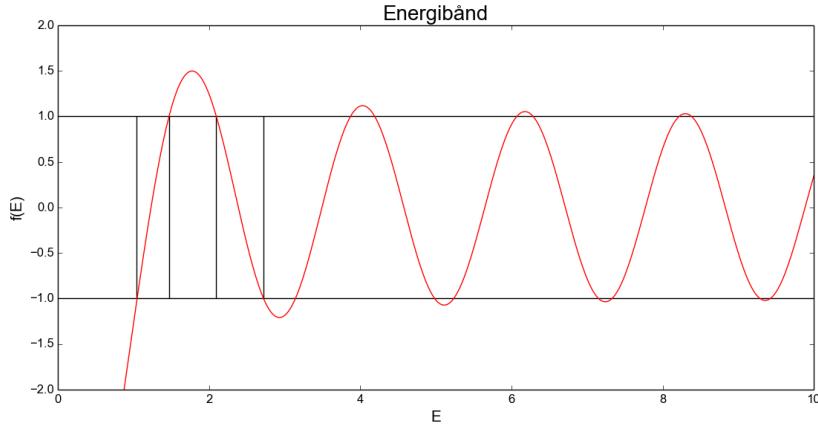
$$V(x) = -\alpha \sum_n \delta(x - na).$$

Vi har forklart i seksjon 3.3.5 hvordan man finner bundet løsning for én brønn. Men her er det snakk om å finne løsninger som ikke er bundne ($E > 0$). Vi skal ikke utlede løsningene her men forklare framgangsmåten og resultatet: Man prøver seg med en løsning av samme form som for en partikkell i boks, nemlig

$$u(x) = A \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar a} x + B \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar a} x$$

(som multipliseres med e^{ikx}). For å finne konstantene A og B går man fram som 'vanlig', med krav om kontinuerlig bølgefunktjon. Den deriverte kan være diskontinuerlig i $x = na$, men man får et veldefinert sprang i den deriverte i

¹Dirac's deltafunksjon, $\delta(x) = 0$ for $x \neq 0$ og ∞ for $x = 0$. Men den kan integreres $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$



Figur 8.12: Løsninger av S.L. må ha energier som er i områdene der den røde kurven, $f(E)$ ligger mellom -1 og 1.

disse punktene, som forklart i seksjon 3.3.5. Relasjonen

$$\cos(ka) = \cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a - \frac{m\alpha}{\hbar\sqrt{2mE}} \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = f(E)$$

kommer fram. Funksjonen på høyre side er plottet i fig. 8.12. Vi ser at den oscillerer mellom verdier som er utenfor betingelsen på venstre side tilsier, nemlig at løsninger må ligge mellom -1 og 1. Vi har funnet at det er restriksjoner på de energiene elektronet får lov å ha, de ligger i *bånd*, adskilt av forbudte områder. Dette gir grunnlag for båndteori for energinivåene i faste stoffer. For at relasjonen skal være gyldig er det bare de verdiene av E der funksjonen til høyre ligger mellom -1 og +1 som er tillatte.

Det fins selvsagt bedre modeller for dette enn det som er skissert her. Dette er et spesialtilfelle i Kronig-Penney modellen. Her er det periodiske potensialet en serie bokser. Bølgefunksjoner og energibånd finnes også her ved å utnytte kontinuitetsbetingelsene. Men da er det mulig å tilpasse høyder og bredder av boksene og få mer realistiske verdier av båndbredder osv.

Det er interessant å observere at bølgefunksjonen til elektronet i et slikt potensial strekker seg utover *hele* krystallen. Elektronene er ikke lenger knyttet til et bestemt ion og kan bli funnet i nærheten av et hvilket som helst annet ion med samme sannsynlighet. Derfor kan man knytte ledningsevne til et stoff sammen med hvor regulær krystallstrukturen er. Dessuten vil tidsutviklingen være lik med tidsutviklingen for en fri partikkelf! Resistiviteten i metaller øker med temperaturen, idet temperaturøkningen gir økte muligheter

ter for spredning av elektronene på ionene. Krystalldefekter kan også være ødeleggende for ledningsevnen.

Man kan altså tenke seg at elektroner beveger seg som frie bølger gjennom krystallene. For noen verdier av bølgetallet vil man få spredning, Bragg refleksjon, mens for andre verdier kan bølgen propagere nokså uhindret gjennom krystallet.

Rommel av bølgetall $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ deles i soner. I noen soner vil vi ha Bragg-refleksjoner. For andre områder av verdier av \vec{k} kan bølgen propagere fritt. Dette kalles **Brillouinsoner**. Energibåndene kan ligge i forskjellige soner.

Vi kan også nevne at evnen til å lede elektromagnetiske signaler uten attenuasjon også forklares ved regulære krystallstrukturer. For eksempel er moderne fiberoptikk bare mulig fordi man har lykkes med å framstille optiske fibere med svært høy grad av renhet. Det er nemlig på grunn av urenheter at det skapes spredningssentre som ødelegger transmisjonsegenskapene til fibrene.

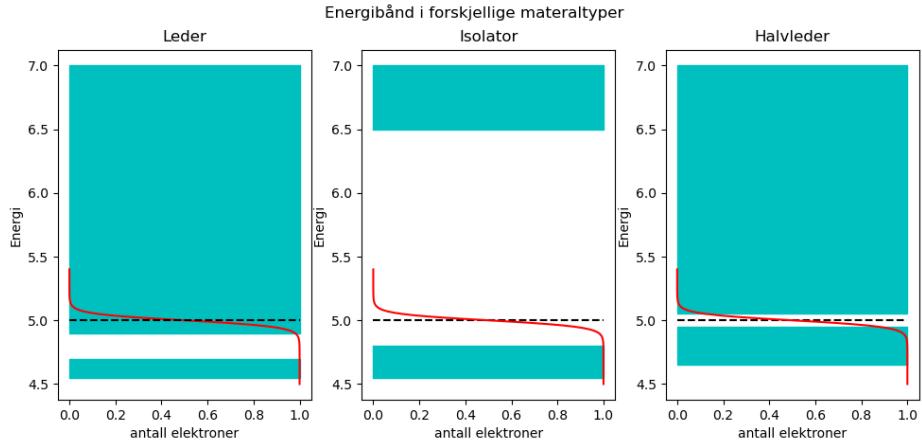
Isolatorer har alle sine elektroner i valensbåndene. Det skal flere elektronvolt til for at et elektron kan komme opp i ledningsbåndet. Derfor fins det ingen elektroner der ved romtemperatur, og materialet leder ikke elektrisk strøm. Figur 8.13 viser hvordan energibåndene ligger for forskjellige typer materiale. Fermifordelingen er også tegnet inn, men her er energiakse og antallsakse byttet om sml. med fig. 7.7

8.5 Halvledere

Silisium og Germanium har liten avstand mellom høyeste valensbånd og ledningsbånd. Fermi-energien ligger midt i båndgapet, som bare har en bredde på 1.11 eV for silisium. Antallet elektroner i ledningsbåndet vil være i ledningsbåndet er derfor sterkt temperaturavhengig. Elektroner som flytter seg ut av sin plass i bindingsstrukturen etterlater et hull i strukturen, som effektivt ser ut som en positiv ladning. Disse hullene kan også flytte seg, og effektivt se ut som mobile positive ladninger. Ved likevekt er det like mange elektroner i ledningsbåndet som det er oppståtte hull i valensbåndet.

8.5.1 Ledningsevne i halvledere.

Ledningsevnen til halvlederne vil være proporsjonal med antall elektroner og huller i ledningsbåndet. Men hullene beveger seg langsommere i det elektriske feltet som settes opp. De har lavere *mobilitet*. Mobilitet er relatert til driftshastigheten som $v_d = \mu E$ der E er det elektriske feltet. *Konduktiviteten*



Figur 8.13: Forhold mellom fermieneperi og båndgap i faste stoffer. Fermi-Diracfordelingen er tegnet inn med $E_F = 5\text{eV}$ og en temperatur på 300K , og angir en kurve proporsjonal med 'teoretisk' antall elektroner uten degenerasjon (rød linje). De turkise feltene angir lovlige energibånd (valensbånd nederst, ledningsbånd øverst), og de hvite feltene er båndgap, energier som er forbudt for elektronene.

($= 1/\text{resistivitet}$) til stoffet kan skrives ned slik:

$$\sigma = en_i(\mu_e + \mu_p)$$

Her er e elektronladningen, n_i konsentrasjonen av elektroner, mens μ_e og μ_p er mobilitetene til elektroner og huller (og, som sagt er antall huller lik antall elektroner ved likevekt). Siden avstanden opp til ledningsbåndet tross alt er my større enn kT så kan man tilnærme antall elektroner ved å erstatte F.D. fordelingen med

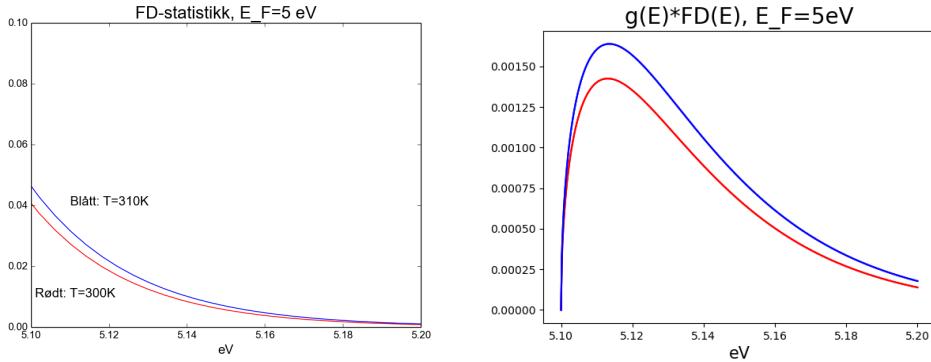
$$g(E)e^{-(E-E_F)/(kT)}$$

I halvledere er altså den elektriske konduktiviteten bestemt av *antall ledningsbærere* i ledningsbåndet, i motsetning til i metaller, (der ledningsevnen er bestemt av midlere fri veilende til elektroner). La oss se på dette antallet. Det er gitt som

$$N = \int_{E_c}^{\infty} \frac{g(E)}{e^{(E-E_F)/(kT)} + 1} dE$$

Vi regner degenerasjonen fra terskelnivået til ledningsbåndet, E_c .

$$g(E) = V \frac{4\pi}{h^3} (2m_e)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_c}$$



Figur 8.14: Fermi-Dirac fordeling når Fermienergien er 5 eV (venstre). Fordeling modulert med faktor $g(E) = \sqrt{E - 5.1}$ (høyre)

Det er rimelig å regne degenerasjonen fra dette nivået, som er det laveste nivået for elektronene i Fermigassen i ledningsbåndet. Energien som skal til for å få elektronet opp på nivå E_C er eksitasjonsenergi, potensiell energi som kan frigjøres ved deeksitasjon. Den overskytende energien blir kinetisk energi, med energinivåer med degenerasjonsforhold som for 'partikler i boks'. Vi er interessert i tettheten av ladningsbærere, $n = N/V$. La oss med en gang forenkle nevneren, idet vi kan anta at nedre grense for ledningsbåndet, E_C ligger ganske langt over fermienergien. Da kan vi skrive

$$N/V = K \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E - E_c} e^{-(E-E_F)/(kT)} dE$$

med $K = 4\pi(2m_e)^{\frac{3}{2}}/h^3$.

Nå kan vi foreta to substitusjoner: Sett konstanten $\nu = (E_F - E_c)/(kT)$ og variabelen

$$y = (E - E_c)/(kT) \quad \text{slik at} \quad dE = kTdy.$$

og $\sqrt{E - E_c} = kT\sqrt{y}$.

Da har vi

$$(E_F - E)/kT = (E_F - E_C + E_C - E)/kT = \nu - y$$

og dermed

$$N/V = K(kT)^{\frac{3}{2}} e^{\nu} \int_0^{\infty} \sqrt{y} e^{-y} dy$$

Verdien av integralet er $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$, så vi får:

$$N/V = 2\left(\frac{\pi m_e}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} (kT)^{\frac{3}{2}} e^{-(E_c-E_F)/(kT)} \quad (8.3)$$

Konstanten blir:

$$C = 2\left(\frac{\pi m_e}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} = 6,04 \times 10^{27} m^{-3} \text{eV}^{-3/2}$$

For T=300K er $kT = 0,02585$ eV. Det viser seg at for silisium så er fermienergien omtrent midt i båndgapet, så $E_C - E_F = 0,585$ eV. Da har vi $e^{-(E_C-E_F)/kT} = e^{-22,6} = 1,4 \times 10^{-10}$, så tettheten av elektroner i ledningsbåndet blir

$$n = N/V = 3,5 \times 10^{15} m^{-3}$$

Ved likevekt må det være like mange huller som beveger seg i valensbåndet. Nå viser det seg at dette resultatet må modifiseres på grunn av at elektronene og hullene ikke oppfører seg som helt frie elektroner. Det viser seg imidlertid at man kan oppsummere den endrede oppførselen godt ved å erstatte elektronmassen med en *effektiv elektronmasse*, m_e^* og hull'massen' med en effektiv masse m_h^* .

Konstanten C inneholder ingenting som er spesifikt for et gitt materiale. Hvor er det blitt av materialenes forskjellige egenskaper? Jo, det blir bredden av båndgapet som gir materialets elektriske egenskaper, altså verdien av $E_c - E_F$.

Den store følsomheten for temperatur gjør at halvledermateriale benyttes som NTC (Negative Temperature Coefficient) *termistorer*. Resistansen til slike termistorer kan parametriskes slik:

$$R(T) = K e^{\beta/T}$$

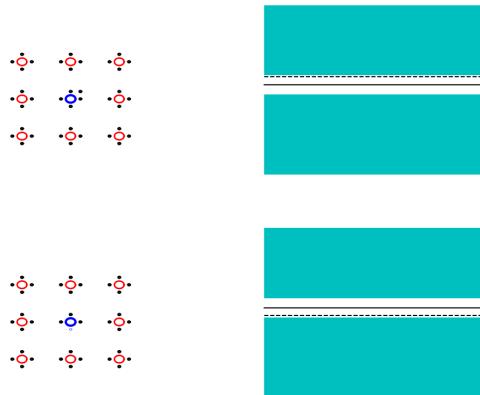
der T er absolutt temperatur.

Fotoceller

Allerede midt på 1800-tallet oppdaget man en fotovoltaisk effekt, at det kan begynne og gå strøm i visse legemer når de belyses med vanlig lys.

Den enkleste lysfølsomme detektoren er et halvledermateriale som forspennes slik at det går en elektrisk strøm. Den oppfører seg som en elektrisk motstand. Når den blyses så går den elektriske motstanden ned, og det registreres en strømøkning.

Når lys treffer dioden så kan frie elektron-hullpar genereres. Dette forutsetter at fotonene har nok energi til at fritt elektron-hullpar genereres. Da må foton-energien være større enn størrelsen på **båndgapet, som er på 1,12 eV for silisium**. Dette svarer til bølgelengder i det infrarøde området og kortere ($E_\gamma > \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{eV nm}}{\lambda}$).



Figur 8.15: Doping av halvledere gjør at noen elektoner (hull) lett flytter seg frigjøres fordi de har ferminivå nær ledningsbånd (valensbånd). Øverst har vi et ekstra elektron i strukturen, som vil ligge på et energinivå svært nær ledningsbåndet. Nederst har vi et hull som oppstår med et energinivå like over valensbåndet.

8.5.2 Doping av halvledere

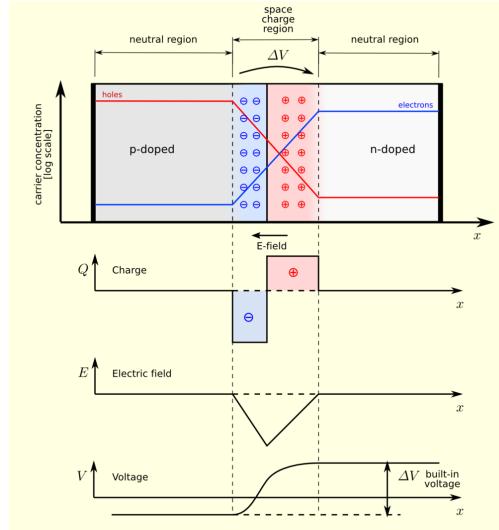
Man kan endre ledningsevnen i halvledermaterialet silisium drastisk ved å tilsette små mengder fosfor eller bor, siden båndgapet da endres.

Ved å dope halvlederen med fosfor (P) som har 5 elektroner i ytterste skall, så får man en n-type halvleder. Disse antar energinivåer som er svært nær ledningsbåndet. Da flytter elektronene seg ekstra lett opp i ledningsbåndet.

Doper man den med bor (B), som har tre elektroner ytterst, så vil det være manglende elektroner, huller, i valensbåndet. Elektroner vil falle ned fra ledningsbåndet og tette hullet. Til gjengjeld vil det oppstått hull i ledningsbåndet, som vil oppføre seg som en positiv ladning som drifter i materialet. En mulig energitilstand oppstår like over valensbåndet, så det er lett å skape et positivt hull i valensbåndet. Figur 8.15 illustrerer situasjonene som oppstår.

8.5.3 p-n overganger

Klemmer man sammen et n-dopet materiale med et p-dopet materiale (i praksis kan man ikke klemme mekenisk, man begynner med fosfor-dopet si-



Figur 8.16: Ladning,felt og potensial i en planar diode. Figur fra Wikipedia

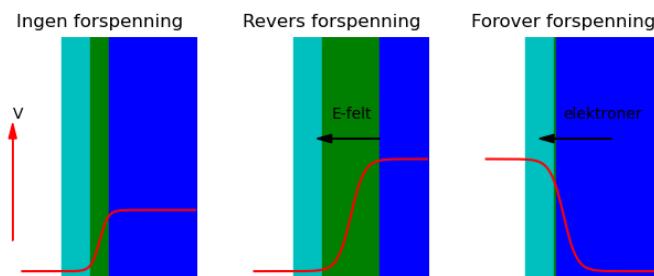
lisium, og 'implanterer' bor-atomer på den ene siden), så får man en *p-n overgang*. Elektroner og huller diffunderer til hverandres område så vil det oppstå et område med h.h.v. negativ og positiv romladning, et *sperresjikt*. Forskjellen i romladning på de to sidene gjør at det settes opp et elektrisk felt i sperresjiktet, noe som fører til en spenningsforskjell mellom de to sidene, $-V_d$. Fig 8.16 illustrerer dette. For typiske dopekonsentrasjoner, så er tykkelsen på sperresjiktet et par mikrometer, og verdien av V_d ligger mellom 0,1 og 1 volt. Figur 8.17 illustrerer hva som skjer når man kobler en spenningsforskjell over de to sidene av p-n overgangen. Dersom man kunstig øker spenningsforskjellen, så vil bare forskjellen i energinivåer mellom de to sidene øke. Det vil ikke føre til mer strøm enn det som naturlig fins p.g.a. den termiske genereringen av frie ladninger.

Men hvis man kobler på en spenning i den andre retningen, så vil sperresjiktet bygges ned med en mengde $\Delta E = e \times V$ (e er elektroladningen). Energinivået i ledningsbåndet vil fort bli lavere enn Fermi-energien, og vi skriver $(E - E_F)/kT \approx eV/kT$ slik at antallet frie ladninger i ledningsbåndet blir proporsjonal med $e^{eV/kT}$. Setter man de to bidragene til strøm sammen så får vi *diodeligningen*

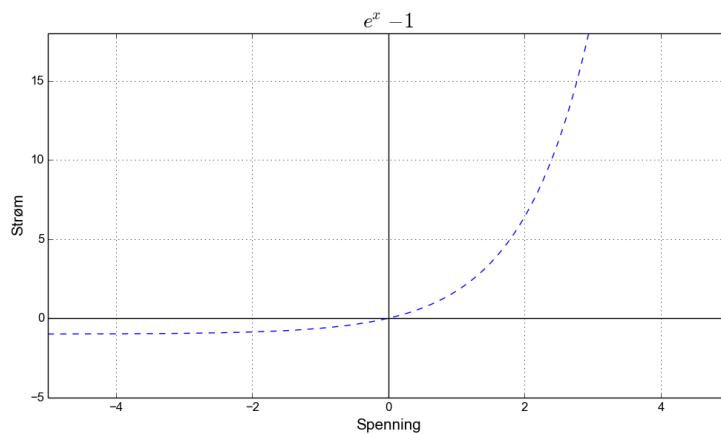
$$I(V) = I_S(e^{eV/kT} - 1) \quad (8.4)$$

Det er også et 'ionisasjonspotensial' til stede ², lik bredden av båndgapet,

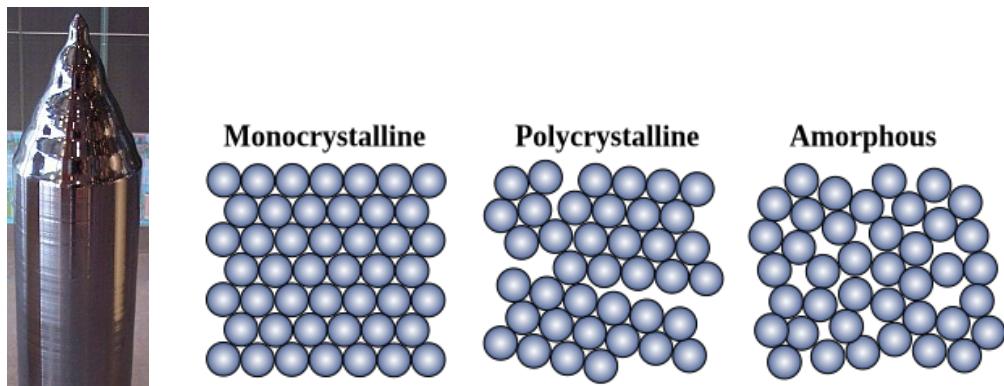
²Strengt tatt skal ordet 'ionisasjonspotensial' gjelde for det potensialet som skal til for



Figur 8.17: Deplesjonsdybde og strøm i pn-overgang ved forskjellige ekssterne spenninger. Til venstre vises den naturlige spenningen i overgangen, i midten er dioden forspent i reversretning, og til høyre er den forspent i foroverretning. Spenningsnivåer er skjematiske beskrevet ved den røde linja.



Figur 8.18: Diodeligningen



Figur 8.19: (Venstre: Monokrystall av silisium. Fra Wikipedia. Denne sages i tynne skiver, typisk 0,3mm. Så proseseres skivene. De dopes med Bor eller Fosfor for å lage p- eller n-type skiver. Prosessen videre avhenger av hva skivene skal brukes til. Høyre: Forskjellige former av silisium (Wikipedia))

slik at man skriver

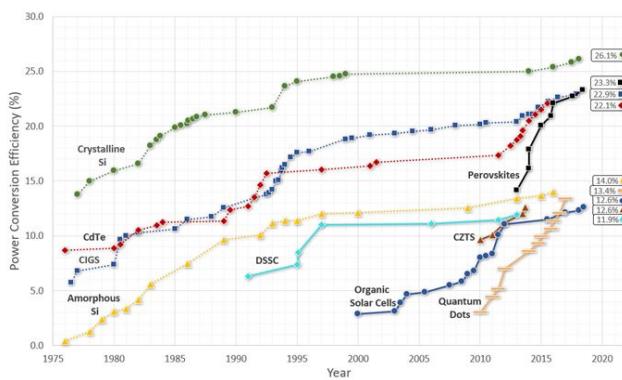
$$I(V) = I_S(e^{e(V-V_g)/kT} - 1) \quad (8.5)$$

I_S kalles *metningsstrømmen* (saturation current på engelsk). Når reversspenningen er høy nok til at det er et elektrisk felt i hele dioden (se fig 8.18) så vil strømmen være tilnærmet konstant over et stort område av reversspenninger, inntil vi får et sammenbrudd som umiddelbart gir høy strøm i dioden. Metningsstrømmen øker sterkt med temperaturen, er materialavhengig og også avhengig av dopekonsentrasjonen i materialet. Silisumsdioder har mye lavere metningsstrøm enn Germaniumsdioder.

8.5.4 Anvendelser av halvlederdioder

Diodelstrukturene lages på tynne plater av silisium (diameter opptil ca 20 cm). De må lages av krystallinsk silisium. Å produsere krystallinsk silisium dem er en nokså omstendelig prosess. Store krystaller gros fram som tykke staver før de sages opp og prosesserdes videre. I noen anvendelser kreves det store 'monokrystaller', mens andre anvendelser, som til solceller, kan benytte materiale bestående av flere mindre krystaller. Dette materialet kalles polysilisium. Etterhvert har man også laget svært tynne diode-skiver. Da er materialet bøyelig og fleksibelt. Dette bidrar til å øke anvendelsesområdene!

å frigjøre et elektron fra et nøytralt atom. Her er det isteden snakk om energien som skal til for å få et elektron opp fra valensbåndet til ledningsbåndet.



Figur 8.20: Utvikling av effektiviteten til solceller for forskjellige typer halvledermateriale

Fotodioder og solceller

Ettersom det allerede er en spenningsforskjell på grunn av romladningen i sperresjiktet kan elektron-hullparene samles på elektroder, og det lages altså elektrisk strøm. Energieffektiviteten til diodene ligger typisk på omtrent 15-20%, altså at 15-20 % av strålingsenergien konverteres til elektrisk strøm.

Det forskes mye for å øke effektiviteten på solceller. Det er en teoretisk grense på rundt 30%. Men man kan sette flere p-n overganger etter hverandre for å øke sjansen for fotoabsorbsjon. Videre fins teknikker for å lage svært tynne flak av dioder. Da blir materialet fleksibelt og bøyelig. Det forskes også i nye materialer. En lovende type halvledermaterialer kalles Perovskitter. Dette er nokså kompliserte kjemiske forbindelser som kan produseres med stor fleksibilitet. Etter et par tiår med utviklingsarbeid er det oppnådd høye effektiviteter (se figur 8.20). Men det er problemer med stabiliteten av forbindelse, strukturene mister sine egenskaper over tid. Om de skal være brukbare som energifangere bør jo cellene ha flere tiårs holdbarhet.

Kameraene i våre mobiltelefoner består også av et høyt antall fotodioder. Da er silisiumskiva delt i små piksler, som hver for seg er lysfølsomme dioder. Signalet fra hver piksel må bearbeides og forsterkes. Dette kan gjøres i spesial-designede elektronikkbrikker som 'bump-bondes' på sensoren. Men i moderne kamera er piksel-dioden selv gjort aktiv, med de nødvendige elektroniske forsterkerelementer integrert inn i hver piksel.

Deteksjon av ioniserende partikler

De moderne eksperimentene i kjerne- og partikkelfysikk benytter detektor-systemer bestående av silisiumsdioder. Diodene kan formes på silisiumskiva

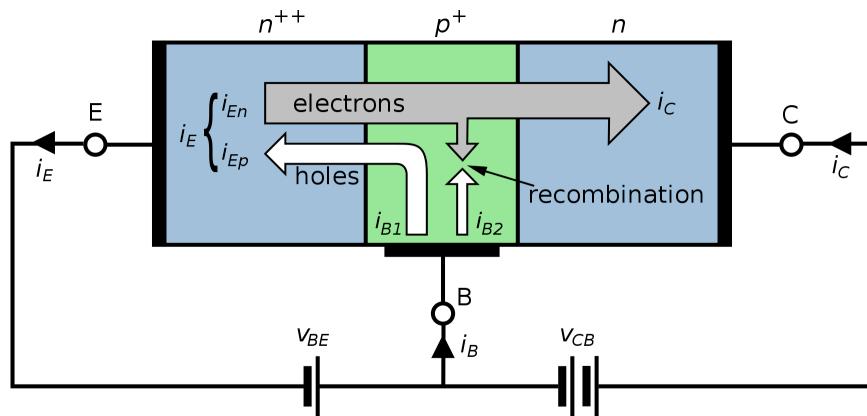


Figur 8.21: En sensormodul bygd opp av fire silisiums-sensorer som hver er ca $6 \times 6 \text{ cm}^2$, og utlesningslektronikk. Sensorene er delt inn i 768 striper som leses ut individuelt. Slike moduler var del av ATLAS detektoren ved CERN fra starten og fram til en større oppgradering i 2027.

både som striper og piksler, som p-dopede områder på n-type substrat. Sensorene kobles i reversretning og spenningen er over sensoren er så stor at deplesjonsområdet omfatter hele skiva. Sensorsystemer består ofte av flere frittstående lag med tynne skiver som de energetiske partiklene går tvers igjennom, og avsetter litt ionisasjon i hvert lag. Denne ionisasjonsenergien avsettes ved at det dannes frie elektron-hullpar. Den gjennomsnittlige energien som kreves for å lage ett slikt par er 3,65 eV (altså betydelig høyere enn bredden av båndgapet.) Det fins også halvedersensorer som måler energien til langsomme partikler, f.eks. α -partikler, ved å absorbere hele energien. Dette gir en presis måling av denne energien.

Lysemitterende dioder (LED-lys)

LEDlys har revolusjonert metodene for kunstig belysning, og effekforbruk er redusert til små brøkdeler av hva som er nødvendig for glødelamper. Når det sendes strøm i foroverretning gjennom en diode, så vil de genererte elektronene hoppe fra ledningsbånd til valensbånd og kvitte seg med en bestemt mengde energi. Hvis dette skjer ved utsendelse av kun ett foton, og dette har en bølgelengde svarende til synlig lys, så vil vi altså ha en Light Emitting Diode (LED). Her må andre materialer enn slilsium benyttes for å få den ønskede bølgelengden på lyset. For få år siden eksisterte kun LEDer som sendte ut rødt lys. Det har vært en stor utfordring i finne fram til halvlederdioder



Figur 8.22: Oppbygging av en NPN transistor. Fra Wikipedia. Mengden elektroner som diffunderer fra terminalen E til C styres ved spenningen V_{BE} .

med større båndgap, og der elektronene mister energi ved utsendelse av ett foton. Men nå har forskningen i materialteknologi brakt oss LEDer i mange farger, og med svært høy lysstyrke. Bølgelengdeområdet på lyset til en LED er veldig smalt, og for å få fram de fargene man ønsker vil flere LEDer settes sammen til å lage en passende intensitetsfordeling og farge.

Andre dioder

En Zenerdiode koblet i reversretning vil bryte sammen ved en forutsigbar spenning, og er i bruk i en del elektroniske kretser. Det fins også tunneldioder, med svært tynne sperresjikt. Da ledes strøm gjennom tunneleffekten, og det oppstår en spesiell sammenheng mellom påtrykt spenning og strøm. I noen områder reduseres strømmen når spenningen øker.

8.5.5 Transistor

Diodeligningen viser at økningen av strøm i dioden kan være svært stor for små økninger i spenning i foroverretning. Denne effekten kan utnyttes i transistorer (navnet er opprinnelig *transfer resistor*) , utført enten som $p-n-p$ og $n-p-n$ eller overganger til å forsterke små endringer i spenning.

Poenget er at selv en svært liten endring av V_{BE} på 'Source'-siden kan gi en stor endring av antall elektroner som flyter over til den høyre siden av bildet 'Drain', se fig. 8.22. Elektroden i midten kalles 'Base'. Gjennom denne

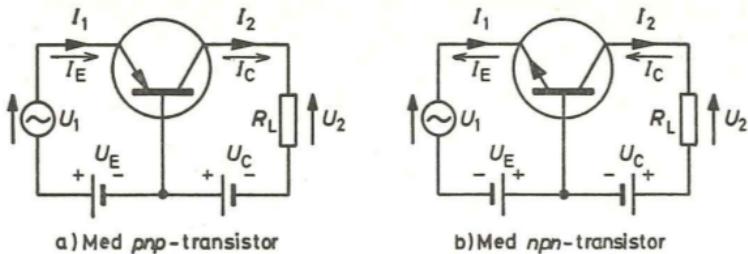


Fig. 4.8. Prinsipp for basiskoplet transistorforsterker.

Figur 8.23: Fra Sigmund Soma: Grunnbok i elektronikk

etterfylles halvlederen med elektroner (eller hull) slik at det kan gå strøm kontinuerlig. I dette oppsettet har man god kontroll på endringen av strøm, i_C , og man kan lage lineær signalforsterkning.

Strømendring ut, ΔI_2 (fig. 8.23) blir proporsjonal med strømendring inn (ΔI_1). Man vil forsterke signalet som forårsaker strømendringen, (ved U_1). Spenningsendringen ut, U_2 svinger i takt med U_1 . Forsterkningsfaktoren vil bestemmes av verdiene av U_C og R_L . Denne type transistorer kalles bipolare transistorer, for de to sidene av transistoren forspennes gjerne med forskjellig fortegn på spenningen.

FeltEffekt Transistorer (FET) og MOS

Felteffekttransistoren virker på en annen måte. Her styres strøm ved å variere det elektriske feltet i halvlederen. MOS (Metal-Oxide-Semiconductor) strukturer består av et basismateriale av dopet silisium (med p-type atomer i fig ??), et isolerende oksyldlag, og et metall-lag der man kan legge en elektrisk terminal og forspenne. I oksydet er det etset åpninger der elektrisk kontakt kan lages med områder dopet med n-type atomer (når substratet er p-type).

Styrespenningen, Gate' brukes til å endre det elektriske feltet mellom source og drain delen av transistoren. Fortegnet på V_G er i reversretning i forhold til bakplanet. Først øker bare feltet i substratet, men etterhvert dannes en ledende kanal mellom Source og Drain i et inversjonslag, og det flyter elektroner. Det begynner å gå en strøm fra Source til Drain dersom disse to terminalene ligger på forskjellig potensial. Avhengig av hvordan de er koblet kan strukturen benyttes både som forsterkere og som raske brytere

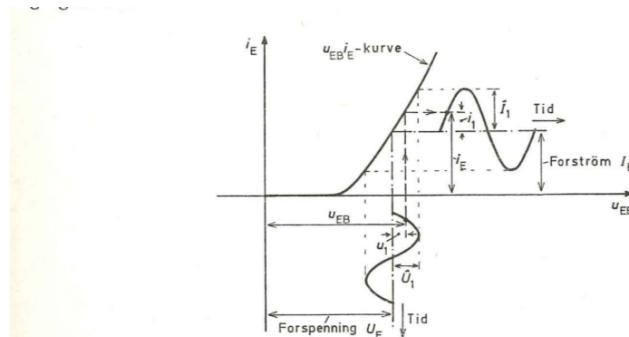


Fig. 4.9. Når inngangskretsen tilføres en vekselspenning med amplitudeverdi \hat{U}_1 i serie med forspenningen U_E , vil emitter-basispenningen u_{EB} svinge periodisk mellom $U_E + \hat{U}_1$ og $U_E - \hat{U}_1$, så emitterforstrømmen I_E får en overlagt vekselstrømskomponent med amplitudeverdi \hat{I}_1 .

Figur 8.24: Fra Sigmund Soma: Grunnbok i elektronikk

i logiske kretser.

MOS, eller CMOS, der C-en betyr 'Complimentary' er de fundamentale byggestene i logiske kretser, som er grunnpilaren i alle digitale enheter (PC osv). Transistorene kan lages svært små, med plass til millioner pr kvardratcentimeter. Grovt sett kan hver transistor representere en bryter med spenningsutgang som kan veksle mellom to verdier, og dermed assosieres med logisk '1' eller '0'.

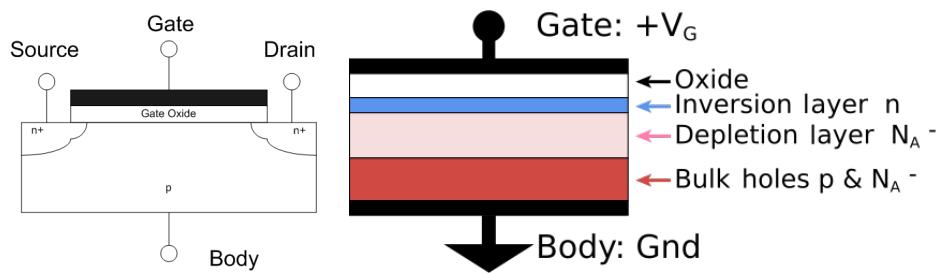
Antallet transistorer som kan integreres på en silisiumsbrikke har økt kraftig, med en dobling omtrent hvert andre år. Dette kalles Moore's lov.

Dette har resultert i elektronisk utstyr med stadig større slagkraft.

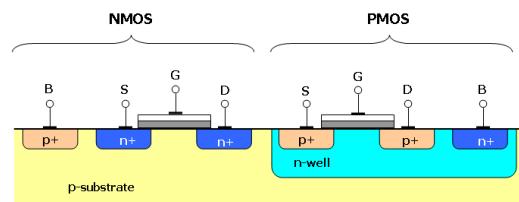
8.6 Superledere

Superledere leder strøm uten elektrisk resistans. Dette foregår i visse materialer ved svært lav temperatur. Den grunnleggende teorien for supraleddning, BCS-teori (Bardeen, Cooper, Schrieffer)³, går ut på at par av elektroner i krystaller (altså en regulær struktur av positive ladninger) kan binde seg sammen i et par, (Cooper par), og eksistere med andre Cooper par i et eget energibånd. Siden parene har heltallig spinn, oppfører de seg som et bosoner, og alle parene kan være i sammen tilstand! Så lenge ikke termiske forstyrrelser ødelegger båndet, vil parene marsjere i takt gjennom lederen, som dermed er en superleder. En annen effekt av supraleddning er magnetfelt ikke tren-

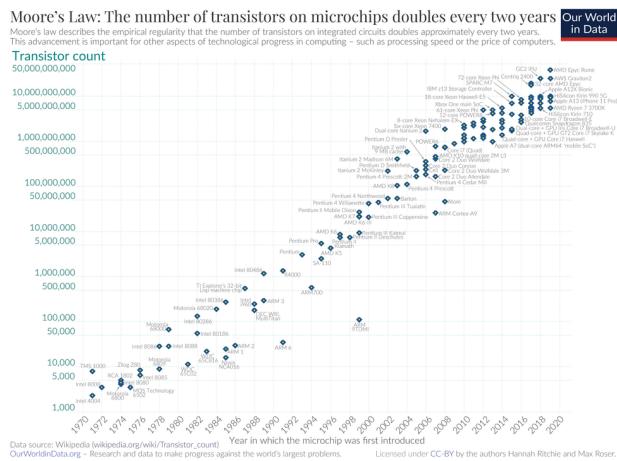
³John Bardeen har mottatt to nobelpriser i fysikk, en for BCS teorien, og en for oppfinnelsen av transistoren



Figur 8.25: Fra Wikipedia. Til venstre er det ingen påtrykt spenning. Til høyre er det satt positiv spenning på 'gate'. Da skyves huller mot terminalen nederst, og det lages en deplesjonssone uten frie ladninger. Men de n-dopede områdene under 'Source' og 'Drain' øker i utstrekning, og når V_G er høy nok er det dannet en ledende kanal mellom de to terminalene. Tykkelsen av kanalen, og dermed strømmen mellom 'Source' og 'Drain' kontrolleres av V_G .



Figur 8.26: CMOSstruktur. Fra Wikipedia



Figur 8.27: Moore's 'lov' som viser at antall transistorer som kan integreres på en mikrochip har doblet seg annethvert år siden 1970. Fra Wikipedia.

ger igjennom materialet. Dette kalles Meissner effekt, og fører til magnetisk levitasjon, noe som tas som bevis for at materialet er superledende. Se

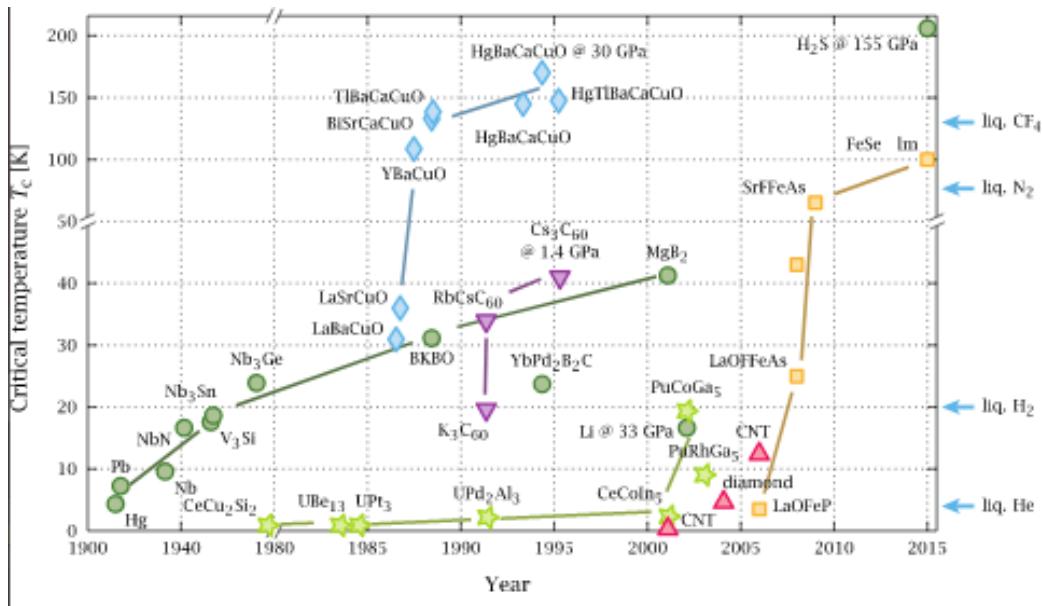
<https://en.wikipedia.org/wiki/Superconductivity>

Superledere benyttes for å lage sterke magnetfelt i store volum. Da trengs nemlig spoler med svært høy strøm. Lager man dette med konvensjonelle kabler vil de ha svært høyt effekttap. Man får overoppheting, eller - hvis systemet fungerer - en svært høy strømregning. CERN's Large Hadron Collider og de største eksperimentene som er installert der (ATLAS og CMS) benytter superledende magneter. De superledende materialene må kjøles med flytende helium i disse installasjonene (Se unntak lengre ned).

<https://home.cern/news/news/accelerators-electricity-transmission-reaches-even-higher-intensities>
https://en.wikipedia.org/wiki/Magnesium_diboride

I tillegg til såkalt konvensjonelle superledere, som må kjøles ned til under ca 10 Kelvin, fins det høy T_C superledere som kan operere ved temperaturer høyere enn 77 K (Kokepunktet til flytende nitrogen) Det forskes intenst på utvikling av kabler laget av disse materialene, og det er nå mulig å anskaffe slike kabler kommersielt.

https://at-mel-cf.web.cern.ch/html/HTS_leads.htm



Figur 8.28: Utvikling av kritisk temperatur for superledende materialer. Fra Wikipedia

8.7 Oppgaver

- Det sies at bindingene i stoffet GaAs (Galliumarsenid) er 31% ioniske, og 69 % kovalente. Forklar dette utsagnet.
- Vis at antallstettheten av ledningselektroner i et fast stoff er
$$\frac{N}{V} = \frac{n_c \rho N_A}{M}$$
der n_c er antall ledningselektroner pr. atom, ρ er tettheten av stoffet, M er molar masse og N_A er Avogadros tall.
- Bruk formelen til å beregne antallstettheten av elektroner i gull. Gull har ett elektron pr. atom i ledningsmåndet, tetthet $19,32 g/cm^3$ og molar masse på $197 g/mol$.
- Magnesium har to elektroner i ledningsbåndet, tetthet $1,7 g/cm^3$ og molar masse på $24,3$. Beregn Fermi-energi og Fermi-temperatur i magnesium.
- Inkluderer 'gassen' med frie elektroner i metaller alle elektronene i metallet? Hvis ikke, hvilke elektroner er med i 'gassen'?

6. I gull er Fermi-energien 5,51 eV i ledningsbåndet, og resistiviteten er $2.04 \times 10^{-8} \Omega \text{m}$. Estimer midlere fri veilende for elektronene i ledningsbåndet. Anta at man i middel finner ett elektron pr. atom i ledningsbåndet. Hvor mange atomer i gitteret svarer denne lengden til?
7. I diamant er båndgapet mellom valens- og ledningsbåndet på 5,47 eV. Hvilk største bølgenengde har et foton som kan få et elektron til å hoppe opp i ledningsbåndet? Ren diamant er gjennomsiktig og farveløst. Gi en forklaring på dette. Forklar hvordan urenheter i diamant kan gi diamanten farge.
8. Verifiser formelen og den numeriske beregningen av N/V gjort i seksjon 8.5.1 (ligning 8.3) Hvordan endrer tallet seg dersom man erstatter m_e med (f.eks.) $m^* = 1,1m_e$ eller $m^* = 0,9m_e$?
9. Avstanden mellom atomene i koksalt (NaCl) er 0,282 nm. Finn tetheten av koksalt (Atommasser finnes enkelt i tabeller).
10. Med utgangspunkt seksjon 8.3, finn fjærkonstanten og energinivåene til små vibrasjoner i NaCl-kristaller. Finn også θ_{vib} (se seksjon 7.6.5 og 7.8) for salt. (Det kan være greit å merke seg at $e^2/4\pi\epsilon_0 = 1.44 \text{ eV nm}$, og at en atomær masse-enhet kan skrives $1u = 931,5 \text{ MeV}/c^2$)
11. Vi kom fram til at konsentrasjonen av antall elektroner i ledningsbåndet i en halvleder er en funksjon av temperaturen,

$$n = K(T^{\frac{3}{2}})e^{-(E_C - E_F)/(kT)}$$

der avstanden fra Fermienergien opp til ledningsbåndet er 0,585 eV. Finn forholdet mellom antall elektroner i ledningsbåndet for temperaturene 300 K og 308 K elektroner.

12. Lag et plott av diodeligningen i spenningsområdet 0 - 0.4 V for temperaturene 300 og 330 K. Sett $I_S = 10\mu\text{A}$ i for begge temperaturer. Begrens y aksen til $y < 0.2\text{A}$. (Det er lagt ut et eksempel for plotting i python i mappen som heter 'programvare')
13. I dioder rundt romtemperatur kan man anta at metningsstrømmen (også kalt reversstrømmen) dobles for en temperaturøkning på 8 grader. Kommenter denne antakelsen i lys av resultatet i oppgave 11. Hvis $I_S = 10\mu\text{A}$ ved 300 K, hva er verdien av I_S ved 330 K? Gjenta 12, men bruk den nye verdien av I_S for 330K. Kommentar?

14. En ioniserende partikkel avsetter typisk 280 eV ionisasjonsenergi når den går gjennom $1 \mu\text{m}$ silisium. En silisiumsdetektor har en tykkelse på $300 \mu\text{m}$. Hvor mange elektron-hullpar genereres av en partikkel som går igjennom en slik detektor, når du regner at all avsatt ionisasjonsenergi blir til elektron-hullpar?
15. En silisiumdiode har $I_S = 10^{-7} \text{ A}$ og $V_g = 0,7\text{V}$. (se ligning 8.5). Den kan brukes som et termometer ved å måle strømmen nøyaktig. Om den forspennes med 1V , beregn temperaturkoeffisienten

$$\alpha = \frac{dI/dT}{I}$$

pr. kelvin ved en temperatur på 300 K .

16. Om degenerasjonstrykk: Ved konstant temperatur lyder termodynamikkens første lov (ligning 7.11 $dU = -pdV$). Dermed kan vi definere trykket som $p = -dU/dV$. Her er U den totale kinetiske energien til elektronene i gassen.
 - a) Vis at degenerasjonstrykket for elektrongassen blir
$$p = \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{5} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{5/3}$$
 - b) Beregn degenerasjonstrykket for elektronene i ledningsbåndet i kobber. Sammenlign svaret med trykket til en ideell gass med samme tetthet ved $T=300 \text{ K}$.
 - c) Hvorfor eksploderer ikke elektronene ut av metallet?

Kapittel 9

Kjernefysikk

Etter Rutherford's gullfolieeksperimenter ble idéen om at materien består av en tung kjerne av positiv ladning nokså plausibel. Men hvor stor er en slik kjerne, og hvordan er den bygd opp? La oss se på hva Rutherford kunne konkludere om størrelsen med sine α -partikkeleksperimenter.

En partikkell med ladning $2e$ i avstand r fra en kjerne med ladning Ze har potensiell energi på

$$E_p = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \frac{2Z}{r} \times (1,8 \times 10^{-9} \text{ eVm})$$

Typisk kinetisk energi til en α -partikkell er $E_k = 5 \text{ MeV}$. Partikkellens nærmeste avstand blir dermed

$$r = Z \times 3,6 \times 10^{-9} / (5 \text{ MeV}) = 0,72Z \times 10^{-15} \text{ m}$$

Kjerneladningen til gull er $79e$ så da blir nærmeste avstand omtrent 55 fm. Rutherford konkluderte at radien til gullatomene måtte være mindre enn dette.

9.1 Protoner og nøytroner

Hvor stort er et proton?

Etterhvert er protonradien estimert på mange måter. En av de mest presise går ut på å måle energinivåene i hydrogenatomet med så høy presisjon at avvik fra Bohr-atomets punktladning må tas hensyn til, slik at man må sette inn en utsmyrt avstand r istedenfor Coulombpotensialet. Man får da en radius for den elektriske ladningsfordelingen i protonet på omtrent 0,85 fm. De mest presise målingene går ut på å måle 'Lamb-oppsplitting', en oppsplitting av ${}^2S_{1/2}$ og ${}^2P_{1/2}$ nivåene i hydrogenspekteret som forklares ved

hjelp av kvantelektrodynamikk, (QED). Som vi har sett i kapittel 4 så er bølgefunksjonen til elektroner i s -tilstander ikke null i $r = 0$. Selv om volum-elementet nær $r = 0$ er svært lite blir bølgefunksjonen og energien følsom for avviket fra punktformig ladning nær null. Det fører til en forskyvning $^2S_{1/2}$ nivået, mens dette skjer i langt mindre grad for $^2P_{1/2}$, der bølgefunksjonen i origo er null. Vi må innføre en ladningstetthet, $\rho(r)$. Radian definieres som det gjennomsnittlige avstanden av ladningen fra origo.

$$r_p = \sqrt{\int_0^\infty r^2 [r^2 \rho(r)] dr}$$

Det går også an å lage *myonisk* hydrogen, der elektronet er erstattet med et myon, og gjennomføre målingen av den samme oppsplittingen. Dette er gjort ved PSI (Paul Scherrer Institut), Sveits, der man kan produsere myoner i store mengder.

Siden massen til myonet er 200 ganger massen til elektronet så er myone-ne mye nærmere protonet (i middel) med tilsvarende større sannsynlighet for å bli funnet inni protonet. Dette gir et svært presist anslag av ladningsradien [14], med fire sifferers presisjon. Men det fins flere målemetoder med samme presisjon. En av de andre metodene er å beskyte protonene med elektroner og studere fra det som forventes ved spredning mellom to punktformede partikler, slik vi beskriver nedenfor (seksjon 9.2). Pr. idag (2022) så avviker resultatene fra hverandre, så vi får nøyne oss med å gjengi et omtrentlig gjennomsnitt:

$$r_p = 0,85 \text{ fm}.$$

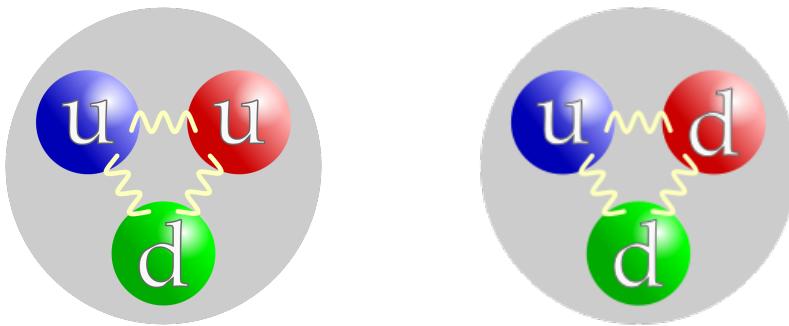
Men det ovenstående gjelder fordelingen av *elektrisk* ladning i kjernen. To spørsmål melder seg.

For det første: er den elektriske ladningen en utsmurt grøt? Svaret på dette er nei. Protonet og nøytronet består av tre *kvarker*. For å bygge opp de to nukleonene trengs to typer kvarker med forskjellig ladning. 'Opp-kvarken' med fraksjonell ladning $+2/3$ elektronladninger, og 'Ned-kvarken' med ladning $-1/3$. Protoner består av kvarkene: (u,u,d) og nøytronene består av (d,d,u).

For det andre: Kvarkene er stengt inne i nukleonene på grunn av den sterke kjernekraften. Er protonets størrelse lik fordelingen av elektrisk ladning som beskrevet over?

Det viser seg at ladningsradien til protonet er en del mindre enn nukle-onstørrelsen man kommer fram til ved å studere tyngre kjerner.

Teorien for de sterke kjernekreftene kalles QCD (Kvante-Kromo-Dynamikk). I denne teorien har kvarkene *fargeladning*, som fører til sterk tiltrekning til



Figur 9.1: Kvarkinnhold i protoner og nøytroner. Fra Wikipedia

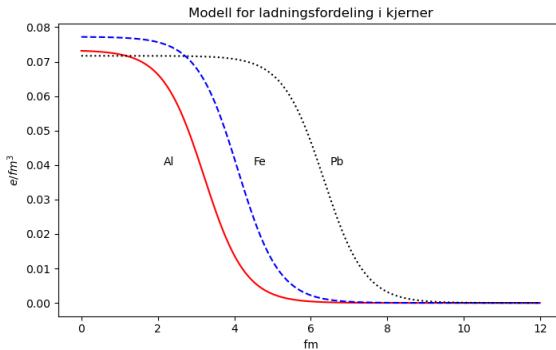
andre kvarker, slik at kvarkene holdes sammen inni protonet, trass elektrisk frastøtning. Fargeladningen til kvarkene kan anta tre verdier, 'rød', 'grønn' og 'blå'. Kraftformidlerne i QCD kalles *gluonter*. Man tenker seg at de tre kvarkene holdes sammen i et gluonfelt. I dette feltet er det mye energi, og det er denne energien som gir protonet mesteparten av sin hvilemasse på $938 \text{ MeV}/c^2$. Opp og ned kvarkene har masser på kun 3 til 5 MeV/c^2 . Fig. 9.1 illustrerer hvordan protoner og nøytroner beskrives. De tre kvarkene må ha forskjellige farger i en blanding som framstår som fargeløs. (Derfor ordbruken: Farger, slik vi ser dem, kan bygges opp av tre grunnfarger. Blandes disse med noenlunde like menger så blir blandingen fargeløs.)

9.2 Tyngre kjerner

For å finne radien av kjerner har man beskutt kjernene med høyenergetiske elektroner. Fordelingen av spredningsvinkler mellom to punktpartikler er godt kjent i en formel utledet av Rutherford basert på klassisk fysikk. Den sier at antall partikler som avbøyes som funksjon av spredningsvinkel er gitt som

$$\frac{dN}{d\Omega} = K \frac{1}{\sin^4 \theta/2}$$

Denne formelen gjelder også for kvantemekaniske punktpartikler. Men når energien til elektronene er høy nok så får man avvik fra denne formelen fordi protoner og kjerner har en endelig utstrekning. Det må introduseres en *formfaktor* som gir ladningsfordelingen. Siden elektronstrålen og protone ne må beskrives med kvantemekanikk og som bølgepakker, så er det mange likhetspunkter med spredningsproblemer i optikken. En god modell for



Figur 9.2: Modell av elektrisk ladningsfordeling i kjerner

ladningsfordelingen for middelstunge og tunge kjerner er gitt av følgende fordeling:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{(r-c)/a}}. \quad (9.1)$$

Altså Fermi-Dirac funksjonen (uten sammenheng med statistisk fysikk forøvrig) med eksperimentelt bestemte verdier

$$c = 1,07 \text{ fm} A^{1/3} \quad a = 0,54 \text{ fm}$$

c er avstanden fra origo til punktet der ladningstettheten er redusert til halvparten av ρ_0 . [15] ρ_0 bestemmes fra normering til total-ladning

$$Ze = 4\pi \int_0^\infty r^2 \rho(r) dr$$

I disse dager kan normeringskonstanten beregnes greit numerisk. Figur 9.2 viser eksempler på ladningsfordelinger til noen kjerner, som produsert med modellen (pythonprogram vedlagt i appendiks). Disse fordelingene ble etablert allerede på 1950-tallet, ved elastisk spredning, der kjernen overlever som et objekt med endelig ladning.

9.3 Kjernens oppbygging

En atomkjerner består av Z protoner og N nøytroner, noe som gir

$$A = Z + N \quad (9.2)$$

nukleoner. A kalles også for massetallet. Protontallet, som også kalles atomnummeret, Z , gir også navnet på elementet i det periodiske system. Men et

element kan ha flere *isotoper*, noe som betyr at det for gitt Z finns kjerner med forskjellig antall nøytroner. For eksempel finns det to stabile isotoper av karbon, $^{12}_6C$ (eller C-12) og $^{13}_6C$ (eller C-13). Indeksen nede er strengt tatt overflødig idet symbolet for elementet forteller hvor mange protoner det er i det. I tillegg finns det ustabile isotoper av karbon, C-14 som produseres i atmosfæren, indusert av kosmisk stråling. Det går også an å framstille C-11, som er en isotop med levetid på ca 20 minutter. Atomære masser oppgis gjerne i enheter av **u**, den atomære masseenheten. Den er definert som massen av isotopen $^{12}_6C$ delt på 12, *med elektroner*.

$$1\text{u} = 1,66054 \times 10^{-27}\text{kg} = 931,49\text{MeV}/c^2$$

Den sterke kjernekraften sørger for at protonene i kjernen ikke flyr fra hver andre på grunn av den elektriske frastøtningen. Det kreves 'ionisasjonsenergi' på noen millioner elektronvolt (MeV) for at en typisk kjerne skal splittes, altså en faktor 10^5 til 10^6 mer enn ionisasjonsenergien for atomer. Størrelsen til atomkjerner er godt beskrevet som om den er satt sammen av rimelig inkompresible nukleoner (protoner og nøytroner), slik at volumet av kjernen er proporsjonal med A. For mange formål kan radien til en kjerne skrives som

$$r_A = r_0 A^{1/3} \quad (9.3)$$

med $r_0 = 1,12 \text{ fm}$, altså en del større enn fordelingen av elektrisk ladning.

Volumet av en kjerne blir da

$$V = 5,88 A \text{fm}^3$$

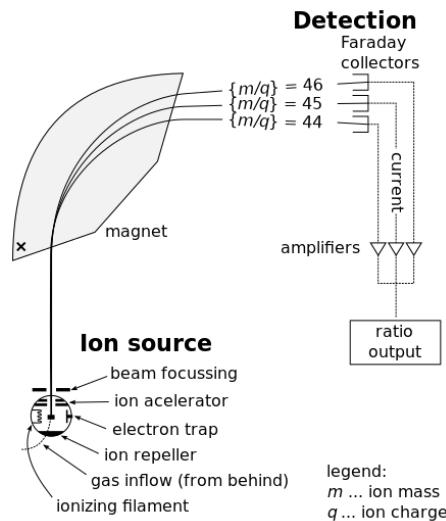
9.3.1 Bindingsenergi og Q-verdi

I likhet med at det kreves energi for å frigjøre elektroner fra atomer og lage positive ioner, kreves energi for å slå løs et nukleon fra en kjerne, som sagt av størrelsесorden MeV. Dette er en så stor energi at det er mulig å sammenligne de forskjellige kjernenes masser, og slutte seg til bindingsenergier utfra masseforskjeller og formelen $E = mc^2$. Forskjellen mellom massen til en gitt kjerne og summen av massene til samme antall frie protoner og nøytroner kalles for *massedefekt*.

Figur 9.4 viser bindingsenergi pr. nukleon som funksjon av nukleontall. Forløpet av bindingsenergier lar seg beskrive ved *dråpemodellen* for kjernekreftene (Se seksjon 9.5.2)

Q-verdi

I en kjernefysisk reaksjon kan man regne ut den utviklede energien, Q – *verdien*, på grunnlag av forskjellen i masse mellom begynnelses- og sluttpro-



Figur 9.3: Prinsippskisse for massespektrometer, for måling av nuklidemasser, eller identifikasjon av dem. Fra Wikipedia.

duktene. Q-verdien i reaksjonen $A + B \rightarrow C + D$ blir

$$Q = \Delta mc^2 = [m_A + m_B] c^2 - [m_C + m_D] c^2 \quad (9.4)$$

Hvis Q-verdien er negativ, så kan reaksjonen bare foregå dersom kjernene A eller B har kinetisk energi som kan overføres til å produsere den ekstra massen. Hvis Q-verdien er positiv, så vil det utvikles kinetisk energi i prosessen, overført til kjernene C og D .

Vi ser i figur 9.4 at bindingsenergi pr. nukleon er høyest for $A \approx 50 - 60$. Jernkjerner med $Z=26$ og $N=20$ er et av elementene med høyest bindingsenergi pr. nukleon.

Tunge kjerner, som for eksempel Uran har mindre bindingsenergi pr. nukleon. Da vil de deles i to lettere kjerner og sende ut 2-3 nøytroner i tillegg. Fisjon kan foregå spontant i naturen, men med liten sannsynlighet. Mer relevant er det å diskutere induserte fisjonsprosesser. Et typisk eksempel på dette er når U-235 splittes etter å ha blitt truffet av et nøytron i reaksjonen

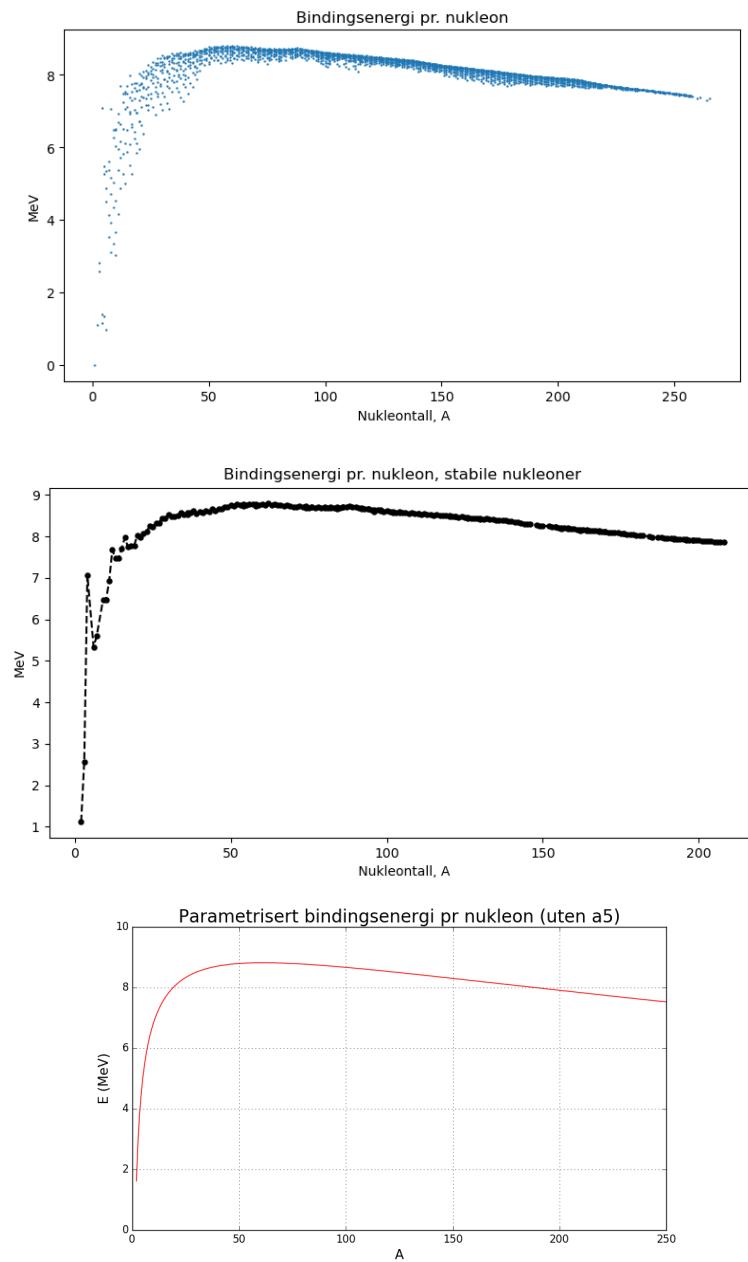


Massene på venstre side er

$$(235,04393 + 1,00867)u = 236,05253u$$

og de på høyre side

$$(140,91441 + 91,92615 + 3 \times 1,00867)u = 235,86656u$$



Figur 9.4: Bindingsenergi per nukleon som funksjon av massetallet, A . Det midterste plottet er for stabile nukleoner, med stiplet linje mellom nukleonene. Legg merke til at He-4 kjernen har en god del høyere bindingsenergi pr. nukleon enn nabonukleonene. Data fra <https://www.nndc.bnl.gov/nudat3> Nederst ser vi funksjonen som kommer fram gjennom parametriseringen i dråpemodellen.

Hvileenergien for $1u$ er $m_u c^2 = 931,5 \text{ MeV}$, og Q-verdien blir:

$$Q = (236,05260 - 235,86656) \times 931,5 \text{ MeV} = 0,18605 \times 931,5 \text{ MeV} = 173,3 \text{ MeV}$$

Det er viktig å bruke mange nok siffer etter komma i masseberegningen. 1 MeV svarer en masse på omtrent 0,001 u, så fire siffer etter komma er gjerne nødvendig. Man må også merke seg at de atomære massene inkluderer massene til elektronene i det nøytrale atomet. I ligningen over kansellerer antall elektroner i differensene. I β -henfall er det imidlertid ikke slik.

I denne reaksjonen er det mye bindingsenergi omgjort til kinetisk energi på datterproduktene. Vi ser av figur 9.4 at energi vil frigjøres når en tyngre kjerne fisjonerer. Vi kan lese av på den teoretiske kurven: For å lage en kjerne med 200 nukleoner fra frie nøytroner og protoner er det frigjort $200 \times 8 \text{ MeV} = 1600 \text{ MeV}$. For to kjerner med 100 nukleoner hver som er det frigjort $2 \times 100 \times 8,6 \text{ MeV} = 1720 \text{ MeV}$. Så om kjernen med 200 nukleoner splittes i to like deler så frigjøres det ca $(1720-1600) \text{ MeV} = 120 \text{ MeV}$.

9.3.2 Antall protoner og nøytroner i stabile kjerner

Lette, stabile kjerner består av omtrent like mange protoner som nøytroner. Men etterhvert som de blir tyngre så vil de stabile kjernene ha fler nøytroner enn protoner. Protontall plottes mot nøytrontall i et s.k. Segrè-plott. Figur 9.5 viser et slikt plott, for både stabile og ustabile kjerner. Vi skal komme tilbake til hvorfor det er et nøytronoverskudd i stabile kjerner i beskrivelsen av sterke kjernekrefter.

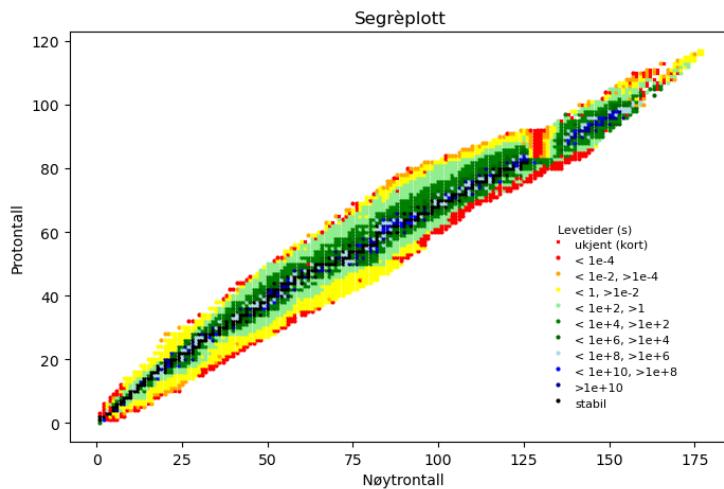
Atomkjernen som Fermigass

Atomkjerner, hvite dverger og nøytronstjerner kan diskuteres meningsfylt som fermigasser.

Tyngre atomkjerner består av typisk 200 nukleoner som er pakket sammen i et volum som svarer til volumet av 200 frie protoner og nøytroner. Man kan sette en nukleonradius på $1,1 fm$, altså et volum på $\frac{4}{3}\pi R^3 = 5,8 fm^3$ pr. kjerne. Siden protoner og nøytroner er forskjellige så er det ca $N/2$ like nukleoner pr. volumenhett

Det viser seg at tettheten av kjernene er nokså uavhengig av antall nukleoner, altså $N/V = 1/(5.8 fm^3)$. Vi bruker formelen fra ovenfor, men deler nukleontallet på to, og setter inn $(\hbar c)^2 = 197(MeV fm)^2$ og $m_p c^2 = 938 MeV$, og får:

$$E_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{2V} \right)^{2/3} \frac{(\hbar c)^2}{2(m_p c^2)} = 38.8 MeV$$



Figur 9.5: Protontall mot nøytron tall for kjente kjerner. Fargekoden viser levetider. Kategorien 'ukjent' er kortlivede nukliser med kun øvre grenser for levetiden. Data fra <https://www.nndc.bnl.gov/nudat3>.

Dette er den kinetiske energien for det høyestliggende nukleonet. Omsettes det til hastighet, så finner man hastigheter over 10^7 m/s. Kan dette være noe reelt, eller har vi misbruikt teorien? Senere skal vi se at en slik nukleonhastighet inni kjernen kan benyttes for å forklare sannsynligheten for α -henfall.

Hvite dverger er stjerner med masse mindre enn ca 8 solmasser som har kollapset, etter først å ha gjennomgått en fase som rød kjempe. Den lyser p.g.a. termisk energi, ikke p.g.a. fusjonsprosesser.

Hvite dverger er kjernen i det som er igjen etter en rød kjempe, og har en typisk masse på 0,6 solmasser, mens diameteren bare er 0,01 soldiametre. Atomstrukturer har opphört, isteden er materialet et plasma av kjerner og elektroner. Det er trykket fra elektronene, degenerasjonstrykket, som gjør at de hvite dvergene ikke kollapser videre.

Hvis stjerner har mer enn ca 8 solmasser, så eksploderer de til supernovær. Etterhvert trekker materialet i midten seg sammen og blir til nøytronstjerner. Den store massen har ført til at gravitasjonskraftene har overvunnet 'degenerasjonstrykket' fra elektronene. Elektronene har isteden 'fusjonert' med protoner og blitt til nøytroner. Nøytronstjerner er dermed en utrolig kompakt klump med tetthet omtrent lik tettheten av en atomkjern. Med en radius på rundt 10 km vil de ha en masse på rundt to solmasser.

9.3.3 Kjernespinn og magnetiske moment

Kjerner har også spinn og magnetiske moment. De to fundamentale nukleonene er begge fermioner med spinnkvantetall $s = 1/2$, slik at egenspinnet blir $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{3/4}\hbar$. z-komponenten av det magnetiske momentet til protoner og nøytroner skrives slik som for elektroner (formel 4.27).

$$\vec{\mu}_p = g_p \frac{e}{2m_p} \vec{S}_p \quad ; \quad m\vec{u}_n = g_n \frac{e}{2m_n} \vec{S}_n \quad (9.5)$$

Som vi har forklart i seksjon 4.2.5 så er faktoren g nær 2 for elektroner. Men g_p og g_n er ikke nær 2, som man skulle forvente for punktpartikler. I steden har vi

$$g_p/2 = 2,793 \quad \text{og} \quad g_n/2 = -1,913$$

fordi protoner og nøytroner er sammensatte partikler¹. Tyngre kjerner kan ha både heltallig og halvtallig spinn avhengig av antall nukleoner som kjernen er bygd opp av. Skallmodellen for kjerner er konstruert i analogi med skallmodellen for atomære orbitaler, og kan til en viss grad forklare spinnkvantetallet til en del kjerner. Vi skal ikke diskutere skallmodellen her.

9.3.4 MR: Kjernemagnetisk resonans

Dersom vi setter kjerner i et magnetfelt så splittes energitilstandene til kjernene opp i et antall tilstander som avhenger av antall mulige verdier av z-komponenter av kjernespinnet.

$$E_{\pm} = \vec{\mu} \cdot \vec{B} = g \frac{e\hbar}{2m} B \times (\pm \frac{1}{2})$$

der z-aksen er valgt langs retningen av B-feltet og m_s er kvantetallet for z-komponenten av kjernespinnet. Om vi antar at kjernen har halvtallig spinn, for eksempel protonene i vannmolekyler, så har vi en oppsplitting mellom de to energinivåene på

$$\Delta E = g_p \frac{e\hbar}{2m_p} B \quad (9.6)$$

Hvis vi sender inn fotoner med rett energi (som gjerne er i radiobølgeområdet), $E_{\gamma} = \hbar\omega = \Delta E$, så vil dette føre til et eksitasjoner, 'spinnflipp'. Når disse de-eksiterer igjen så sendes det ut radiobølger som kan detekteres. MR-instrumentet kan bestemme hvor radiobølgene kommer fra, og dermed posisjonen av vannmolekylene som flipper spinnretning.

¹At vi deler på 2 skyldes at anomalitetsfaktoren ofte skrives i enheter av et magneton $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$, som er en naturlig enhet for heltallige spinnkomponenter, m_l .

I et MR instrument plasseres mennesker i et sterkt homogent magnetfelt. Men det oppstår små, posisjonsavhengige variasjoner i magnetfeltet på grunn av menneskevevet. Dermed vil resonansfrekvensen også være posisjonsavhengig. Ved å variere frekvensen kan man dermed kartlegge styrken av signalene i forskjellige steder, or rekonstruere et bilde av tetthetsfordeling av vannet i kroppen.

9.4 Radioaktivitet

De ustabile kjernene henfaller til andre kjerner i prosesser med samlenavn *radioaktivitet*. Hver ustabil kjerne har en bestemt midlere levetid. Denne varierer fra littesmå brøkdeler av et sekund til flere milliarder år. Det er usikkert hvor lenge hver ustabil kjerne vil leve, men det vil være en endelig sannsynlighet pr. tidsenhet som resulterer i denne levetiden. Dette leder til loven om levetid, og begrepet *halveringstid*, som forklart slik:

Antallet kjerner av gitt type som henfaller i et tidsintervall dt må være proporsjonal med antallet kjerner som vi har i den prøven vi studerer.

$$dN = -N(t)\lambda dt$$

Endringen er negativ fordi antall gjenværende kjerner reduseres i tidsintervallet.

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt$$

$$\int_{N_0}^{N(t)} \frac{dN}{N} = \int_{t=0}^t -\lambda dt'$$

Vi har $\int \frac{dx}{x} = \ln(x) + C$ så

$$N(t) = N(0)e^{-\lambda t}$$

λ kalles henfallskonstanten, og tiden det tar til vi sitter igjen med halvparten av det opprinnelige antall nuklider kalles for halveringstiden, $t_{1/2}$ som relateres til λ slik:

$$\frac{N(t_{1/2})}{N(0)} = \frac{1}{2} = e^{-\lambda t_{1/2}}$$

Så

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad (9.7)$$

I stedet for halveringstiden benyttes ofte midlere levetid, τ ofte ganske enkelt kalt *levetiden*. Midlere levetid er

$$\tau = \frac{\int_0^\infty tN(t)dt}{\int_0^\infty N(t)dt} = \frac{\int_0^\infty te^{-\lambda t}dt}{\int_0^\infty e^{-\lambda t}dt} = \frac{1}{\lambda} \quad (9.8)$$

(se integral i tillegg B)

Radioaktiv halveringstid

Ustabile kjerner desintegrerer med konstant sannsynlighet pr. tidsenhet. Dette gir opphav til loven om halveringstid:

$$N(t) = N(0)e^{-\lambda t} \quad (9.9)$$

Henfallskonstanten, λ , er karakteristisk for hver ustabile nuklide. Halveringstiden er den tiden det tar for at mengden av et ustabilt stoff skal reduseres til halvparten av det opprinnelige og er gitt som

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}.$$

Levetiden er den gjennomsnittlige tiden en kjerne eksisterer fra den ble skapt,

$$\tau = \frac{1}{\lambda}.$$

9.4.1 Naturlig radioaktivitet i og på jorda

Det antas at jorda er omrent 4,5 milliarder år gammel og ble laget ved at 'støv' samlet seg i en gravitasjonell kollaps. Sammentrekningen gav støvet mye kinetisk energi, som resulterte i at jorda hadde høy temperatur ved skapelsen. Siden har jorda blitt nedkjølt, men mantelen er fortsatt svært varm. Radioaktivt materiale produserer også varme i mantelen, og forsinker nedkjølingen. De radioaktive elementene som forårsaker dette er Kalium-40, Uran-238 og Thorium-232. Disse elementene finner vi også i berggrunnen nær jordoverflata.

K-40

K-40 har et halvliv på 1,24 milliarder år. Det henfaller på to måter: i 89,3% av tilfellene ved utsendelse av elektroner i reaksjonen



og i 10,7% av tilfellene i reaksjonen



Kalium tas opp i kroppen gjennom næringsstoffer og man regner at vevet inneholder omtrent 2 gram kalium pr. kilo. Av dette er 0,012% K-40.

Uran

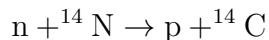
Naturlig uran består stort sett av isotopene U-238 (99,27%) og U-235 (0,72%). halveringstiden til U-238 er 4,47 milliarder år, mens den er 0,7 milliarder år for U-235. Når U-238 desintegrerer ved α -henfall så genereres det en kjede med radioaktive henfall før restene av kjernen ender opp som stabilt bly (Pb-206). Siden noen av datterkjernene kan henfalle på forskjellige måter fins det fler 'veier' til det stabile sluttproduktet. Fig. 9.6 viser hovedveien. Det er her vi finner Radium (halvliv 1600 år), som var oppdaget av Marie og Pierre Curie. Sammen med Henri Bequerel fikk de nobelprisen i fysikk i 1903 for oppdagelsen av radioaktivitet. I 1911 fikk Marie Curie nobelprisen i kjemi for oppdagelsen av Radium og Polonium. Edelgassen Radon (halvliv 3,8 dager) er det direkte henfallsproduktet fra Radium. Det er også radioaktivt, og kilde til stråledose ettersom gassen siver ut fra berggrunnen og følgelig blander seg med luften vi puster. Det står mer om dette senere i kapittelet.

Thorium

Th-232 er den eneste naturlig forekommende isotopen av grunnstoffet Thorium. Det har et halvliv på 14 milliarder år. Grunnstoffet var oppdaget av en norsk amatørgeolog, Morten Thrane Esmark, og identifisert av den svenske kjemikeren Jöns Jacob Berzelius, og oppkalt etter den norrøne guden Tor. Et henfall av Thorium genererer også en hel kjede av nye radioaktive henfall.

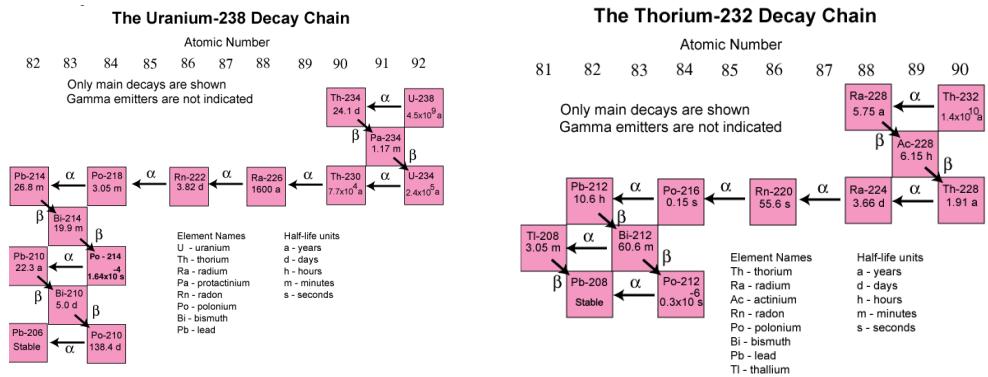
9.4.2 C-14 datering

Kosmisk stråling består av protoner og andre partikler som kommer fra verdensrommet og induserer kjernereaksjoner i atmosfæren. En av reaksjonene som inntreffer er



Reaksjonsligningen kan også skrives ${}^{14}\text{N}(\text{n}, \text{p}){}^{14}\text{C}$. C-14 er ikke stabilt. Det har en halveringstid på 5730 ± 40 år, og henfaller gjennom denne reaksjonen (β -henfall):





Figur 9.6: Naturlige henfallskjeder.

Fra <https://pubs.usgs.gov/of/2004/1050/uranium.html> og [..../thorium.html](https://pubs.usgs.gov/of/2004/1050/thorium.html).

Dermed har vi alltid en komponent av C-14 i luftens CO₂. Planter bruker CO₂ i fotosyntesen. Andelen C-14 vil i snitt være $1,2 \times 10^{-12}$ pr. karbonatom i levende materiale. Når materialet dør vil det slutte å ta opp C-14, og andelen C-14 vil dermed halveres for hver periode på 5730 år.

Mengden C-14 i et preparert prøve kan finnes ved å måle β-aktiviteten. Grunnet den lave aktiviteten er imidlertid dette vanskelig, spesielt fordi det alltid vil være bakgrunnstråling til stede, fra byggematerialer såvel som fra kosmisk stråling. Nå for tiden benyttes teknikker med massespektrometer (se fig. 9.3) isteden for å finne andelen C-14. I Norge har vi et nasjonalt laboratorium for C-14 datering ved NTNU i Trondheim [17].

9.4.3 Enhet for radioaktivitet

Mengden av en radioaktiv substans i et stoff måles i hvor mye av stoffet som desintegrerer pr. tidsenhet. Enheten Bequerel, Bq, angir antall desintegrasjoner pr. sekund.²

Enhet for Radiosaktivitet

Aktivitet angis i Bequerel (Bq), antall desintegrasjoner pr. sekund.

$$1\text{Bq} = 1\text{s}^{-1}$$

I tidligere tider var aktivitet knyttet til hvor mye ionisering som ett gram med radium kunne lage. Enheten kaltes Curie (Ci) etter det berømte fysiker-

²Altså samme dimensjon som frekvens. Det er imidlertid greit å reservere enheten Hertz for regelmessige svingninger.

paret Marie og Pierre Curie. Enheten benyttes fortsatt mye, f.eks. i USA, og er nå definert som

$$1Ci = 3,7 \times 10^{10} Bq$$

Aktivitet er altså et mengdemål for et radioaktivt stoff. Hvor stor stoffmengde det svarer til som målt i kg avhenger av stoffets halveringstid. La oss skrive a for aktivitet inn i formelen angir endringen av stoffmengde:

$$a\Delta t = \Delta N = -N\lambda\Delta t$$

Dermed er altså antall atomer til stede i stoffprøven

$$N = \frac{a}{\lambda} = \frac{at_{1/2}}{\ln 2}$$

For eksempel: Radon har et halvliv på 3,8 dager, altså $3,3 \times 10^5$ sekunder. Dermed vil 1000 Bq med radon i et rom tilsi at det befinner seg

$$N = \frac{3,3}{0,69} \times 10^8 = 4,8 \times 10^8$$

radonatomer i rommet (omrent 2×10^{-13} gram.) Men det oprinnelige stoffet som ligger i bakken for å produsere denne mengden radon er U-238, med et halvliv på $4,48 \times 10^9$ år $\approx 1,5 \times 10^{17}$ sekunder. Dette svarer dermed til omrent 2×10^{20} atomer, omrent 8 mg. Vi kommer tilbake til enheter for biologiske effekter av stråling i seksjon 9.7.1

9.5 Den sterke kjernekraften og modeller for kjerner

Den fundamentale teorien for kjernekraften kalles QCD, og beskriver kreftene mellom kvarker slik de framstår i kollisjoner med svært høy energi. Det står litt mer om QCD i kapittelet om partikkelfysikk. Her ønsker vi å forklare hvordan protoner og nøytroner kan henge sammen i større kjerner takket være den sterke kjernekraften. Man må se på tiltrekningen mellom nukleoner som en *effektiv kraft* med opphav i QCD, litt i analogi med hvordan molekyler kleber seg sammen v.h.a. Van der Waals-krefter, som jo er et resultat av Coulomb-kraften. Men det fins fortsatt innen enkel matematisk overgang fra QCD til beskrivelsen av kreftene *mellan* nukleoner.

Noen egenskaper er klare: Kjernekraften er mye sterkere enn elektromagnetisme, siden elektrisk frastøtende protoner kan henge tett sammen i kjernene. For det andre må rekkevidden av kraften være kort, mye kortere enn

størrelsen til et atom (≈ 1 Ångstrøm (10^{-10} m)), ettersom molekyler forklarer utelukkende ved hjelp av elektromagnetiske krefter. Kjerneradier er av størrelsесorden 10^{-15} m, så det er rimelig å anta at rekkevidden av kjernekraften er omtrent 10^{-15} m.

I 1935 publiserte den japanske fysikeren Hideki Yukawa en modell for sterk vekselvirkning som benyttet kraftformiddere med masse, etter mønster av QED, kvante-felt teorien for elektromagnetisme, der fotonet er kraftformidler. Istedent for Coulombpotensialet gir Yukawateorien et potensial gitt som

$$V(r) = \frac{g}{r} e^{-\frac{mc^2}{\hbar c} r} = \frac{g}{r} e^{-\frac{r}{R}} \quad (9.10)$$

Vi har $\hbar c = 197$ MeVfm. Hvis rekkevidden er $R = \frac{\hbar c}{mc^2} = 10^{-15}$ m, så blir massen til kraftformidleren $197 \text{ MeV}/c^2$.

Som et forsøk på å forklare β -henfall, f.eks. $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$ forestilte Yukawa seg at det også fantes kraftformiddere med ladning. I 1936 ble myonet funnet i kosmisk stråling. Det har masse på $106 \text{ MeV}/c^2$, og kunne godt være Yukawas kraftformidler. Men dette viste seg å være galt. I 1947 ble ladde *pioner* (π -mesoner) funnet, etterfulgt av oppdagelsen av et nøytralt π -meson (π^0). Disse har masser på rundt $135 \text{ MeV}/c^2$. Disse trodde man lenge var de fundamentale vekselvirkingspartiklene i Yukawas teori. Selv om vi nå vet at pionene er sammensatte partikler, og at nøytronhenfall ikke er forårsaket av de sterke kjernekreftene, så benyttes pionutveksling i mange praktiske beregninger relatert til sterke kjernekraft.

Etterhvert ble det klart at β -henfall måtte forklares med en annen kraft enn den som får nukleoner til å henge sammen. Denne kraften kalles den svake kjernekraften. Den svake kjernekraften gir vekselvirkninger mellom kvarker og elektroner, og er ansvarlig for bl.a. β -henfall. Dette er beskrevet senere i dette kapittelet. I *Standardmodellen* for partikkelfysikk er teorien for svake vekselvirkninger slått sammen med teorien for elektromagnetisme, og det er snakk om én elektrosvak kraft med én styrke. Men kraftformidlene i β -henfall, W-partiklene, har masse på ca $80 \text{ GeV}/c^2$, så rekkevidden er svært kort, omtrent 10^{-18} meter.

9.5.1 Nukleoner som Fermigass i en potensialbrønn

Nukleoner er fermioner slik som elektroner. Vi kan lære en hel del ut fra Paulis eksklusjonsprinsipp og kunnskapen om kjernevolumet, på nøyaktig samme måte som vi beskrev elektroner i ladningsbåndet i metaller som en Fermigass av frie elektroner. Degenerasjonsgraden, antall romlige tilstander vi kan fylle i et volum ble beregnet i kapittel 4, ligning 4.5. Men i hver romlig

tilstand kan vi fylle med tilstander forskjellige tilleggsegenskaper. Proton-tilstanden er klart forskjellig fra nøytron-tilstanden, og begge har to mulige spin-tilstander. Degenerasjonsgraden fra ligning 4.5 må multipliseres med 4. I en kjerne med protoner og nøytroner har vi derfor

$$g(E) = \frac{4Vm^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \sqrt{E}dE$$

Vi kan så finne Fermi-energien for A nukleoner i dette volumet, med antakelse at de fordeler seg i henhold til F-D statistikk med $T = 0$.

$$A = \int_0^{E_F} g(E)dE = \frac{4Vm^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \left[\frac{2}{3}E_F^{\frac{3}{2}} \right]$$

så

$$E_F = \left[\frac{3\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}{8m^{\frac{3}{2}}} \frac{A}{V} \right]^{\frac{2}{3}} = \frac{\hbar^2}{m} \left[\frac{3\sqrt{2}\pi^2}{8} \frac{A}{V} \right]^{\frac{2}{3}} \quad (9.11)$$

Vi kan sette inn gjennomsnittet av proton og nøytronmassen, $mc^2 = 938,9$ MeV, og benytte $\hbar c = 197$ MeV fm. Fra ligning 9.3 har vi $\frac{A}{V} = \frac{1}{5,88} \text{ fm}^{-1} = 0,17 \text{ fm}^{-1}$ og vi får

$$E_F = 38 \text{ MeV}$$

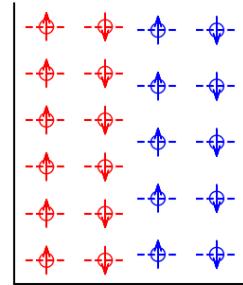
De høyestliggende nukleonene har altså omtrent så mye kinetisk energi. Om enda fler nukleoner skulle plasseres i volumet måtte de mest energirike nukleonene ha enda mer energi. Men da unslipper de åpenbart kjernen, ettersom så tunge kjerner ikke fins i naturen.

Nøytron-proton-asymmetri

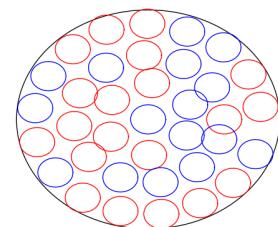
Protonene frastører hverandre på grunn av elektrisk ladning. For gitt tilstand vil de dermed ha noe høyere energi enn nøytronene. I en potensialbrønn av gitt dybde er det derfor plass til flere nøytroner enn protoner siden energinivåene ligger tettere. Fig. 9.7 illustrerer dette. Dette gir en forklaring på at det er flere nøytroner enn protoner i en stabil, tung kjerne.

9.5.2 Dråpemodellen og emprisk masseformel

Verken QCD eller pionutveksling er hensiktsmessig for å beskrive hvor sterkt protonene og nøytronene er bundet sammen i større kjerner. Dråpemodellen gir en god parametrisering av forløpet av bindingsenergi som funksjon av A (fig. 9.4). Her tenker man seg at nukleonene beveger seg som seige dråper i



Figur 9.7: Skjematisk tegning av tilstandene til nukleonene i en kjerne. Energinivåene fylles opp i brønnpotensialet helt til det ikke fins nivåer med lavere energi enn høyden på potensialet. Nøytron-nivåer til venstre. Her er nivåene tegnet inn med med jevn avstand. Det hadde nok vært mer realistisk å tegne dem som å øke med n^2 slik vi kjenner for 'partikkel i boks'-problemet.



Figur 9.8: Illustrasjon av dråpemodell av kjerne som bestående av nukleoner som vekselvirker med nabonukleonene. Det er litt fler nøytroner enn protoner i kjernen

kjernen (se fig. 9.8). Den korte rekkevidden av kraften mellom nukleonene gjør at nukleoner som har mange nabonukleoner er sterkere bundet enn de som har få naboer. Det første bidraget til total bindingsenergi er 'Volumbidraget', som totalt blir:

$$B_V = a_V A = a_V(N + Z)$$

Men så ligger mange av dråpene i overflaten av kjerna og har lavere total bindingsenergi fordi de ikke er i nær kontakt med så mange kjerner som de midt i volumet. Overflatearealet er proporsjonalt med $A^{2/3}$, så det er naturlig å trekke fra litt bindingsenergi for et antall nukleoner proporsjonalt med dette:

$$B_O = -a_O A^{2/3}$$

Men protoner i kjernen frastøter hverandre. Dette gjør at de har litt høyere energinivå, altså mindre bindingsenergi enn nøytronene. Frastøtningsenergien mellom to protoner er proporsjonal med Z^2/r der r er avstanden mellom dem, og vi får en korreksjon som er avhengig av gjennomsnittlig avstand mellom protonene (proporsjonal med $A^{1/3}$) så vi har

$$B_C = -a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}}$$

Det er beregnet (iflg. [16]) at a_C har en verdi på $a_C = 0,71$ MeV.

Vi forklarte at det var en asymmetri på grunn av sterkere binding av nøytronene i kjernen. Men hvis asymmetrien blir for stor, så må nye nivåer fylles opp. I snitt blir det en reduksjon i bindingsenergi ved høy asymmetri. Vi må innføre et asymmetriledd

$$B_S = -a_S \frac{(N - Z)^2}{A}$$

Til slutt må vi ta med at energinivåene i kjernen også kan ses på som energiskall slik som i atomfysikken. Det laveste nivået kan fylles med to protoner og to nøytroner. Kjerner med et partall av både nøytroner og protoner har spesielt mye bindingsenergi, mens kjernene med et oddet antall av både protoner og nøytroner er løsere bundet enn snittet. Leddet er

$$B_{a_p} = a_p \frac{(-1)^Z - (-1)^N}{A^{1/2}}$$

Verdien av korrekjonen avhenger av om kjernen er odd-odd; like-odd eller like-like. For å få bindingsenergi per nukleon deler man på A . Sammenligning med data gir en bestemmelse av de fem parametrene. I [16] oppgis (i MeV)

$$a_V = 15,85 \quad a_s = 18,34 \quad a_c = 0,71 \quad a_a = 92,86 \quad a_p = 11,46$$

Figur 9.4 (nederst) viser resultatet av parametrisringen, bortsett fra paringstermen, som jo varierer rundt den viste kurven, avhengig av spesifikke verdier av Z og N .

9.5.3 Skallmodell

Noen av de doble partallene gir spesielt sterk binding. Dette kalles 'magiske tall'. Det laveste magiske tallet er 2, og det er helium-kjernen som har dette antallet protoner og nøytroner. Dette forklarer at det er nettopp denne kjernen som kan sendes ut av tyngre kjerner i prosessen som kalles alfanfall. Andre magiske tall viser seg å være 8, 20, 50, 82 og 126, og hvis både nøytrontall og protontall er 'magisk' så er kjernen spesielt stabil. For eksempel er blyisotopen med 126 nøytroner stabil, blant mange ustabile isotoper med et annet antall nøytroner. (Bly, Pb, har $Z=82$). De magiske tallene indikerer eksistens av en skallstruktur med fulle skall for disse antallene. Siden potensialet som holder protonene inne i kjernen er temmelig forskjellig fra Coulombpotensialet, så blir de magiske tallene forskjellig fra de man finner for atomer (der de tre første magiske tallene er 2, 8 og 18.) Man lurer på om det fins en stabil kjerne med $Z = N = 126$, men denne er ikke funnet. Mye mer kan læres om kjernene med utgangspunkt i en skallmodell for dem, men vi stopper omtalen her.

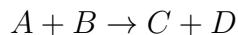
9.6 Kjernreaksjoner

Kjernreaksjoner forekommer i mange former. For det første gjennom henfall av ustabile kjerner. Dette er altså reaksjoner av formen



her betegner B en kjerne som er lettere enn A , mens (C) kan være en α -partikkel, eller en β -partikkel sammen med en nøytrino. Henfallet gir ofte en datterkjerne i en eksitert energitilstand, slik at det umiddelbart også sendes ut et gammafoton.

Den andre klassen kjernreaksjoner kan induseres ved å beskyte kjerner med andre kjerner slik at vi får en reaksjon som grovt sett skrives



Vi diskuterer radioaktivt henfall først.

isotop	Levetid	$\lambda (s^{-1})$	$\ln \lambda$	$E_\alpha (\text{MeV})$
^{232}Th	$1,4 \times 10^{10}$ år	$1,57 \times 10^{-18}$	-41,0	4,01
^{238}U	$4,5 \times 10^9$ år	$4,9 \times 10^{-18}$	-39,9	4,19
^{209}Po	200 år	$1,10 \times 10^{-10}$	-22,9	4,88
^{222}Rn	3,83 dager	$2,1 \times 10^{-6}$	-13,1	5,48
^{211}Po	0,6 s	1,15	0,14	7,44
^{212}Po	3×10^{-7} s	$2,3 \times 10^6$	14,7	8,78

Tabell 9.1: Levetid, henfallskonstant og α -energi til noen isotoper

9.6.1 α -henfall

Mange tunge kjerner er ustabile og hefaller gjennom utsendelse av en helium-4 kjerne, altså en kjerne bestående av to protoner og to nøytroner. Energien til α -partikkelen svarer til det man finner fra Q-verdien til reaksjonen $A \rightarrow B + C$. Radium henfaller til radon slik $^{226}\text{Ra} \rightarrow ^{222}\text{Rn} + ^4\text{He}$

$$Q = [m(^{226}\text{Ra}) - (m(^{222}\text{Rn}) + m(^4\text{He}))] c^2$$

Man kan finne isotopmassene i tabeller. Vær oppmerksom på at disse er oppgitt for nøytrale atomer, så man må tenke igjennom om elektronregnskapet kansellerer, eller om man må korrigere med $m_e c^2 = 511\text{keV}$ for hvert elektron. I dette tilfellet kansellerer det. Vi får

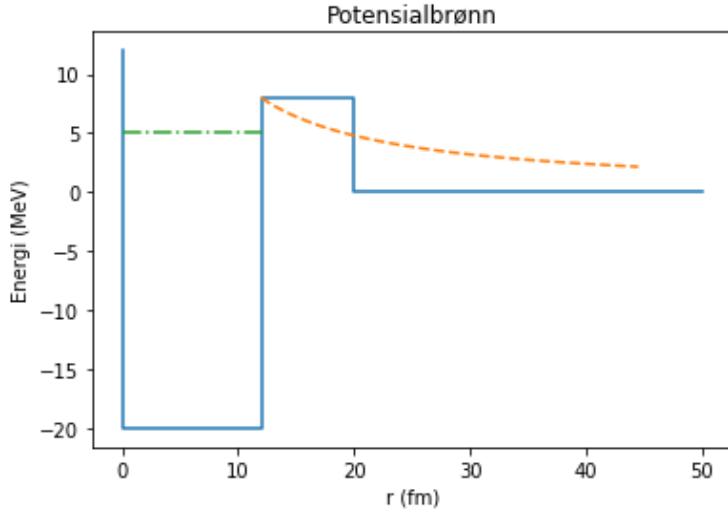
$$\Delta m = (226,0254 - 222,0176 - 4,0026)u = 0,0052u$$

så

$$Q = 931,5 \times 0,0052 = 4,84\text{MeV}$$

Hvorfor sendes det ikke ut, f.eks. He-3 kjerner isteden? Grunnen til kan forklares i dråpemodellen for tunge kjerner (der hvert proton og nøytron er en 'dråpe'). En gang iblant kan dråpene slå seg sammen til lettere kjerner, noe som frigjør kinetisk energi tilsvarende bindingsenergien i den lette kjernen. Det er bare når det lages en He-4 kjerne at den kinetiske energien blir høy nok til at den lette kjernen trenger ut av moderkjernen. Det viser seg at det er en svært sterk sammenheng mellom levetid til moderkjernen og den kinetiske energien til den utsendte alfapartikkelen, se tabell.

Det var den sovjetisk-amerikanske fysikeren George Gamow som lagde en modell som gir en relativt god beskrivelse av sammenhengen mellom levetid og energi på utsendt alfapartikkkel. Modellen gjør bruk av den kvantemekaniske *Tunnelleffekten*, som forklarer at det er mulig for en partikkkel å trenge gjennom en vegg, selv om partikkelen klassisk sett ikke har nok energi til å gjøre dette.



Figur 9.9: To modeller for potensialbrønn: Barriere er enten en firkantet boks eller et Coulombpotensial. Energinivået til en alfapartikkel er antydet, og sannsynlighet for tunnelering er sterkt avhengig av dette energinivået.

I kvantemekanikken kan partikler altså tunnelére gjennom potensialbarrierer. Om en partikkel har energi E , så får man en transmisjonssannsynlighet

$$T = e^{-2kL}$$

(formel 3.19) der $k = \sqrt{2m(U - E)/\hbar^2}$, hvis potensialbarriren har høyde U og lengde L . Den merkelige tunneleffekten er slik at partikkelen beholder sin energi når den tunnelerer. Denne formelen gjelder for en firkantet potensialbrønn slik figuren antyder.

Typisk (kinetisk) alfaenergi er $E_k = 5 \text{ MeV}$, noe som svarer til en klassisk bevegelsesmengde på

$$p = \sqrt{2E_k m}.$$

og (ikke-relativistisk) hastighet

$$v = p/m = \sqrt{2E_k/m}.$$

Massen til α -partikkelen er ca $4u$.

Vi bruker masseenhett MeV/c^2 hvor vi har $1u = 931,494 \text{ MeV}/c^2$ og estimert hastighet blir

$$v = \sqrt{2E/m} = \sqrt{2 \times 5/(4 \times 931,5)} c = 0,05c \approx 1,7 \times 10^7 \text{ m/s}.$$

Diameter til morkjernen vil være omtrent $D = 2R_0 A^{1/3}$ med $R_0 = 1,1 \text{ fm}$. Vi kan anta $D = 12 \text{ fm}$ for de tunge kjernene. Kollisjonshyppighet for α -partikkelen med kjerneveggen:

$$\frac{1,7 \times 10^7}{1,2 \times 10^{-14}} = 1,5 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$$

Henfallsraten λ , d.v.s. antall α -henfall er proporsjonal med transmisjons-sannsynlighet ganger antall treff i veggen:

$$\lambda = 1,5 \times 10^{21} e^{-2\sqrt{2m(U-E)L/\hbar}}$$

eller

$$\ln \lambda = \ln(1,5 \times 10^{21}) - 2\sqrt{2m(U-E)L/\hbar}$$

For numeriske anslag: Bruk

$$\hbar c = 197,33 \text{ MeV fm}$$

$$\ln \lambda = 48,76 - 2\sqrt{2m(U-E)L/\hbar}$$

Vi observerer så at

$$\sqrt{2mc^2}/\hbar c = \sqrt{8 \times 931,5}/197 \text{ s} = 0,44 \text{ s}$$

slik at

$$\ln \lambda = 48,76 - 0,88\sqrt{U-E}L \quad (9.12)$$

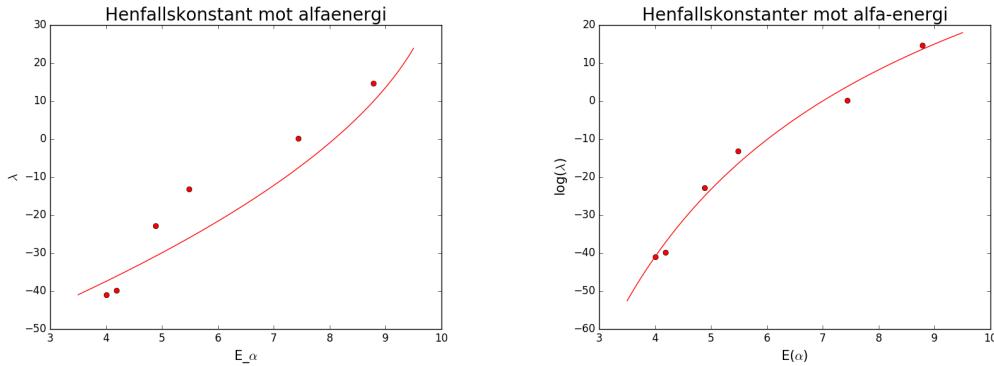
De numeriske verdiene er justert til de seks datapunktene i tabellen ved minste kvadraters metode. Har dette mening?

Vi plotter verdiene fra tabell og finner igjen en omtrentlig beskrivelse hvis vi setter $U=10 \text{ MeV}$ og $L=40 \text{ fm}$. Det kunne vært verre!

Men Gamows modell viser seg å være mye bedre. Her er et boksen erstattet med coulombfrastøtning utenfor brønnen. Lengden av potensialbarriieren fastsettes som verdien r i det punktet der Coulombenergien $U = \frac{4Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ er lik energien til alfabartikkelen minus radien til potensialbrønnen settes til $R = R_0 A^{1/3}$, (altså $L = r - R$). Man får en avhengighet mellom henfallskonstant og α -energi som stort sett følger

$$\ln \lambda = a - bZ/\sqrt{E} \quad (9.13)$$

med *fastlagte* verdier av a og b . Mens vi i plottet til venstre i fig. 9.10 har justert verdier fra observasjoner, så er den røde linja i figuren til høyre fastlagt uten justerbare parametre. Vi kan forklare en variasjon av levetider som går over 24 størrelsesordener med denne modellen!



Figur 9.10: logaritmen til henfallskonstanter mot alfaenergi (i MeV) for to modeller av potensialet. De røde linjene er modellene. Til venstre barriere som firkantet boks. Til høyre har vi Gamows modell, med frastøtning på grunn av Coulombpotensialet. Vi ser at denne modellen passer godt med datapunktene.

9.6.2 β-henfall

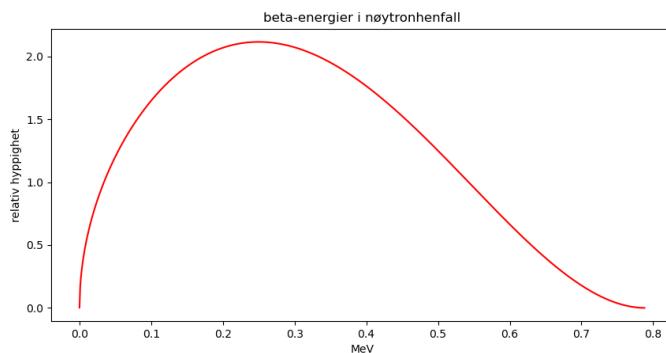
α-strålingen har svært kort rekkevidde, på noen cm i luft. Partiklene stoppes enkelt med et papirark. En annen type stråling hadde lengre rekkevidde, og ble kalt β-stråling. Det viste seg at dette er elektroner, e^- eller *positroner*, e^+ . Fri nøytroner er ustabile og det ble observert at det henfalt til et proton og et elektron. Energiregnskapet er da

$$Q = m_n c^2 - m_p c^2 - m_e c^2 = (939,57 - 938,27 - 0,51) MeV = 0,79 MeV$$

Siden elektronet er så mye lettere enn protonet så tilsier bevaring av energi og bevegelsesmengde at det aller meste av energioverskuddet overføres til elektronet, og alle elektroner burde altså ha en totalenergi nær $m_e c^2 + Q$. Men isteden så man et kontinuerlig spektrum av energier på elektronene med maksimum lik Q -verdien (+ 511 keV). Figur 9.11 viser et omtrentlig spektrum. Så man kunne ikke forklare spekteret med de synlige partiklene alene. Pauli foreslo eksistensen av nye nøytrale partikler, døpt *nøytrinoer* av Fermi. Fri nøytroner er ustabile og henfaller til et proton, et elektron og et *antineutrino*.

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e \quad (9.14)$$

Da forklares de observerte spektrene godt med antakelsen at nøytrinoet er masseløst. Hvis nøytrinoet har en liten masse, så skulle dette komme til syne i energispekteret til elektronene. Den maksimale energien, E_{max} måtte i så fall være noe lavere enn for masseløst nøytrino, med en mengde $m_\nu c^2$. Mange



Figur 9.11: Spektrum av betaenergier fra nøytronhenfall, slik det framkommer i grove trekk. (Se f.eks. [15]) Her vises elektronets kinetiske energi (total energi minus hvileenergien på 511 keV)

eksperimenter er blitt gjort for å studere endepunktsenergien. Så langt har ingen av disse gitt indikasjoner på at nøytrinoene har masse. Men i kapittelet om partikkelfysikk skal vi se at det fins tre typer nøytrinoer. I nøytronhenfall sendes det ut nøytrinoer av 'elektrontypen'. Siden de vekselvirker så svakt så trengs det store detektorsystemer og store mengder nøytrinoer for å ha en rimelig sjanse til å observere noen. Eksistensen av nøytrinoer ble bekreftet i 1950-årene ved hjelp av eksperimenter som var satt opp nær kjernekraftverk, som genererer store mengder nøytrinoer.

I reaksjonene som får sola til å skinne produseres også mange nøytrinoer. Eksperimenter er satt opp for å studere fluksen av nøytrinoer fra sola. Det viser seg at denne er en god del mindre enn forventet fra modeller. Forklaringen viser seg å være at nøytrinoer av elektrontypen har skiftet tilstand og blitt til en av de andre nøytrinotypene på sin ferd fra sola. Denne effekten kalles nøytrinooscillasjoner og kan bare forklares dersom nøytrinoene har en liten masse. Denne massen må imidlertid være så liten at påvisning i spektre som fig 9.11 ikke er mulig.

Vi må konkludere at nøytrinoer har en liten masse, men den er så liten at det kan settes lik null i kjernefysiske prosesser. β -henfall er forårsaket av den svake kjernekraften. En svært plausibel teori for denne ble utviklet av Fermi. Han innførte en slags svak kjerneladning gjennom en konstant kalt *Fermis koblingskonstant*, G_F . Senere har det vist seg at den svake kjernekraften kan beskrives som en feltteori, ved utveksling av tunge kraftpartikler, W -bosoner. Disse har ladning, og har masse på

$$m_W = 80,39 \text{ GeV}/c^2.$$

Utveksling av så massive feltpartikler tilsier svært kort rekkevidde. I partikkelfysikk forstår man β -henfall som omvandlinger som foregår på kvarknivå:



og β^+ henfall:



9.6.3 γ -stråling

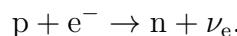
Kjerner har kvantemekaniske eksitasjonsnivåer på samme måte som atomer. Men eksitasjonens energien er som regel mye høyere, typisk mellom 0,05 og 5 MeV. Man kan altså gange energisprangene med nesten en million sammenlignet med typiske sprang i atmofysikken. Deeksitasjon skjer også her gjennom utsendelse av fotoner. Slike høyenergetiske fotoner kalles gammapartikler, gammafotoner eller gammastråling (γ -stråling). Spekteret av energier i gammastrålingen i kjerner er kartlagt for de fleste kjerner og overganger. Ved radioaktivt α eller β -henfall skjer overgangene gjerne til eksiterede kjerner, med umiddelbar de-eksitasjon ved utsendelse av γ -stråling. Derfor kan radioaktive stoffer identifiseres gjennom målinger av energifordelinger av γ -partiklene som sendes ut. Fig. 2.5 viser et slikt spektrum av γ -energier fra henfallet



Den eksiterede bariumkjernen faller ned til grunntilstanden gjennom ustendelse av en γ -partikkkel med energi 0,661 MeV. ^{137}Cs er en mye brukt gammakilde i laboratoriene, fordi denne gammalinen dominerer i spektrene som samles inn. Dessuten er halvlivet til Cs-137 30 år, så man trenger ikke å bytte ut en slik kilde så ofte.

9.6.4 Elektroninnfanging

En siste prosess som forekommer nokså ofte kalles for elektroninnfanging ('Electron Capture'). Dette er prosessen



Den foregår ved at det innerste elektronet i et atom finner seg selv så nær et proton i kjernen at denne reaksjonen kan inntreffe. Det er samme vekselvirkning som foregår her som i 'vanlig' β -henfall, så prosessen kalles ofte for inverst beta henfall. Et elektron fra høyreleggende skall i atomet vil falle ned og ta plassen til elektronet som ble absorbert i kjernen, og sender ut et foton med energi som ofte ligger i røntgenområdet.

9.7 Ioniserende stråling

Når ladde partikler med energi mer enn et titalls elektronvolt kommer inn i materie så vil energiavsetningene og oppbremsing skje gjennom ionisasjon. Da kalles det for ioniserende stråling. I alminnelighet er både α , β og γ -strålingen fra radioaktivitet ioniserende. UV lys med bølgelengde kortere enn ca. 120 nm, svarende til en fotonenergi større enn ca 10 eV er også ioniserende.

På jorden utsettes vi også for kosmisk stråling. Dette er ioniserende stråling med svært høy energi. Mye av primærstrålingen stopper alt i atmosfæren, men en del når bakken. Dette er hovedsakelig myoner. At energien er høy betyr ikke nødvendigvis at partiklene gjør mer skade enn den partiklene fra radioaktivitet, myonene vil gå tvers igjennom kroppen, og vil bare avsette en liten mengde av sin energi i kroppen.

Energiavsetningen pr. masse-enhet beskrives godt gjennom *Bethe-Bloch formelen*, se figur 9.12. Energiavsetningen minker sterkt med økende hastighet, som $1/\beta^2$, og når et minimum ved $\beta \approx 0,96$, og øker relativt ubetydelig for hastigheter over dette. Partikler med hastigheter nær denne verdien kalles Minimum Ioniserende Partikler (MIP). Man kan regne den kosmiske strålingen som treffer oss på jorda som MIP'er.

Ettersom energiavsetning per lengdeenhet øker kraftig med minkende hastighet så vil partikkelen bråstoppe når hastigheten er betydelig lavere enn $\beta \approx 0,8$. All resterende energi vil avsettes over et svært lite område rett før partikkelen stopper. Energiavsettingen er gjennom ionisering, og den er altså ekstra høy akkurat her. Den høye ionisasjonen i dette området kalles en 'Bragg-topp'. Man kan numerisk integrere Bethe-Bloch formelen for å beregne spesifikk energiavsettning som funksjon av dybde. Fig. 9.12 viser forsøk på en slik beregning for protoner med kinetisk energi 150 MeV. Som vi ser er Bragg-toppen svært markant.

Energiavsetningen er en statistisk prosess som beskrives som en rekke kolisjoner mellom den innkomende partikkelen og materien. Derfor smøres oppbremsingen utover, og det blir fluktuasjoner i energiavsetningen, og dermed i rekkevidde til enkeltpartiklene. Bragg-toppen dermed blir mindre markert. Det viser seg at det er en svært asymmetrisk form av fluktuasjonene (som kalles 'Landau-fluktuasjoner'), med en liten sannsynlighet for en svært stor energiavsettning en gang iblant. Simuleringene som ligger til grunn for figur 9.12 tar ikke korrekt hensyn til slike effekter, men forfatteren mener at den skjeve utsmøringen er rimelig korrekt beskrevet i simuleringen.

Heliumkjernene fra α -henfall har kinetiske energier mellom 1 og 8 MeV. Disse vil ikke rekke lenger en noen få centimeter med luft (mellan 1 og 10 cm avhengig av energi). Faste stoffer har tusen ganger så høy tetthet som luft, og her vil rekkevidden bare være et hundretalls mikrometer. Fig. xx viser

simulert energiavsetning for α -partikler med energi 5 MeV i luft.

De lette elektronene fra beta-henfall når lenger, et par millimeter med papp. Siden β -partiklene har høy hastighet også ved lav energi, så avgis ikke så mye energi i endepunktet, og det er ingen markant topp i energiavsetningen her.

γ -stråling og UV-stråling er nøytral og ioniserer ikke. Fotonene må først vekselvirke gjennom prosesser som fotoelektrisk effekt og Comptonspredning. Hvis energien er høy nok, kan det også dannes et elektron-positron par. Det er de sekundære elektronene som produserer ionisasjonen. γ -strålingen kan trenge seg nokså langt inn i materie før den stråler ut et elektron og lager ionisasjon, typisk 5 cm. Rekkevidden av fotonstrålingen i materie beskrives ved hjelp av *absorbsjonskoeffisienten*. Man antar en gitt sannsynlighet pr. lengdeenhet for at et foton skal produsere sekundærelektroner, slik at antallet fotoner som reagerer er proporsjonalt med antall fotoner til stede. Uttrykt ved stråleintensitet har vi:

$$dI = -\mu I dx$$

Matematisk er denne ligningen velkjent, og vi får eksponentiell demping av intensiteten i strålen når den går gjennom materie:

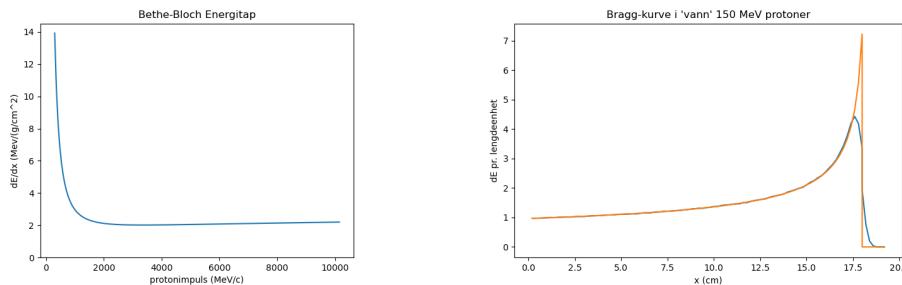
$$I(x) = I_0 e^{-\mu x}$$

Det er hensiktsmessig å skalere absorbsjonkoeffisienten, μ i et stoff med tettheten av stoffet. I svært mange sammenhenger er det greiere å definere absorbsjonslengden, $L = 1/\mu$. Absorbsjonslengden øker med fotonenergi opp til energier over ca 1 MeV. Herfra er sannsynligheten for produksjon av sekundærelektroner nokså uavhengig av opprinnelig fotonenergi, slik at absorbsjonslengden er nokså konstant. Absorbsjonsprosessene er de samme for elektroner og fotoner, og materialer karakteriseres med *strålingslengden* definert for høyenergetiske fotoner og elektroner. Dette er den gjennomsnittlige lengden før et høyenergetisk elektron sender ut bremsestråling.

Naturlig nok vil stoffer med høy tetthet ha kortest absorbsjonslengde. I steden for å oppgi denne lengden i cm så angis den ofte i gram pr. kvadratcentimeter. For typiske energier fra radioaktiv stråling så er absorbsjonslengden mellom 1 og 10 g/cm².

9.7.1 Doser av ioniserende stråling

Man forsøker å forstå virkningen av ioniserende stråling som funksjon av mengden stråling man er utsatt for. Denne mengden oppgis ved å estimere hvor mye energi strålingen har avsatt per masseenhett. Dette kalles for *Dose*.



Figur 9.12: Venstre: Spesifikk energiavsetning for protoner som funksjon av protonets bevegelsesmengde. Denne formelen kalles Bethe-Bloch formelen. Høyre: Energiavsetning for et proton med kinetisk energi 150 MeV som funksjon av dybde. Bråbremsen er veldig skarp for en enkeltpartikkel. Men nedbremsingen er en statistisk prosess, hvert proton bremses ned litt forskjellig, og stopper i litt forskjellige dybder. Den blå kurven viser et gjennomsnitt for 500 oppbremsinger når det er tatt hensyn til fluktuasjoner. Vi ser at det likevel er en nokså lokalisert avsetting av energien. Dette kalles Bragg-toppen.

Enheten for dose er *Gray* definert som

$$1Gy = 1\text{J/kg}$$

Men høy ionisering over et lite område er mye mer skadelig enn når den skjer over et større område. Derfor er strålingen fra langsomme partikler betydelig mer skadelig enn fra raske partikler. For å ta hensyn til dette multipliserer man energiavsetningen med vektfaktor for å få et mål for skadelighet. α -partikler regnes som 20 ganger mer skadelig pr. *Gy* enn β og γ -stråling. Vi har dermed en enhet for biologisk virkning av strålingen, doseekvivalent, kalt Sievert.

Enheter for dose og dens biologiske skadelighet

Dose angis i Gray, og er gitt som energiavsetning pr. kg kroppsvev.

$$D = 1\text{Gy} = 1\text{Jkg}^{-1}$$

Doseekvivalent angis i Sievert, og er ment å beskrive strålingens skadelighet. Den er energiavsetning multiplisert med en vektfaktor w_R som avhenger av stråletype. For α -partikler har vi $w_R = 20$, mens for β og γ -partikler er $w_R = 1$. D=1 Gy gir derfor

$$D_E = 20 \times 1\text{Gy} = 20\text{Sv}$$

for α -partikler og

$$D_E = 1 \times 1\text{Ge} = 1\text{Sv}$$

for β -partikler, γ -partikler, samt for det meste av den kosmiske strålingen.

9.7.2 Hva slags skader gir strålingen?

Den ioniserende strålingen kan føre til at kjemiske bindinger brytes opp. Spesielt vil bindinger i stigetrinnene i cellenes DNA kunne brytes opp. Dette kan føre til at disse cellene ikke reproduseres i sin opprinnelige form, men at det lages abnorme kreftceller isteden. Den viktigste skadefirkingen av lavnivå stråling er dermed at det kan dannes kreft.

Siden alt på jorden er utsatt for litt ioniserende stråling, fra kosmisk stråling og naturlig radioaktivitet, har sunne celler utviklet reparasjonsmekanismer, slik at de fleste bruddene vil repareres. Men det er en sannsynlighet for at ett DNA-molekyl ødelegges på to steder samtidig. Dette er en svært mye vanskeligere situasjon å håndtere, og sannsynligheten for abnorme celler etter en slik hendelse er veldig mye større enn ved et enkelt brudd. Sannsynligheten for slike doble brudd øker naturlig nok kraftig med intensiteten i strålingen man er utsatt for. Vektfaktoren på 20 for α -partikler og andre langsomme partikler skyldes i stor grad at ioniseringen foregår over et lite område. Dette øker altså sjansen for samtidig brudd på to stigetrinn i DNA betraktelig for fast energiavsetting (altså et gitt antall Gy). Dessuten kan α -partiklene generere ødeleggende kjernreaksjoner i tillegg til ionisering. Her er en web side med mye info [18]. Det presiseres her, og mange andre steder, at skade-effekten av lave stråledoser (f.eks 10 ganger den dosen man mottar 'naturlig') fortsatt ikke er godt kjent.

Protoner og nøytroner induserer også kjernreaksjoner. For protoner settes vektfaktoren til 2. Effekten av nøytroner er langt mer komplisert. Her er det særlig de svært langsomme nøytronene som genererer skadelige kjernreaksjoner, og har en vektfaktor på rundt 20, slik som α -partiklene.

En doseberegnning

Å beregne dose er i prinsippet nokså enkelt ettersom det rett og slett er snakk om å finne avsatt ionisasjonsenergi pr. kilo vev. Men det er svært mange korrekSJoner. For eksempel må man ta hensyn til stoffenes halveringstidtid. Videre er det en sannsynlighet for at noe av strålingen slett ikke absorberes (spesielt gjelder dette γ -stråling). Videre gir de forskjellige kjemiske egenskapene forskjellig *biologisk* halveringstid i kroppen. Kjemien avgjør også hvor i kroppen strålingen avsettes. Strontium-90 avsttes lokalisert i benmarg, og gir dermed stor dose sammenlignet med samme antall Bq med Cs-137 som spres utover hele kroppen.

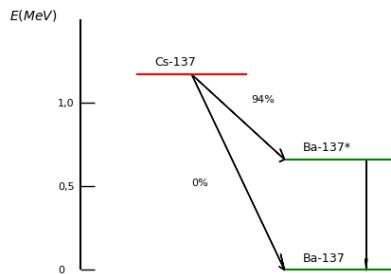
Men vi kan sette opp et regnestykke for Cs-137, idet dette stoffet avsettes jevnt over hele kroppen. Dette er et av stoffene som ble transportert over et stort område på grunn av Tsjernobyl-ulykken. I nordNorge har det også vært en god del forurensning av Cs-137 på grunn av sovjetiske bombeprøver. Cs-137 stoffet har en halveringstid på ca 30 år (og er også godt egnet som laboratoriekilde for γ -stråling). Om det kommer inn i kroppen så vil det følge vannet i kroppen, og dermed fordele seg jevnt. Men stoffet vil også sendes ut av kroppen igjen. Den biologiske halveringstiden til Cesium er ca 70 dager [20]. Figur 9.13 viser henfallsskjema, der energinivåene angitt svarer til Q-verdiene. I 5,3% av henfallene sendes ut β -stråling med maks energi på 1,176 MeV (snittenergi på 1/3 av dette). I de resterende 94,7% av henfallene sendes det ut en β partikkkel med maks-energi 0,514 MeV etterfulgt av en γ -partikkkel med energi på 0,662 MeV. La oss anta at all γ -strålingen absorberes som ionisasjon i kroppen³. For β -henfallene vil i snitt 1/3 av energien tas med av elektronene. Resten forsvinner med de to nøytrinoene som er generert i β -henfallet.

Hundre henfall vil dermed utløse en ionisasjonsenergi på

$$\left[5,3 \times \frac{1}{3} 1,176 + 94,7 \times \left(\frac{1}{3} 0,514 + 0,662 \right) \right] \text{ MeV} = 80,8 \text{ MeV}$$

Som generell tiltaksgrense har myndigheter satt en grense på 600 Bq/kg med radioaktivt Cesium, med et unntak for reinkjøtt, vilt, og ferskvannsfisk

³I [19] antas det at omtrent halvparten av γ -energien avsettes i kroppen, og at hundre Cs-137 henfall gir en energiavsetning på omtrent 50 MeV



Figur 9.13: Henfall Cs137. 94,7% av henfallene er β -henfall til en eksitert bariumkjernerne, som umiddelbart de-eksiterer ved utsendelse av et foton med energi 0,662 keV. I 5,3% av tilfellene er overgangen direkte til grunntilstanden til bariumkjernene.

der grensen er satt til 3000 Bq/kg. Hvis all mat vi spiser er på tiltaksgrensen skulle vi selv inneholde 600 Bq/kg med radioaktivt Cs. Dette vil dermed gi en energiavsetning på $6 \times 80,8\text{MeV}/\text{kg} = 485,0\text{MeV}/\text{kg}$.

Dette gir en dose pr. år på

$$485,0 \times 10^6 \text{eV}/\text{kg} \times 3,15 \times 10^7 \text{s} \times 1,6 \times 10^{-19} \text{J/eV} = 2,4 \text{mJ} = 2,4 \text{mSv}$$

Dette må kalles et 'konservativt' anslag, for den virkelige dosen *må* være en god del mindre, ikke bare på grunn av γ -strålingen som unslipper uten å reagere, men også fordi beregningen også ignorerer at det er et ionisasjonspotensial, en terskelverdi for energioverføringen. Når energioverføringen i en kollisjon er lavere enn dette så blir det ingen ionisasjon. Men det kan jo også hende at Cs-137 likevel ikke fordeler seg helt jevnt i vevet, slik at det er noe større dose noen kroppsdele.

Årsdoser i befolkningen

Tabell 9.2 viser en oversikt over gjennomsnittlige årsdoser. Det er stor variasjon i en del av disse tallene, avhengig av hvor man bor, hvor mye man flyr, antall medisinske røntgenundersøkelser osv. Men vi ser at typisk dose er i området 2 mSv. Om kroppen skulle inneholde 600 Bq/kg med Cs-137, så vil altså denne dose dobles. Ingen vet om dette gir økt risiko for kreft. Motivasjonen for de grenseverdiene er isteden at det ikke ønskes noen klart

Type	Belastning (mSv)
Kosmisk stråling	0,4
Medisin	0,2
Byggematerialer	0,6
Mat	0,2
Ekstern γ	0,3
Sum	1,7

Tabell 9.2: Tabell med tentativer verdier av gjennomsnittlige doser fra forskjellige kilder. Det er stor variasjon i en del av disse tallene, avhengig av hvor man bor. Radon er utelatt fra tabellen idet det kreves en diskusjon av dette bidraget til dose (se tekst)

signifikant økning av dosebelastning i befolkningen. Vil man vite mer om stråling og helse så anbefales en bok utgitt av gruppen for biofysikk ved Universitetet i Oslo som kan lastes ned gratis [19]. FN har også en komité for å evaluere alle sider ved ioniserende stråling (UNSCEAR, United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation). Her fins mange detaljerte rapporter om ioniserende stråling, ulykker, og effekter på befolkningen.

Det er vanskelig å finne en tommerfingerregel for risiko. Men et anslag om 5% kreftrisiko pr. Sv dose har vært brukt. Denne lineære sammenhengen gjelder når dosene har vært rimelig store. Effekten av små doser diskutes fortsatt. Cellenes reparasjonsmekanismer kan muligens håndtere sjeldne brudd på DNA-molekyler helt greit. Årsaken kan være at cellene har tilpasset seg et miljø der litt ioniserende stråling alltid er til stede. Mange mener derfor at man ikke bør anta at kreftrisiko er proporsjonal med dose uansett dose. Det kan for eksempel være fornuftig å innføre en terskel for mengde stråling som skal til før den gir tilleggsrisiko.

For yrkesekspionering er det satt en grense på en snittdose på 20 mSv pr. år. Det er imidlertid tillatt med en dose på 50 mSv i et enkeltår dersom den årlige snittdosen over fem år ikke overstiger 20 mSv.

Bomber og ulykker

Det er tre radioaktive isotoper diskusjonen hovedsakelig dreier seg om når det er snakk om frysprodukter på avveie etter bombeprøver eller ulykker. Se tabell 9.3. Stoffene oppfører seg nokså forskjellig. Cesium oppfører seg som kalium og spres over hele kroppen. Strontium oppfører seg som kalsium og setter seg i ben. Jod samles i skjoldbruskkjertelen om det er lite jod i

Isotop	Henfallsmodi	Fysisk halveringstid	Biologisk halveringstid
Cs-137/Ba-137	β/γ	30 år	70 dager
Sr-90/Y-90	β/β	29,1 år	minst 10 år
I-131/Xe-137	β/γ	8 dager	-

Tabell 9.3: Fisjonsprodukter som bidrar til stråledose ved utslipp. Radioaktive datterkjerner angis også.

kroppen.

Som følge av Tsjernobylulykken ble veldig mange mennesker utsatt for en nokså stor dose. I tillegg til dødsfallene blant dem som var direkte involvert i opprydningsarbeidet rett etter ulykken var det kanskje spesielt tragisk for rundt 5000 barn som fikk skjoldbruskkjertelkreft på grunn av radioaktivt jod. Heldigvis kan denne krefttypen helbredes gjennom et operativt inngrep, eller paradoksalt nok med en inntak av en skikkelig høy dose av radioaktivt jod som ville ødelagt krefcellene ved bestråling. Om man har et kosthold som inneholder rikelig jod, så vil ytterligere inntak av jod reduseres kraftig. Derfor kan man forhindre stråledose ved inntak av jod. Om jod-tabletter hadde vært tilgjengelig for befolkningen rundt Tsjernobyl ville antall krefttfeller i skjoldbruskkjertelen vært redusert. Mye av den radioaktive joden ble tatt inn gjennom melk, og man kunne også vært raskere ute med å forby melk fra de kontaminerte områdene.

Men enda fler ble utsatt for små doser, slik at den totale dosebelastningen økte litt for en stor befolkning. Er det riktig å multiplisere et antall millioner mennesker med en lineær modell uten terskel, for å forutsi antall kreft-tilfelle på grunn av strålingen? Det diskutes fortsatt hvordan man skal estimere antall 'tidlige' dødsfall som følge av denne økningen i dose.

Ulykken ved Fukushima kraftverket i Japan var langt mindre i omfang. Her var det ingen eksplosjon, men en nedsmelting av reaktorkjernen som følge av defekte kjølesystem etter tsunamien som rammet store deler av Japans østkyst. 164 000 personer ble evakuert. Forfatteren har forstått det slik at det ikke kan tilskrives et signifikant antall ekstra dødsfall på grunn av økt stråledose i befolkningen som følge av denne ulykken, og det stilles spørsmål om hvorvidt en så omfattende evakuering var nødvendig.

Det framgår i ref. [19] at de samlede radioaktive utslippene fra kjernefysiske bombeprøver gjennomført på 1960-tallet har vært omrent 50 ganger større enn fra ovennevnte ulykker. I Norge er det spesielt de sovjetiske bombeprøvene på øygruppen Novaja Zemlja som har gitt radioaktive nedfall og dosebelastning, spesielt i reindriftsområder i nord (se [19]).

Radon

Radon har tradisjonelt blitt regnet som den største kilden til stråledose i befolkningen. Men det kan man sette spørsmåltegn ved. Edelgassen radon er en del av den naturlige Uran-serien, og siver ut av mange bergarter. Elementet har en halveringstid på 3,8 dager og henfaller ved α -henfall. Det henfaller til en serie kortlivede elementer som også sender ut α -partikler. Det er spesielt disse metalliske radon-døtrene som kan klebe seg til støvpartikler som pustes inn og blir sittende fast i lungevevet. Dermed får man alfa-henfall der. I moderne hus har man en typisk konsentrasjon av radon på 50 Bq per kubikkmeter luft.

Ved bruk av data om lungekreft fra arbeidere i gruver med svært høy radonkonsentrasjon (kanske noen tusen Bq pr. kubikkmeter) har man kommet fram til at folk i snitt belastes med rundt 3 mSv per år på grunn av radon. For å komme fram til dette har man regnet baklengs og brukt antall lungekrefttilfelle til å anslå dosebelastning, - så vidt vites fins det ingen direkte beregning som anslår hvor og hvordan α -partiklene avsetter energien i lungene.

Senere har man gjort mange direkte studier for å finne korrelasjoner mellom lungekreft og radonkonsentrasjon i hus. Man har funnet at faren for lungekreft ved eksponering til radon er langt lavere for ikke-røykere enn røykere, og deltakere i undersøkelsene er klassifisert i to kategorier, røyrrere og ikke-røykere. For å finne positive korrelasjonseffekter for ikke-røykere har man måttet kombinere mange undersøkelser (for eksempel fra mange land i Europa). Resultatet av alt dette er at anslaget for kreftrisiko for ikke-røykere må deles på 25 sammenlignet med de tidligere anslag [21]. Da blir altså gjennomsnittsbidraget til årsdose for ikke-røykere på rundt 0,15 mSv. Om man er vanerøyker, så stemmer imidlertid de tidlige anslagene ganske godt med det man fant for gruvearbeidere i sin tid, så blant disse er faktisk radon den største kilden til radioaktiv dose.

9.7.3 Kreftbehandling / Store doser

Ioniserende stråling er mye brukt i kreftbehandling. Det kan synes merkelig at en mekanisme som kan indusére kreft også kan benyttes til å kurére det. Men strålingen kan altså ødelegge kreftceller. Ofte benyttes γ -stråling. Dosene som benyttes er som regel flere titalls Gy (opp til 40 Gy). I tilfelle med dyptliggende svulster vil strålingen også skade friskt vev. For å unngå dette i størst mulig grad vil man gjerne sende strålingen fra flere vinkler, slik at selve svulsten får høyere dose enn omkringliggende vev. Man leverer ikke hele dosen med kun en behandling. Istedenfor fraksjonerer man den ut over flere

behandlinger. Dette vil gi de friske cellene mulighet til å reparere seg selv, og pasienten vil tåle behandlingen bedre. Det er også svært viktig å unngå bestråling av kroppens vitale organer. Her kan sterk stråling gjøre mye mer skade enn i kroppens vev og muskler.

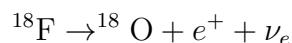
Strålebehandling kan også utføres med α og β -partikler fra radioaktive kjerner. Disse partiklene har kort rekkevidde i vann, og kan gi konsentrerte stråledoser. De må føres inn i kroppen på et eller annet vis, f.eks. gjennom injeksjoner. Om man kjenner stoffenes kjemiske egenskaper kan man forutsi hvor i kroppen de vil samle seg, og dosen kan avgis konsenterert. Et eksempel er Jod isotopen I-131. Jod vil samle seg i skjoldbruskkjerteelen. Dersom man har en kreftsvulst her, vil strålingen fra betapartiklene leveres nettopp her.

9.7.4 Protonterapi

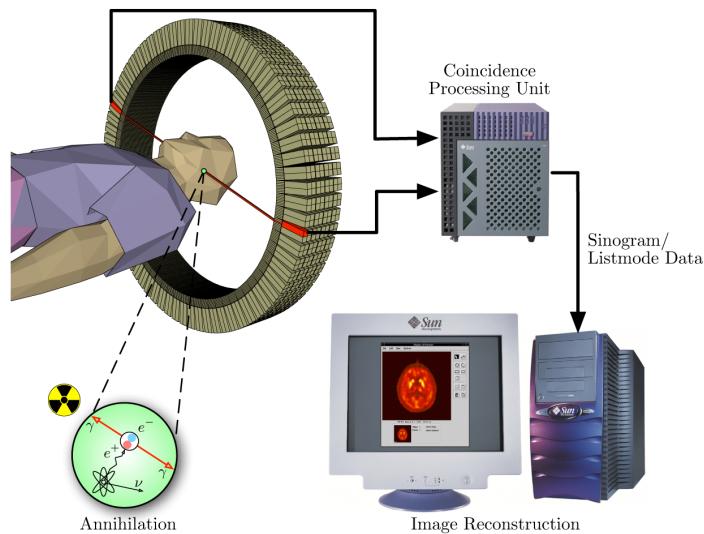
De siste årene har det kommet en ny form strålebehandling, med protoner. For gitt kinetisk energi oppfører protoner seg helt annerledes enn fotoner i vev. Vi ser fra fig. 9.12 at tunge, 'langsomme' partikler vil avsette det meste av sin energi over et svært lite område et godt stykke inne i kroppsvevet. Dette utnyttes i kreftbehandling. Man kan finjustere området der man leverer dosen ved å fininnstille energien på protonene, og begrense dose til områdene utenfor svulsten. To protonanlegg er nå under bygging i Norge. Det er svært dyre anlegg, for det kreves en større akslelerator for å gi nok kinetisk energi til protonene som skal benyttes i behandlingen. Det fins også anlegg som benytter karbon-12 kjerner. Her er bråstoppen i vevet (altså Bragg toppen) enda tydeligere.

9.7.5 PET - PositronEmisjonTomografi

Vi har forklart i seksjon 9.6.2 at det fins radioaktive stoffer som sender ut antimaterie, positroner. Et eksempelet er Fluor-18, i følgende henfall til den stabile isotopen Oksygen-18.



Med en gang positronet sendes ut i materie, vil det annihilere med et av elektronene. Alle energien konverteres til stråling, høyenergetisk γ -stråling. Bevaring av energi og bevegelsesmengde sørger for at annihilasjonen alltid er til minst to fotoner, i praksis bare til to fotoner. Annihilasjonen foregår når $e^+ - e^-$ systemet er i ro, og fotonene sendes hver sin vei med vinkel mellom dem på 180 grader. Energien til hvert foton er også fastlagt. Det to fotonene deler likt på hvileenergien til $e^+ - e^-$ paret, altså 511 keV hver. Dersom man



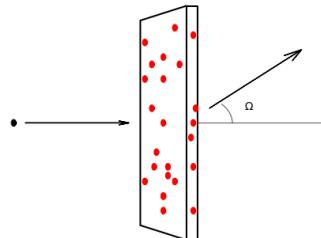
Figur 9.14: Prinsipp for PET-avbildning Fra Wikipedia

detektere begge fotonene så kan man si at β^+ -kilden befinner seg et sted på en linje trukket mellom de to deteksjonspunktene. Man kan sette et system av detektorer i ring rundt kilden og detektere mange slike fotonpar, slik det er antydet i fig. 9.14, og trekke mange slike linjer for å bestemme nøyaktig posisjon av positronkilden.

Dette er prinsippet for en PET-scanner som brukes for medisinsk avbildning av bløtvev: Man produserer en glukoselignende forbindelse som inneholder Fluor-18 og injiserer en væske med dette inn i kroppen. Sukkeret vil samle seg i kreftceller, og man kan dermed påvise kreftsvulster. Andre β^- -kilder kan også produseres, og bruke til andre avbildninger. PET kan også brukes sammen med CT (Computer Tomography) som er en avansert avbildningsmetode med røntgenstråling, for å få svært detaljerte avbildninger av indre organer. Fluor-18 har et halvliv på 109 minutter, og etter et døgn vil det ikke være igjen noe radioaktivitet i kroppen. Iflg. en artikkelen i Wikipedia om PET vil stråledosen etter et PET-skann være på 7 - 8 mSv. Dosen etter et PET-CT skann vil være et sted mellom 5 og 15 mSv. Det er store variasjoner avhengig av om man vil avbilde hele kroppen eller bare deler av den.⁴

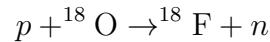
For å kunne ha en operativ PET-skanner, så må man kunne produsere isotoper med kort levetid. derfor vil et anlegg for PET-undersøkelser også

⁴Jeg må innrømme at jeg også spurte Chat-GPT om doser... Jeg fant ikke disse tallene på informasjons-sidene til helseforetakene.



Figur 9.15: Virkningstverrsnitt. Figuren viser en partikkel som spres på et target med en vinkel Ω spesifisert med polarvinkel θ og asimutalvinkel ϕ . Target består av kjerner (illustrert med røde prikker) som vi ønsker å studere med prosjektilet som skytes inn.

inneholde en relativt kraftig protonakselerator, en syklotron. Man beskyter vann som er anriket med Oksygen-18 for å indusere reaksjonen



Sensorene som lokaliserer fotonene kan være svært raske, og det arbeides med utvikling av sensorer som er så raske at man kan detektere forskjeller i gangtid til de to fotonene som treffer detektorsystemet. Dette vil kunne forbedre oppløsningsevnen til PET-instrumentene.

9.8 Induserte reaksjoner

9.8.1 Virkningstverrsnitt

En viktig størrelse i kjerne- og partikkelfysikken er *virkningstverrsnittet*. Dette er et mål for sannsynligheten for at en reaksjon skal skje i kollisjoner.

Anta at vi bombarderer en målskive (Engelsk: *target*) med areal A og tykkelse dx med N partikler eller kjerner. Intensiteten til strålen er $I = N/A$. Hvordan vil intensiteten minke? Vi betegner dette tallet med dI . Vi illustrerer situasjonen i figur 9.15. Antall partikler i skiva er $nAdx$ der n er antallet pr. volumenhet. Om hver partikkel har et tverrsnitt, σ , så dekker partiklene totalt en flate på $\sigma nAdx$, altså σndx pr. arealenhet (om dx er såpass liten at vi kan se bort fra partikler kan ligge bak hverandre). Sannsynligheten for

vekselvirkning er

$$P = \frac{dI}{I} = \frac{dN}{N} = \sigma n dx$$

Størrelsen σ kalles *virkningstverrsnittet* for reaksjonen. Det er ikke nødvendigvis lik det geometriske tverrsnittet til partiklene i skiva. Ofte oppstår forskjellige slutttilstander som vi ønsker å finne sannsynligheten separat, slik at det totale virkningstverrsnittet blir summen over disse

$$\sigma_{tot} = \sum_i \sigma_i$$

Når man bombarderer med kjerner som har utstrekning, vil virkningstverrsnittet automatisk gi den kombinerte effekten av prosjektilets og kjernens egenskaper.

For å finne antall partikler som har passert skiva uhindret, så merker vi oss at endringen av antallet er gitt som

$$dN = -\sigma n dx N$$

Dette gir tallet for overlevende partikler

$$N(x) = N_0 e^{-n\sigma x}$$

Da fysikere bombarderte diverse materiale for å finne atomkjerners utstrekning, så ble det konkludert at en typisk kjerne var 'Big as a barn' (stor som en låve). Virkningstverrsnitt er gjerne målt i *barn* (*b*) definert som

$$1b = 10^{-28} m^2 \quad (9.15)$$

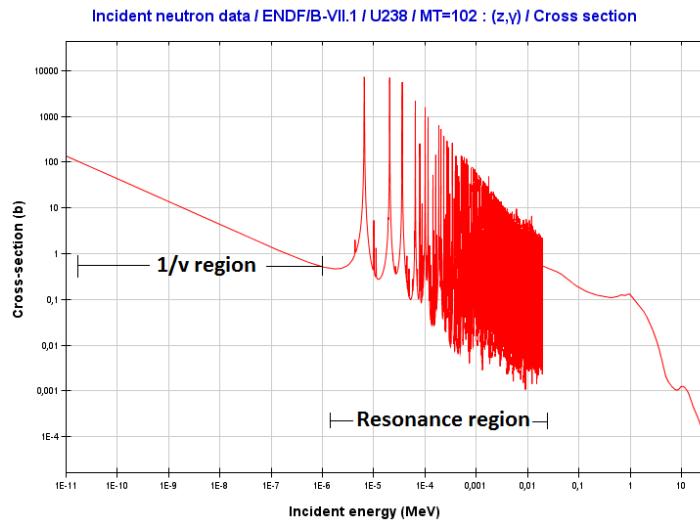
Størrelsen

$$\lambda = 1/(n\sigma) \quad (9.16)$$

kalles *absorbsjonslengde* eller *attenueringslengde*, og gir lengden av en type materiale som skal til for at intensiteten til en innkommende stråle skal reduseres til $1/e$ av det opprinnelige. Ofte oppgis attenueringslengde i antall atomer pr. kvadratcentimeter. Da deler man på antallstetthet (pr. kubikkcentimeter) for å få absorbsjonslengden i cm. I figur 2 gjengis virkningstverrsnittet for nøytronabsorbsjon av U-238 for reaksjonen



I kortform skrives dette ${}^{238}U(n, \gamma){}^{239}U$. Vi ser her at virkningstverrsnittet har svært høye topper ved bestemte nøytronenergier. Dette svarer til resonanser, eksisterte kortlivede tilstander som umiddelbart de-eksiterer ved



Figur 9.16: Fra <http://www.nuclear-power.net> som referer til: JANIS (Java-based Nuclear Data Information Software); The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library



Figur 9.17: For nøytroner er aluminium gjennomsiktig og vann ugjenomtrengelig! Her er bilde av en mokka-trakter i aluminium, fylt med vann nederst. Bildet er starten på en film som viser hvordan vannet beveger seg opp til den øvre beholderen når det kokes opp. <https://www.youtube.com/watch?v=VESMU7JfVHU> Filmen er laget av A. Kaestner ved PSI (Paul Scherrer Institut), Sveits

utsendelse av en γ -partikkelen.⁵ Nøytronenergiene ved resonans er lave, mellom 5 eV og 10 keV. Nøytroner ved disse energiene betegnes som 'termiske nøytroner'.

Dersom man gjorde en nøyaktig utmåling av virkningstverrsnittet rundt resonansenergene så ville man finne at resonansene ble bredere med økende energi, svarende til kortere levetid for de høyt eksitere resonansene. Virkningstverrsnittene, og dermed attenueringskoeffisienten, for nøytron-bombardemet varierer fra element til element, og også mellom isotoper av samme element. Spesielt så er virkningstverrsnittet høyt for en del lette elementer. Man kan bruke nøytronstråler som 'røntgen' - kamera, men bildene som framkommer vil være helt annerledes enn de man ser med vanlig lys.

Et vanlig røntgenbilde ville være mørkest der elektrontettheten er høyest, nemlig i de metalliske delene av bildet, mens det er altså verdien av virkningstverrsnittet kombinert med antallstetthet av kjernene som avgjør hva som absorberer flest nøytroner. Fig. 9.17 viser hvordan nøytronbestråling kan benyttes til å se væske skjult i metallbeholdere. Rundt om i verden fins en del anlegg for bruk av nøytroner i materialundersøkelser. Da brukes en partikkelselvator for å bombardere et target med protoner, slik at store mengder nøytroner genereres. Et slikt anlegg er under bygging i Lund i Sverige gjennom et internasjonalt samarbeid (The European Spallation Source ESS). Se her også for en omtale av bruken av nøytroner:

https://www.youtube.com/watch?v=uF_3UmZzJ3I

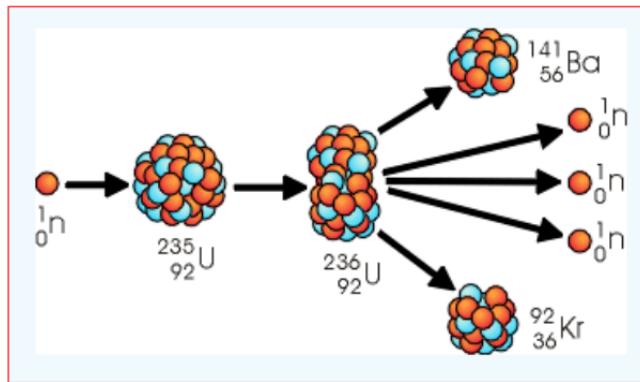
<https://www.youtube.com/watch?v=jhlZaWGFQZY>

Dessverre har denne effekten også vært benyttet til å utvikle nøytronbomber. Dette er små atombomber der formålet er at det skal sendes ut så mange nøytroner som mulig. Disse skal da trenge seg gjennom f.eks. stridsvogner og bestråle, og presumtivt drepe personell uten å forårsake for mye skade. Dette er i motsetning til større atombomber der det søkes å reflektere så mange nøytroner som mulig inn i bombematerialet for å lage så mange fisjoner som mulig. (man må legge til at selv 'små' atombomber har kolossal sprengkraft)

9.8.2 Fisjon

En isotop er *fissibel* dersom den kan deles i to omrent like store deler når den blir truffet av et 'termisk' nøytron, d.v.s. et nøytron med lav hastighet. Fisjon ble oppdaget i slutten av 1930-årene da Uran ble bombardert med nøytroner. Enrico Fermi fant at det ble produsert nye elementer. Det var den østerrikske fysikeren Lise Meitner som forklarte dette som en fisjonsprosess, etter å ha repetert forsøket i samarbeid med Otto Hahn. Meitner måtte flykte

⁵Grunntilstanden U-239 har en levetid på 23,45 minutter og henfaller ved β -henfall.



Figur 9.18: Visualisering av en fisjonsreaksjon (fra [19]). Nøytronet absorberes og kjernen blir svært ustabil, og fisjonerer som illustrert.

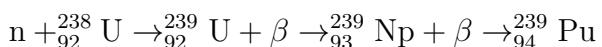
til Sverige (siden hun var jøde), og kunne heller ikke signere publikasjonen om funnet i 1939. Dermed ble det Hahn som fikk nobelprisen for oppdagelsen.

Fisjonsreaksjoner kan som sagt induseres ved bombardement av nøytroner. Virkningstverrsnittet er svært avhengig av energien til nøytronet, og høyest ved lave energier. Det dannes en svært kortlivet resonans før kjernen deler seg i to store deler og 2 til 4 nøytroner. Det er en viss asymmetri i massene til de to store delene, men det er en variasjon i de eksakte nukeontallene og antall frie nøytroner som produseres. Her er et typisk eksempel på en fisjonsreaksjon:



Se også fig. 9.18

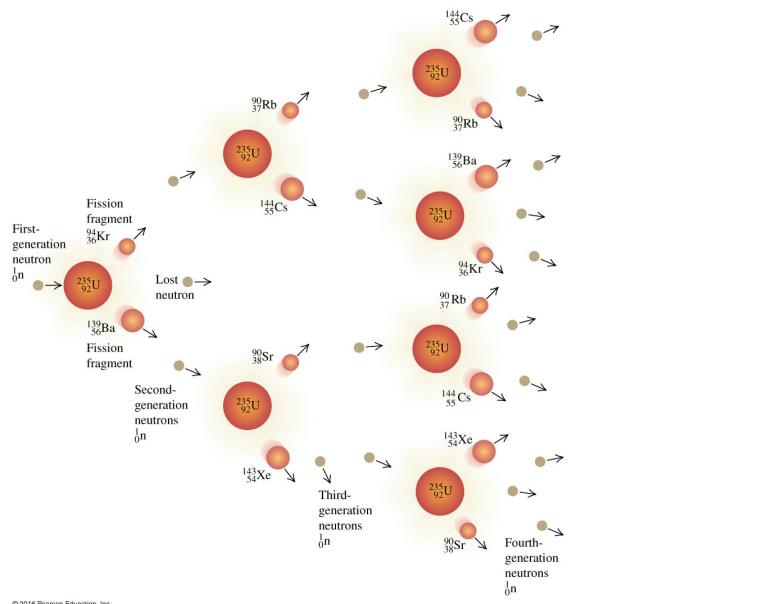
U-238 også kan fisionere om det blir truffet av et nøytron. Men av større viktighet er at det kan transformeres til Plutonium-239 på denne måten



(nøytrinoer er utelatt i ligningen). En isotop som kan føre til dannelsen av en fissil isotop kalles *fertil*. Man vil altså produsere den fissile isotopen Plutonium-239 i en fisjonsreaktor basert på U-238. Når Pu-239 bombarderes med nøytroner og fisionerer dannes det i snitt noe fler nøytroner enn i fisioner med U-235.

9.8.3 Kjedereaksjon og kritisk masse

I typiske fisjonsreaksjoner vil det altså genereres flere frie nøytroner. Om reaksjonen skjer inni et materiale med flere fissile kjerner så kan de produserte



Figur 9.19: Kjedreaksjon. Fra Young and Freedman

nøytronene treffe nye kjerner slik at antall kjerner som fisjonerer multipliseres opp. Og dette kan skje fort! Multiplikasjonsfaktoren må være større enn 1. Hver fisjon må generere mer enn 1 ny reaksjon. I fig. 9.19 ser vi eksempler på reaksjoner i en kjedreaksjon. Den midlere frie veilengden til nøytronene (ligning 9.16) i materialet må være kortere enn den midlere lengden ut til overflaten. Om denne er for liten vil prosessen dø ut. Vi sier at mengden materiale må være over *kritisk masse*. Det mest brukte fissible elementet er U-235, i alle fall i reaktorer og kjernekraftverk.

For å få kjedreaksjonen til å gå, så må man altså ha så høy tetthet som mulig av det fissible materialet. Er utgangspunktet naturlig uran, så må dette anrikes, man må skille ut U-235 og lage et materiale der en stor prosentdel består av denne isotopen. Kritisk masse for U-235 er rundt 60-70 kg. Siden tettheten er så høy, er dette ikke et veldig stort volum. I bomber benyttes også Pu-239. Kritisk masse for Pu-239 er en god del mindre, rundt 5-10 kg. Prinsippet for 'antenningen' av en kjernefysisk bombe er altså ganske enkelt: Bomben inneholder flere underkritiske deler som føres sammen til en klump med masse over kritisk masse.

Og la det være sagt: Alle kjernefysiske bomber har kolossal sprengkraft, enten de kalles 'taktiske', eller 'nøytronbomber' eller 'mindre'. De vi uansett være svært ødeleggende, og spre radioaktiv stråling over store områder.



Figur 9.20: Kjernebrensel som suvenir til å ha i lomma. (Plastinnkapslingen sørger for at alfa- og beta-stråling ikke slipper ut)

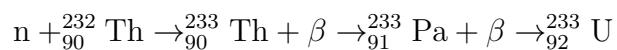
9.9 Kjernereaktor

9.9.1 Brenselet

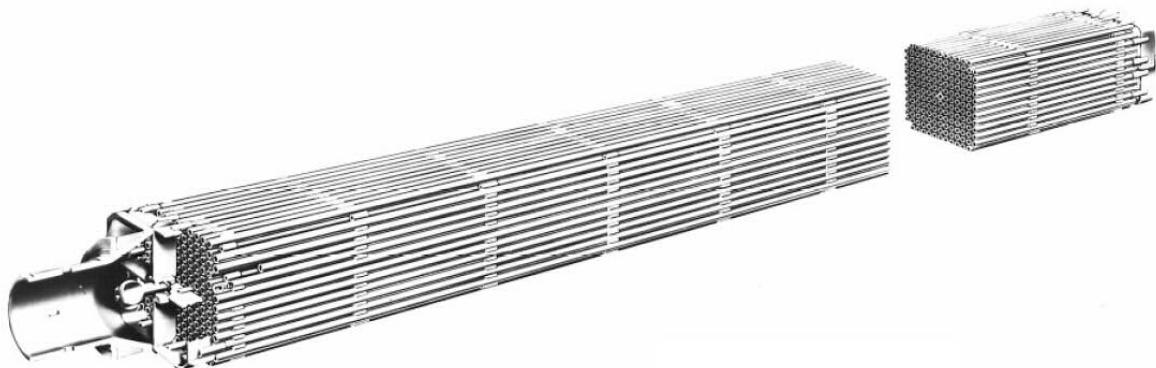
Naturlig uran forekommer som tre isotoper, U-238 (99,27%) med halveringstid på 4,5 milliarder år, U-235 (0,72%) med halveringstid på 0,7 milliarder år og små mengder U-234 med halveringstid på 240 tusen år. Konsentrasjonen av U-235 i det naturlig forekommende uranet er for liten til at det er mulig å få til en kjedereaksjon. Man må *anrike* uranet for å få konsentrasjonen opp til over 3% før det kan benyttes som brensel i kraftverk. Dette er en mye lavere anrikningsgrad en det som er nødvendig for bomber.

Kjernebrenselet kommer i sylinderiske UO_2 -pellets med et volum på omtrent 1 cm^3 . Kjernebrensel innkapslet i pleksiglass deles ut som souvernirer når man besøker et kjernekraftverk (se fig. 9.20). Dette kan man gjøre fordi aktiviteten til en slik pellet er nokså liten, og rekkevidden av strålingen er så kort at den stoppes i pleksiglasset. Brenselet er typisk en matrise med lengre staver fylt med pellets. Figur 9.21 viser et arrangement av staver benyttet i en reaktor i et kjernekraftdrevet lasteskip bygd på 1950-tallet.

Thorium kan også benyttes som brensel. Det er s.k. *fertilt* slik som U-238. Når det bombarderes med nøytroner så kan følgende skje:



Det er isotopen U-233 som blir det fisjonerende brenselet. Det har vært utredet om kjernekraft basert på thorium burde bygges i Norge [22].

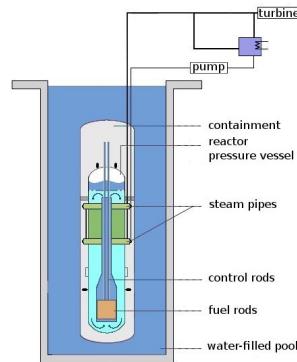


Figur 9.21: Brenselement i trykkvannsreaktor (PWR) Dette element var del av reaktorsystemet til laste- og passasjerskipet NS Savannah. Den sylinderformede reaktoren hadde en total høyde på ca 15 meter, og en diameter på omtrent 4 meter. Effekten var 74 MW. Designed and built by the Babcock & Wilcox Company. (Fra Wikipewdia)

9.9.2 Styring og kjøling av reaktoren

I fisjonsprosessen har de utsendte nøytronene forholdsvis høy energi (noen talls MeV). Da er virkningstverrsnittet for fisjon forholdsvis lav (se fig. 9.16) I reaktoren i et kraftverk har man en *moderator* som bremser nøytronene ned til termisk hastighet, der virkningstverrsnittet for fisjon er økt med fler størrelsesordener sammenlignet med verdien ved de opprinnelige hastighetene. Med så høye virkningstverrsnitt oppnår man kritisk masse ved lave masser og anrikingsgrader. Kjølemediet i reaktoren benyttes vanligvis til utveksling av varme for å drive generatorer og produksere elektrisitet. I lettvannsreaktorer benyttes vanlig vann som både moderator og kjølemedium. Det settes ofte under trykk, og blir langt varmere enn kokepunktet ved atmosfæretrykk. Det høye trykket i denne reaktortypen (engelsk forkortelse PWR) representerer en potensiell fare dersom temeraturen skulle bli for høy. Det har lenge vært forsket på og utviklet alternative kjølemedier, for eksempel smeltet salt (NaCl). Disse opererer under langt lavere trykk, og eksplosjonsfaren skal være eliminert.

Moderatorene vil også absorbere og stoppe nøytronene, slik at antallet nøytroner som treffer brenselet reduseres. Men vanligvis benyttes egne kontrollstaver til dette. Disse senkes ned mellom brenselsstavene og regulerer antallet nøytroner som treffer brenselet, og dermed den utviklede effekten. Fig. 9.22 viser en svært skjematiske skisse over hvordan en reaktor er bygd opp. Resten av anlegget i et kjernekraft vil bestå av turbiner og generatorer



Figur 9.22: Skjematisk oppbygging av en lettvannsreaktor (Wikipedia)

på samme måte som i andre varmekraftverk.

9.9.3 Fordeler og ulemper med kjernekraft

Vi skal her bare nevne et par fordeler og 'problemområder'. Om disse er større eller mindre enn for andre kraftkilder skal vi ikke diskutere her.

Den mest åpenbare fordelen sammelignet med andre varmekraftverk er at brenselet ikke slipper ut klimagasser. Videre er brenselet svært kompakt, volumet er et sted mellom en milliondel og en hundretusendel av volumet til konvensjonelt brensel. Dette er en følge av at utløst energi pr. fisjon er av størrelsesorden 100 MeV, mens det tilsvarende tallet for kjemiske reaksjoner (som oksydering ved brenning) er i området elektronvolt.

Av ulemper må nevnes fare for nedsmelting dersom tilførsel av kjøling uteblir. Det er ikke nok å stenge ned kraftproduksjonen, for de radioaktive prosessene (som henfall) vil pågå i lang tid etter nedstengning, med betydelig varmeutvikling. Fravær av kjøling vil gi overoppheting og nedsmelting. Eksplosjonsfare, slik som i Tsjernobyl må man nesten anse som så godt som umulig i rimelig moderne anlegg, og også i gamle 'vestlige' reaktordesign. Ulykken var dessuten en følge av et eksperiment der reaktoren ble kjørt på en helt annen måte enn ved vanlig kraftproduksjon, og under tildels inkompotent toppledelse⁶.

Det radioaktive avfallet er også et problem på grunn av sin høye radioaktivitet over lang tid. I tillegg til strålingen genereres det i begynnelsen også betydelige mengder varme som må håndteres de første årene etter bruk. Dette avfallet er stort sett i fast form. En del av avfallet blir også gjenvunnet til

⁶Inkompetansen framkommer tydelig i miniserien 'Chernobyl' produsert av HBO

gjenbruk som brensel, men det er vel her man også utvinner bombematerialet Pu-239. Når det gjelder gjenbruk, så forskes det fortsatt på reaktortyper som kan benytte mer av avfallet fra de nåværende reaktorene i nye kraftverk. Sluttlagring består i innkapsling og nedgraving. Igjen er det en volumfaktor som gjør dette relativt håndterbart om man sammenligner med volumene av aske og CO₂ ved konvensjonell forbrenning. Aske og svovelforbindelser er godt håndtert i moderne konvensjonelle varmekraftverk. For eksempel er ikke 'sur nedbør' og etterfølgende skogsdød og forsuring av elver og sjøer lengre et problem. Imidlertid gjenstår CO₂, som fortsatt sendes ut i atmosfæren i store mengder.

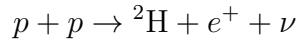
9.10 Elementenes opprinnelse - Kjernefysiske prosesser i stjerner

Som kjent er sola et varmt sted. Overflaten har en temperatur på omtrent 5700 K. Men de indre deler av sola har en temperatur på omtrent $1,5 \times 10^7$ K. Her kan fusjonsreaksjoner foregå.

9.10.1 Prosesser i sola

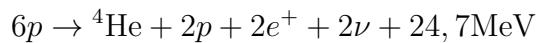
Proton-proton syklusen

Når det er nok energi så kan man få til reaksjonen som lager deuterium av to protoner.



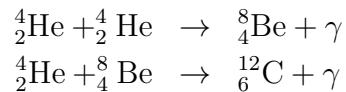
For at de to protonene skal komme rimelig nær hverandre (ca. 1 fm), så må energien i kollisjonene være ca 1 MeV. En temperatur på 10^7 K tilsvarer en midlere energi på bare 1 keV. Så hvordan er reaksjonen mulig? For det første, så har energifordelingen en hale mot høye energier, men den viktigste grunnen er tunnelleffekten. Det er en viss sannsynlighet for den ene protonet å tunnelere inn i det andre, og bli der lenge nok i en energitilstand som gjør at til at det henfaller til et nøytron ved β^+ henfall, slik at et deuteron lages. Virkningstverrsnittet for noe slikt er svært lite, og så vidt vites er det ikke målt i eksperimenter. Det er likevel stort nok til at reaksjonen inntreffer 10^{38} ganger i sekundet inni sola. Dette må til for å forklare at effekten i solstrålingen er på 4×10^{26} W.

Etter dette vil et nytt proton treffe deuteriumkjernen, og lage Helium-3. Deretter vil to He-3 kjerner fusjonere til He-4 + to protoner. Nettoreaksjonen er dermed



Trippel- α reaksjonen

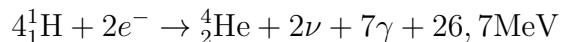
Astrofysikeren Fred Hoyle foreslo at følgende reaksjon skjedde for at tингre elementer kunne dannes:



Men verken han eller andre fysikere trodde riktig på det, fordi man mente at hyppigheten til den nederste reaksjonen ville være alt for liten. Hoyle måtte lage en tilleggshypotese - at det var en eller annen form for resonanseffekt som gav stort virkningstverrsnitt. Etterhvert fikk man målt virkningstverrsnittet for reaksjonene, og det viste seg at en sterk resonans er til stede!

9.10.2 Prosesser i tyngre stjerner og supernovaeksplsjoner

I tyngre stjerner har vi høyere temperaturer enn i sola, og i stjerner som er over omrent 1,5 solmasser andre fusjonsprosesser inntraffe. Med karbon tilstede er det en klasse med reaksjoner som har denne (eller lignende) nettoeffekt:



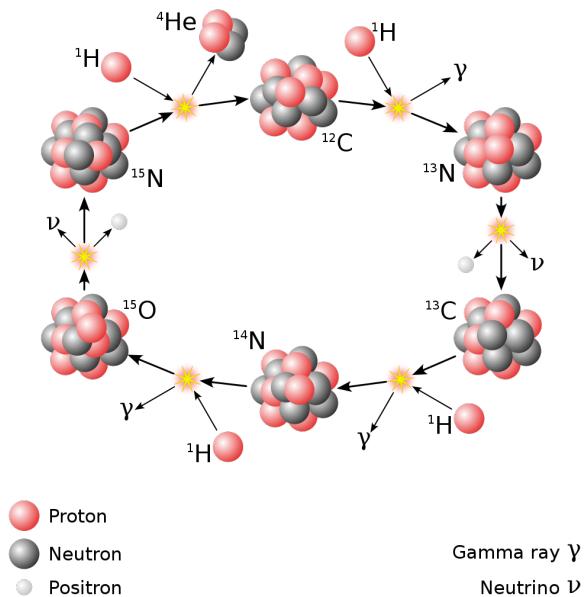
For at dette skal inntraffe må det være karbon tilstede, som katalysator, og det dannes også nitrogen og oksygen. Dette kalles for CNO-syklen. Se fig. 9.23. Enda tyngre elementer lages når stjerner eksploderer til røde kjemper eller til supernovaer, se fig. 9.24. I tillegg D er det periodiske system satt opp med informasjon om hvor elementene er dannet.

9.11 Oppgaver

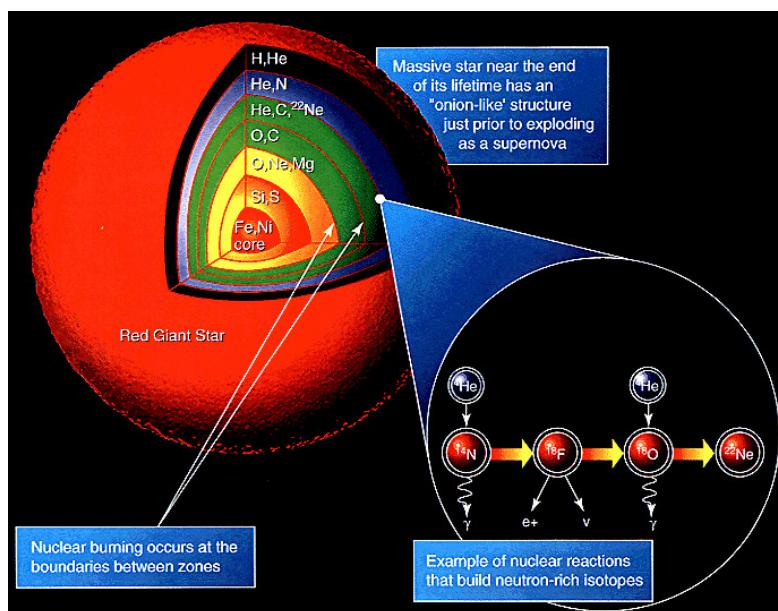
For å finne atomære masser og informasjon om henfallsmodi kan man f.eks. slå opp i Wikipedia. For eksempel:

https://en.wikipedia.org/wiki/Isotopes_of_carbon

1. Hvor mange nøytroner er det i kjernen Pb-208?
2. Beregn radien til en oksygenkjerne (O-16) og en blykjerne (Pb-208)
3. Beregn total bindingsenergi og bindingsenergi pr. nukleon for He-4,O-16 og Pb-208

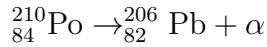


Figur 9.23: Karbon-nitrogen-oksxygen prosessen. (fra Wikipedia)

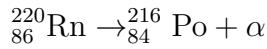


Figur 9.24: Fra Wikipedia

4. Forklar hvorfor det er flere nøytroner enn protoner i tyngre kjerner.
5. Beregn massedefekt og bindingsenergi til U-238.
6. Man kunne tenkt seg at C-12 er bygd opp av tre α -partikler. Hva ville bindingsenergien være i denne modellen? Sammenlign med den konvensjonelle bindingsenergien.
7. I en MR maskin induserers spinnflipp i protoner ved å sende inn et fotonsignal med frekvens 23,5 MHz. Beregn verdien av magnetfeltet i maskinen.
8. Kjernene $^{11}_6\text{B}$ og $^{11}_5\text{C}$ kalles speilkjerner fordi de har samme nukleon-tall(A) , mens Z og N til C-11 fås ved ombytte av disse tallene i B-11. Beregn bindingsenergi i de to kjernene. Hvilken bindingsenergi er størst? Gi en kommentar på hvorfor de to bindingsenergiene er forskjellige.
9. Hvorfor tror du tunge kjerner som sender ut α eller β partikler ikke sender ut enkeltprotoner eller nøytroner?
10. Beregn Q-verdi i henfallet $n \rightarrow p + \beta^- + \bar{\nu}_e$
11. Hvorfor er β^+ henfall mulig for en ^{12}N kjerne men ikke for et proton?
12. Beregn aktiviteten til en brenselpellet av urandioksyd som avbildet i fig. 9.20. Anta at det er 95% U-238 og 5% U-235 og at volumet er 1 cm^3 og at tettheten er 11 g/cm^3 . (Ikke ta med aktiviteten til datterkjerner) U-238 har et halvliv på $4,5 \times 10^9$ år, og U-235 har et halvliv på $7,0 \times 10^8$ år.
13. Finn Q-verdi i henfallene



og



14. Iflg. [9] kan sammehengen mellom henfallskonstant og α -energi tilnærmet skrives

$$\log_{10} \lambda = K - 1,72Z/\sqrt{E}$$

Her er E alfaenergien i MeV.

- a) Rn-220 har en halveringstid på 52 sekunder. Hva er verdien av henfallskonstanten λ ?

- b) Finn verdien av konstanten K ved bruk av levetiden til Rn-220 og Q-verdien som funnet i forrige oppgave.
- c) Gi en forutsigelse av levetiden til Po-210.
15. En banan inneholder typisk 4500 Bq K-40.
- Beregn Q-verdi i henfallet ${}^{40}\text{K} \rightarrow {}^{40}\text{Ca} + \beta + \bar{\nu}_e$
 - Beregn årsdose på grunn av radioaktiviteten for en person som spiser en banan hver dag.
 - Beregn også dose ved inntak av én banan. Biologisk halveringstid er 8 dager for kalium.
16. I behandling av prostatakreft implanteres 'frø' med Palladium-103 i prostata. Palladium-103 (${}_{46}^{103}\text{Pd}$) henfaller ved elektroninnfanging til Rhodium (${}_{45}^{103}\text{Rh}$). Da sendes det ut røntgenstråling med energi 21 keV. Halvlivet er 17 dager. Dosen som skal til for å kurere kreften er 100 Gy.
- Hvor mye Palladium-103 skal til for at en slik dose skal leveres? Gjør følgende antakelser (forfatteren vet ikke om de er realistiske....) Masse på bestrålt område: 300 gram. Andel av den utsendte energien som absorberes i dette området: 5%.
 - Beregn aktiviteten til denne mengden Pa-103 på tidspunktet det blir implantert.

Kapittel 10

Partikkelfysikk

Partikkelfysikk kan defineres som studiet av naturens minste byggestener, de uten kjent indre struktur, og kreftene mellom dem. I løpet av de siste 50 år har det blitt etablert en svært vellykket teori for dette, omtalt som *Standardmodellen*, der de fundamentale byggestenene er kvarker og leptoner. Formålet med disse sidene er å gi et lite innblikk i Standardmodellen og noen av dens konsekvenser for systemer av partikler som hensiktsmessig kan beskrives ved hjelp av denne. Boka Particle Physics” av Martin og Shaw [23] tar et lignende utgangspunkt, og har vært til stor nytte i framstillingen som gis her.

Historien om Standardmodellen begynner lenge før partikkelfysikk var etablert som fag. Et passende utgangspunkt kan være Einstein's forklaring av den fotoelektriske effekt i 1905, sammen med de Broglie's forslag om at partikler med masse også beveget seg som bølgepakker. Dette resulterte ikke bare i Schrödingerligningen og oppfinnelsen av kvantemekanikk, men også i utviklingen av relativistisk kvantemekanikk og kuantefeltteori, som vi skal se er basis for Standardmodellen.

Schrödingerligningen for en fri partikkelen er gitt som

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \quad (10.1)$$

og har løsning

$$\Psi(\vec{r}, t) = N e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} \quad (10.2)$$

Her er p partikkelenes bevegelsesmengde mens N er en normaliseringskonstant. Løsningen svarer til en bølge med bølgelengde $\lambda = h/p$.

Schrödingerligningen er ikke i samsvar med relativitetsteorien. Ikke-relativistisk er relasjonen mellom bevegelsesmengde og energi gitt som

$$E = p^2/2m$$

I relativitetsteorien har vi imidlertid

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2 \quad (10.3)$$

altså

$$E = \pm \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}$$

Bølgefunksjonen (2), med relasjon (3) innsatt, er løsninger av

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \Psi + (mc^2)^2 \Psi \quad (10.4)$$

Dette er *Klein-Gordon ligningen* for en fri partikkelen, og ble visstnok diskutert av de Broglie allerede i 1924. Den negative løsningen er i strid med den lavest mulige energien for partikkelen, nemlig hvile-energien. Skal løsninger med negativ energi forkastes? Schrödinger skal ha forsøkt å ta utgangspunkt i denne ligningen før han postulerte sin egen ligning som for å forklare absorpsjonsspekteret til hydrogenatomet.

K-G ligningen kunne ikke være den rette for beskrivelsen av elektroner. En korrekt beskrivelse skal kunne håndtere elektronenes halvtallige spinn i tillegg til å være konsistent med relativitetsteorien. Det er heller ikke mulig med sannsynlighetsbevaring siden den er av annen orden i tiden. En beskrivelse av fermioner er dermed utelukket, men bosoner kan beskrives, siden disse kan skapes og forsvinne.

Hvordan skal vi beskrive partiklene når de befinner seg i et elektromagnetisk felt? I Schrödingerligningen, i den form vi er vant til å se den, ignorerer vi magnetiske effekter, og benytter bare inn det statiske potensialet definert gjennom $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$ (der \vec{E} typisk er Coulombfeltet) for den potensielle energi. En korrekt behandling nødvendiggjør korrekt bruk av *vektorpotensialet* (gjerne betegnet med $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$) i Schrödingerligningen.

Wolfgang Pauli inkluderte de to mulige spinn-komponentene som *spinorer* i Schrödinger-ligningen. Sammen med bruk av vektorpotensialet var dette svært vellykket for det gav nær riktig verdi for elektronets anomale magnetiske moment som ble forutsagt å være nøyaktig $g = 2$ (se ligning 4.27). Den naive forventingen ved å legge til spinn-bane kobling i Schrödingerligningen var $g = 1$.

Det var Dirac som, i 1928, tok med seg alt dette og kom med en ligning som gav en beskrivelse av elektroner med spinn=1/2, og som er konsistent med både sannsynlighetsbevaring og relativitetsteori. Han skrev ned en ligning som var lineær i både tid og rom:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar c \sum_{i=1}^4 \alpha_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} + \beta mc^2 \Psi$$

Den tidsuavhengige delen er,

$$i\hbar c \sum_{i=1}^4 \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \beta mc^2 \psi = E\psi$$

og vi vil ha $E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2$ (med $\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$) Dette er mulig når α og β er 4x4 matriser! For at den relativistiske sammenhengen mellom energi og bevegelsesmengde skulle være oppfylt, så var det altså nødvendig å innføre to tilstander til, slik at bølgefunksjoner som tilfredsstiller Dirac-ligningen har **fire komponenter**. To av komponentene representerer løsninger med negativ energi, noe som var uungåelige, gitt den kvadratiske relasjonen mellom energi og bevegelsesmengde (lign. 3). Schrödingerligningen er lineær i tiden og kvadratisk i impulseratorene. Klein Gordon ligningen er kvadratisk i både tid og rom. Dirac-ligningen derimot, er lineær både i rom og tid! Bølgefunksjonene blir dermed vektorer som har fire komponenter. Løsningene uten potensial er plane bølger (de samme som ligning 3.7) to av dem (en for hver spinnkomponent) med positiv energi (bare en romlig dimensjon er skrevet ut nedenfor):

$$\Psi_i(x, t) = u_i e^{i(px-Et)/\hbar} = u_i e^{ipx/\hbar} e^{-iEt/\hbar}$$

og to med bevegelsesmengde den andre veien, men med negativ energi

$$\Psi_i(x, t) = v_i e^{-ipx/\hbar} e^{iEt/\hbar}$$

For å gjøre en lang historie kort: Løsningene med negativ bevegelsesmengde og energi kan ses på som bølger med positiv energi som beveger seg bakover i tid. Fortolkningen av dette er isteden at dette representerer antipartikler som beveger seg framover i tid. Det viste seg at Dirac hadde forutsagt eksistensen av antimaterie!

Dirac-ligningen forutsier også $g = 2$. Eksperimentelt er g målt med stor presisjon, og funnet til å være $g = 2,002319$ når man bare tar med de 6 første siffer etter komma. Beregninger innenfor kvantefelt-teori fører til teoretiske korrekSJONER til tallet $g = 2$. Disse er beregnet med en presisjon på 12 desimaler! Eksperimentelle målinger har omrent samme presisjon. Det diskuteres om det er full overenstemmelse, eller om det er avvik mellom teori og eksperiment i siste siffer!

10.1 Prosesser og bevaringslover

De mest fundamentale byggestenene i naturen er *kvarker* og *leptoner*. Tabell finnes sist i dette kompendiet. Verktøyet vi har til rådighet for å forstå

materiens oppbygning handler i stor grad om å studere kollisjoner mellom partiklene. I tillegg til at vi kan finne sannsynligheten for at en gitt hendelse (eller *event*) skal finne sted, altså *virkningstverrsnittet*¹, kan vi også produsere nye partikler i reaksjonene.

I studiet av prosessene, for eksempel følgende to:



har man funnet fram til tre typer krefter, eller *vekselvirkninger* i tillegg til gravitasjon, nemlig *sterke*, *svake* og *elektromagnetiske*, og en del bevarings-lover som gjelder under visse forutsetninger:

- Ladningsbevaring: Summen av de elektriske ladningene før reaksjonen er lik summen av ladninger etterpå.
- Bevaring av leptontall: Hvert lepton (f.eks. elektronet og nøytrinoet, ν_e) tilordnes et tall $+1$, mens hvert antilepton (f.eks. positronet og antinøytrinoet $\bar{\nu}_e$) tilordnes et tall -1 . Summen av leptontallene er bevart i reaksjoner.
- Bevaring av baryontall: Baryoner består av tre kvarker. Hver kvark, uansett type, tilordnes et baryontall $B = 1/3$. Hver antikvark tilordnes et baryontall $B = -1/3$. Dermed er baryontallet til et proton gitt som $B_p = 1$ mens baryontallet til anti-protonet blir $B_{\bar{p}} = -1$.

Kommentarer og eksempler:

1. Ladningsbevaring gjelder alltid.
2. Eksempel på en reaksjon med lepton og baryontallsbevaring er β -henfall:



3. Etter å ha funnet tyngre leptoner, (μ^-, ν_μ) og (τ^-, ν_τ) så har man innført egne leptontall for disse, slik at det fins tre leptontall, L_e , L_μ og L_τ som er bevart separat².
4. Baryontallsbevaring gjelder alltid. Men man har innført eget kvantetall for hver av de fire kvarktypene s, c, b og t . Disse kvantetallene er bevart i sterke og elektromagnetiske vekselvirkninger, men kan brytes i svake vekselvirkninger. I hovedsak finner produksjon av nye partikler i kollisjoner sted gjennom sterke eller elektromagnetiske vekselvirkninger.

¹Virkningstverrsnitt er gjennomgått som del av pensum i kjernefysikk (seksjon 9.8.1).

²Nyere resultater viser at dette utsagnet må modifiseres for nøytrinoer

Dermed skapes gjerne de tyngre kvarkene alltid som et kvark-antikvark par (f.eks. $c\bar{c}$), mens partiklene som dannes må henfalle gjennom svake vekselvirkninger som bryter bevaring av kvarktype.

Om disse lovene ikke er brutt, så kan man konkludere at elektronet og protonet (det letteste baryonet) er absolutt stabile partikler som ikke brytes videre ned.

10.2 Vekselvirkninger og kvantefelt-teori

Som kjent kan de elektromagnetiske feltene manifestere seg som lys, og det var naturlig å spekulere på konsekvensene av at lys kunne beskrives som partikler. I tillegg til eksistensen av lyspartikler, så hadde Einstein's forslag også den konsekvensen at lyspartiklene kunne forsvinne og overlate all sin energi til et absorberende elektron. Da bør lyspartikler også kunne skapes, og metoder for å kvantisere det elektromagnetiske feltet ble utviklet, et arbeid som førte til teorien QED, KvanteteElektroDynamikk.

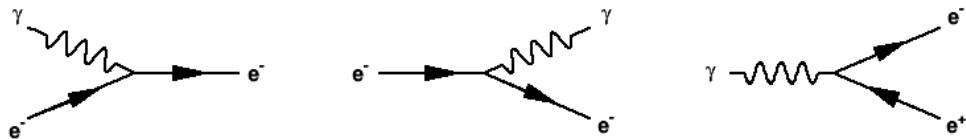
Utgangspunktet var Dirac-ligningen. Man ønsket altså å finne en teori der det elektromagnetiske feltet er lyskvanter som kan skapes og forsvinne, og som var konsistent med kvantemekanikk og relativitetsteori. Teorien tar utgangspunkt i at vekselvirkingene i prosessene kan beskrives ved hjelp av tilnærminger, i en form for rekkeutvikling av effektene. Mange bidro til utviklingen av QED. Richard Feynman var en av bidragsyterne til denne kompliserte teorien, men står i en særstilling med sin diagramteknikk for å visualisere den matematiske perturbasjonsteorien.

En matematisk innføring i QED ligger langt utenfor det vi ønsker å omhandle i denne boka. Imidlertid gir Feynmandiagrammene en mulighet for en visuell forklaring. Dette er spesielt relevant siden teorien for de forskjellige kreftene mellom elementærpartiklene som nå er etablert, *alle er feltteorier, der prosessene kan visualiseres med Feynmandiagrammer* (Vi ser her bort ifra gravitasjon, der man ennå er på jakt etter den riktige teorien som har gravitoner som feltkvanter).

10.2.1 Feynmandiagrammer

Feynmandiagrammene viser tidsutviklingen av bølgefunksjoner som tilfredsstiller Dirac-ligningen når de vekselvirker med kvantiserte felt. Det er viktig å merke seg at de representerer komplekse *amplituder*. I haltende analogi kan vi nevne kvantemekanisk spredning på en potensialbarriere i en dimensjon, dersom barrieren ses på som en partikkel i ro. Der er situasjonen:

$$\psi_A(x, t) + V(x) \rightarrow B\Psi_B(x, t) + C\Psi_C(x, t)$$



Figur 10.1: Feynman-diagram a) Fotoabsorbsjon, b) Bremsestråling, c) Parproduksjon. **Tiden løper fra venstre mot høyre.** Linjene sier ingen ting om bevegelsesmengder og retninger, men bevaring av energi og bevegelsesmengde må være oppfylt. Vi skal se at dette nødvendigjør konseptet med *virtuelle* partikler

og vi antar gjerne at bølgefunksjonene er plane bølger. Feynmandiagrammet skal forstås som en visualisering av dette. For å få fram sannsynligheter og virkningstverrsnitt, så skal de relevante amplitudene summeres og kvadreres, akkurat som i endimensjonal kvantemekanisk spredning. De eksterne linjene representerer plane bølger (planbølgeløsninger av Dirac-ligningen), og pilene forteller om de beskriver en partikkel eller en antipartikkel.

Vi tar nå for oss de enkleste diagrammene. Noen av disse svarer til prosesser vi allerede har diskutert i kapittel 2. Til venstre i figur 10.1 vises diagrammet som svarer til den fotoelektriske effekt,

$$\gamma + e^- \rightarrow e^-$$

At elektronet er representert med en linje betyr bare at det eksisterer, og sier ingenting om hvorvidt det beveger seg eller ikke. Ved fotoabsorbsjon er det i ro i det absorberende materialet, mens fotonet har energi som det overfører til elektronet. Hvis vi snur litt på diagrammet, så får vi diagrammet for *bremsestråling*

$$e^- \rightarrow e^- + \gamma$$

(På engelsk bruker man det tyske ordet, Bremsstrahlung). Her skapes et foton, som følge av elektronets vekselvirkning med et elektromagnetisk felt, for eksempel i et fast stoff, der feltet som kollektivt settes opp i av elektronene i det relevante materialet.

Hvis vi snur litt til på diagrammet, så får vi isteden diagrammet for *pardannelse*,

$$\gamma \rightarrow e^+ + e^-$$

Her har fotonet skapt et elektron-positron par. Denne prosessen er mulig når fotonet har energi større enn to ganger hvilemassen til elektronet. Pilene

på linjene er slik at de peker *med* økende tid for partikler, og *mot* økende tid for antipartikler. I hvert møtepunkt (engelsk: Vertex), skal det være en inngående og en utgående pil. Dette uttrykker en bevaringslov:

- Elektroner og positroner tilordnes et leptontall på henholdsvis +1 og -1. I elektromagnetiske vekselvirkninger er summen av leptontallene bevart.

Møtepunktene representerer vekselvirkningene med feltet, og tilordnes en koblingskonstant med styrke som er definert av ladningen til elektronene. Elektronladningen er innført gjennom *finstrukturkonstanten*, α . Dette er en dimensjonsløs størrelse gitt som

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(\hbar c)} \approx \frac{1}{137} \quad (10.5)$$

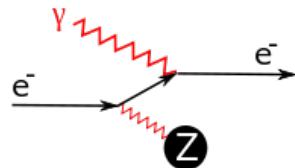
Hvert vertex svarer til ladningen til partikkelen som setter opp feltet, (som lager koblingen til fotonet). Verteksfaktoren blir til $e/\sqrt{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ på amplitudenivå. Legg merke til at den potensielle energi til et elektronet i hydrogenatomet er $V(r) = (\hbar c)\alpha/r$. Dette gjør det naturlig å bruke α i beskrivelsen av vekselvirkningen mellom to elementærladninger.

Amplituden skal altså kvadreres for å få fram sannsynligheter og virkningstverrsnitt, så man må multiplisere med en faktor α for hvert vertex. For andre ladninger må man multiplisere med ladningen i enheter av elementærladningen. Siden kvarkene har elektrisk ladning, så kan man erstatte elektroner med kvarker i figur 10.1. For eksempel: ladningen til en u -kvark er lik $(2/3)e$. Da blir sannsynligheten for prosessen proporsjonal med $(2/3)^2\alpha$.

Dessuten vil bevaring av bevegelsesmengde og energi ikke kunne være oppfylt i samtidig i prosessene slik de er representert i fig. 10.1. Men de skjer likevel når fotoner og elektroner befinner seg i elektriske felt fra atomer som kan absorbere den nødvendige bevegelsesmengde. Feynmandiagrammene for reelle prosesser må altså være noe mer kompliserte enn de vi ser i fig. 10.1. I faste stoffer er det elektriske felt satt opp av atomer, og tysk Wikipedia foreslår at Feynmandiagrammet for fotoabsorbsjon skal se ut slik som i figur 10.2.

10.2.2 Spredning og prosesser med to vertekspunkter

For at Feynmandiagrammene skal beskrive virkelige vekselvirkninger så må alltid minst to vertekspunkter være tilstede. Sentralt er eksperimenter der man får partikler til å kolidere med hverandre, enten ved å skyte partikler mot en passende skyteskive, et *target*, slik Rutherford gjorde, eller ved



Figur 10.2: Feynmandiagram for fotoelektrisk effekt, slik det må se ut for at alle bevaringslover skal være oppfylt. Den sorte boblen antyder vekselvirkning med en atomkjerner med effektiv ladning Z . Hentet fra tysk Wikipedia den 20/10 2016

å få partikelstråler til å kolidere med hverandre. Dette kalles spredningsforsøk. Man kan ha *elastisk spredning*, der partiklene overlever med bevart bevegelsesmengde og kinetisk energi:

$$a + b \rightarrow a + b$$

hvor $\vec{p}_a + \vec{p}_b = \vec{p}_a^* + \vec{p}_b^*$ eller *inelastisk spredning*, der energi overføres til andre deler av det spredende system, og partikler kan miste sin identitet.

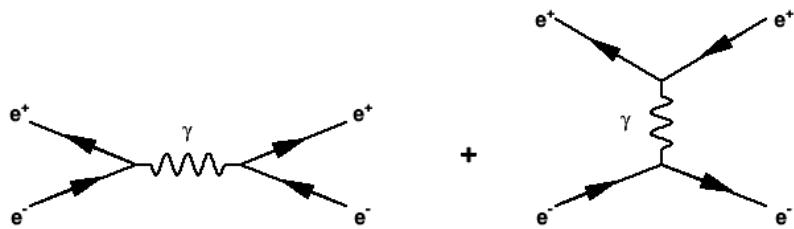
$$a + b \rightarrow c + d + X$$

Her kan det være slik at man ønsker å finne bestemte partikler, c og d , mens X er en samling partikler det ikke er nødvendig å identifisere. Figur 10.3 viser de to Feynman-diagrammene som bidrar til elastisk spredning mellom elektroner og positroner, noe som kalles Bhabha-spredning³. Virkningstverrsittet for prosessen er proporsjonal med α^2 ettersom to vertekspunkter bidrar med en faktor som er proporsjonal med ladningen til partiklene som møtes, altså med $\sqrt{\alpha}$. Spredningsamplituden skal kvadreres for å finne virkningstverrsnittet. Virkningstverrsnittet for en prosess kan skrives ned slik:

$$\sigma(a + b \rightarrow c + d) = K|M|^2 = KMM^* \quad (10.6)$$

Her er K en kinematisk faktor som avhenger av forhold som ikke kan representeres av Feynmandiagrammene. M er spredningsamplituden, som er en sum av delamplituder, der hver delamplitude er representert ved et Feynmandiagram. Akkurat som bølgefunktionsjoner, så er disse amplitudene komplekse, slik at interessante interferanseeffekter kan oppstå ved kvadrering. Når fotonet er

³Homi Bhabha. Indisk fysiker.



Figur 10.3: Feynman-diagram som bidrar til elastisk spredning mellom et elektron og et positron. a) Annihilasjon b) Fotonutveksling. For å finne virkningstverrsnitt for reaksjonen må man addere amplitudene og kvadrere resultatet.

kraftformidler på denne måten så kalles det en *propagator*. Man må kalle fotonet *virtuelt*, fordi vi må tilordne fotonet en virtuell masse (tilsvarende den invariante massen til systemet av utgående partikler) i det korte tidsrommet vekselvirkningen foregår. I diagrammet til venstre i fig. 10.3 må denne massen svare til den invariante massen til elektron-positron paret. For diagrammet til høyre svarer propagatoren til en overføring av bevegelsesmengde.

Fonet har spinn lik 1 (altså $S_\gamma^2 = J(J+1)\hbar^2$ med $J=1$). Spinn må være bevart i prosessen. Det gir føringer på hvordan spinnkomponentene til elektronene kan kombineres. Vi må også nevne at beskrivelsen av Bhabha-spredning med bare disse to diagrammene er en tilnærming som tilsvarer en bestemt orden i en rekkeutvikling. Neste orden vil inneholde diagrammer med tre vertekspunkter. Siden hvert vertekspunkt medfører at bidrag skal multiplisieres med en faktor $1/137$ så kan man imidlertid regne med at presisjonen i beregningen av virkningstverrsnittet ligger på rundt 1%. Virkningstverrsnittet for Bhabha-spredning er beregnet til å være på formen

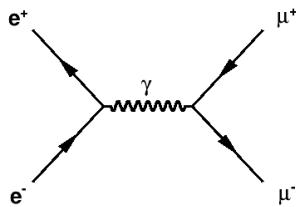
$$\sigma(e^+e^- \rightarrow e^+e^-) = (\hbar c)^2 \frac{\alpha^2}{16s} \quad (10.7)$$

der α er finstrukturkonstanten og $s = E_{cm}^2$, kvadratet av massesenterenergien i kollisjonene⁴. Faktoren α^2 er slik man må forvente i en prosess med to verteks ($e/\sqrt{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ for hvert vertex, og så skal amplituden kvadreres).

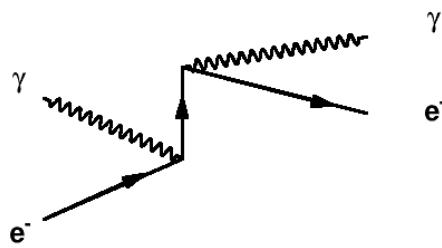
Annihilasjonsprosessen, fig. 10.3 a) har hatt stor betydning for partikkelfysikken, for man vil kunne produsere alle typer par av elementære fermioner så sant de har elektrisk ladning, dersom det er nok energi til stede. Figur 10.4 gir eksempel på Feynmandiagram.

Mye forskning har vært gjort i akseleratoranlegg som har levert elektron-positron kollisjoner, ved SLAC og Cornell i USA, ved DESY i Tyskland og

⁴Se seksjon 10.4 for definisjon av s



Figur 10.4: Feynman-diagram for produksjon av et par myoner gjennom elektron-positron annihilasjon. Alle fermioner, forutsatt at de har elektrisk ladning, kan produseres i par på denne måten, bare det er nok energi i annihilasjonen.



Figur 10.5: Feynman-diagram for Compton-spredning

ved CERN i Sveits for å nevne noen. (Anlegg har også vært bygd i Italia, Japan og Kina.)

Til slutt tar vi også med Feynmandiagrammet svarende til Compton-spredning i fig. 10.5, altså elastisk spredning mellom et foton og et elektron. Vi ser at det her også er to verteks-faktorer involvert.

10.2.3 Feltpartikler med hvilemasse

Dersom man ser på ligning 10.4 som en bølgeligning for feltpartikler assosiert med en potensiell energi, så får man resultater som gir god innsikt i hvordan potensialet forbundet med disse partiklene ser ut.

Med $m = 0$ i ligningen så fås en bølgeligning for en bølge som beveger seg med lyshastighet, altså noe som kunne passet for et foton. Men elektromagnetismen er ikke så enkel at dette blir en korrekt forklaring. Grunnen er at fotonet må tilordnes *spinn* for å være et brukbart feltkvant i elektromagnetiske vekselvirkninger. Imidlertid, om man ser på det statiske tilfellet,

altså $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0$ så får man tilbake Gauss' lov i form av Poisson's ligning

$$\nabla^2 V = 0$$

for områder i rommet der ladningstettheten er 0 (Husk Gauss lov: $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho/\epsilon_0$, med $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$). Denne ligningen gjelder for det elektriske potensialet satt opp av en punktladning, altså $V(r) = k/r$. (med $k = \frac{e}{4\pi\epsilon_0}$ for et elektrisk felt).

Det viser seg at om vi tar med masseleddet, slik at ligning 10.4 blir

$$\nabla^2 V(r) = \left(\frac{mc^2}{\hbar c}\right)^2 V(r)$$

så er løsningen gitt som

$$V(r) = \frac{e^{-\frac{mc^2}{\hbar c}r}}{r} \quad (10.8)$$

Dette kalles *Yukawapotensialet*, idet Yukawa var den som først foreslo et slikt potensial (satt opp av punktformede partikler med sterke 'ladning') for de sterke vekselvirkningene, der partikkelen med masse m tolkes som feltpartikkelen. Utgangspunktet var jo en bølgefunksjon for en partikkelen, og sannsynlighetsamplituden for denne avtar altså proporsjonalt med potensialfunksjonen. Fra ligning 10.8 ser vi at feltpartikkelen holder seg innenfor en karakteristisk radius rundt kilden tilfeltet, gitt som

$$r_0 = \frac{\hbar c}{mc^2}$$

Utvekslingen av massive feltpartikler kan foregå også når energiene involvert er lavere enn den som svarer til hvilemassen til feltpartikkelen. Da er det igjen snakk om utveksling av en *virtuell* partikkelen. Dette er ofte framstilt som at brudd på energibevaring faktisk er mulig innenfor et tidsrom som er lik det som er definert av usikkerhetsrelasjonen ($\Delta t = \hbar/(\Delta E)$ der ΔE den energien som mangler for at partikkelen kan skapes som reell partikkelen).

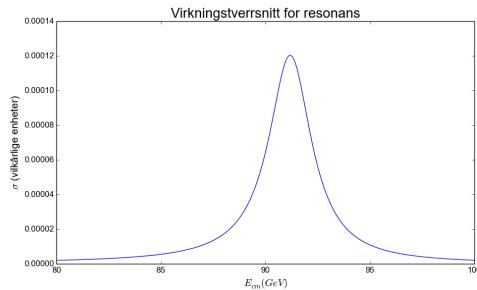
Yukawa foreslo i 1935 at formidleren av den sterke kjernekraften foregikk med utveksling av et slikt boson, med spinn=0. Ut fra rekkevidden til sterke vekselvirkninger forutsa han at massen burde være rundt $200\text{MeV}/c^2$. Man mente at pionene (π^+, π^0, π^-) funnet i 1947 var denne kraftformidleren, og man lærte mye av å beskrive kollisjoner mellom protoner og nøytroner ved utveksling av pioner (se fig. 10.6), for avstander større enn omtrent 1-2 fm. En må også bytte ut koblingskonstanten i hvert verteks med en konstant som passer for de sterke vekselvirkningene. Denne er mye større enn $1/137$, verdien er rundt 1. Det har vist seg at verken pioner eller nukleoner er elementærpartikler, så pionutveksling er ikke den fundamentale kraftformidleren for den



Figur 10.6: Feynman-diagram i Yukawas modell for sterke vekselvirkninger.
a) Ladnings-utveksling b) Utveksling av et nøytralt pion.

sterke kjernekraften. Men ideen om at de sterke vekselvirkninger også kan beskrives som en kvantefeltteori later til å være riktig. Denne beskrivelsen kalles QCD (Quantum ChromoDynamics), og beskriver den sterke kraften som vekselvirkning mellom kvarker ved utveksling av feltpartikler kalt *gluoner* (se seksjon 9). Kraften som holder nukleonene sammen i en kjerne må ses på som en effektiv kraft med opphav i QCD, på samme måte som at Van der Waalske bindinger, som har opphav i elektromagnetisme, forklarer at molekyler holdes sammen i væsker.

Vi skal ikke gå nærmere inn på den matematiske formen av propagatorene, men resultatet for en massiv feltpartikkelen er at man får resonanser slik vi diskuterte i kjernefysikken, nemlig virkningstverrsnitt som inneholder en Breit-Wigner funksjon med høyest verdi når energien er lik hvile-energien til feltpartikkelen (se fig. 10.7 og eget notat om resonanser). Dette resultatet kommer man også fram til dersom man studerer spredningen fra en tung kjerne som omgir seg med et Yukawapotensial.



Figur 10.7: Virkningstverrsnitt for en resonans (Breit-Wigner), uten korrektsjoner

10.2.4 Oppsummering om Feynmandiagrammer

- Feynmandiagrammer beskriver tidsutviklingen av bølgefunksjoner for to partikler som vekselvirker, eller for en partikkelen som henfaller til andre partikler. Diagrammene beskriver altså *amplituder* som må summéreres og kvadreres for at man skal finne sannsynligheter og virkningstverrsnitt. Prosessten framstilles symbolsk med tiden løpende langs den ene aksen (den horisontale aksen i dette notatet)
- De eksterne linjene representerer planbølgeløsninger av Dirac-ligningen, og pilene viser om de er løsninger for partikler eller antipartikler.
- Sannsynligheten for en prosess er proporsjonal med kvadratet av en *verteksfaktor* som angir *koblingsstyrken* eller ladningen på partikkelen som vekselvirker med en feltpartikkelen.
- Bevaringslover gjelder i verteks (ladning, spinn, energi..). Vi har også andre kvantetall, for eksempel leptontall som er bevart. Dette uttrykkes ved at hver leptonlinje (eller mer generelt, hver fermionlinje) utstyres med en pil. Pilens retning er *med* tiden for fermioner, og *mot* tiden for antifermioner. I hvert verteks kommer en pil inn, og en går ut.
- Vekselvirkningene beskrives med feltpartikler som kan skapes og absorberes. Disse formidler kraften mellom fermionene i form av *propagatorer* som formidler bevegelsesmengde og energi. Tar vi med muligheten for feltpartikler med masse, så gir propagatoren en (kompleks) faktor i amplituden omtrent av formen $1/(k^2 - (mc^2)^2)$ der k er overføring av energi eller bevegelsesmengde og m er massen til feltpartikkelen. Bemerk:
 - Dette gir resonanseffekter for $k = mc^2$ (i virkningstverrsnitt osv). Hvis feltpartikkelen i prosessen beskrevet i figur 10.4 har en masse m så blir virkningstverrsnittet proporsjonalt med *Breit-Wigner* kurven
$$\sigma(E_{cm}) = K \frac{1}{[E_{cm} - (mc^2)]^2 + \Gamma^2/4}$$

Her er Γ kalt *bredden* av resonansen (se seksjon 10.5). Dette er *hele* bredden, omtrent det dobbelte av standardavviket til fordelingsfunksjonen. Siden virkningstverrsnittet har dimensjon areal, så kunne vi godt skrevet $K = (\hbar c)^2 K'$ med K' dimensjonsløs.

 - Det er nødvendig å gi partiklene *virtuell* masse når energibehaving ellers ikke er mulig. Denne virtuelle massen eksisterer bare i et tids-

rom gitt ved Heisenbergs usikkerhetsrelasjon, $\Delta t = \hbar/(2\Delta E) = \hbar/\Gamma$

Det står litt mer om matematikken for beregning av Feynmandiagram i tillegget.

10.3 Fler bevaringslover

Det er tre viktige bevaringslover (eller *symmetrier*) vi fortsatt ikke har diskutert.

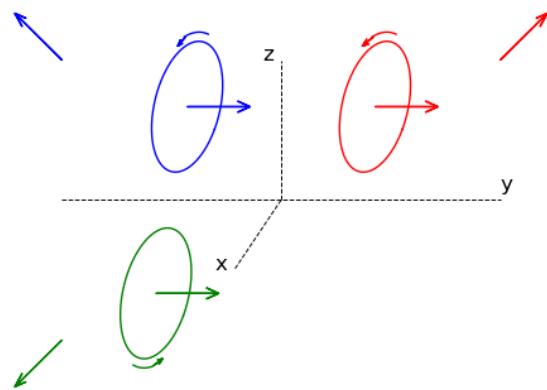
10.3.1 T - Tidsreversjon

Dette *har* vi vært inne på et par ganger: Prosesser skal kan kunne kjøres baklengs. Dette gjelder i klassisk fysikk, og er også utnyttet for å forstå at prosessen med emisjon og absorpsjon av fotoner egentlig er samme prosess, bortsett fra at tiden løper i motsatt vei (se seksjon 5.3.2). Og i dette kapittelet har vi sett at tidsreversjon spiller en viktig rolle i tolkningen av Feynmandiagrammene. Disse er de samme uansett hvordan man velger tidsaksen. Man kan formalisere begrepet ved å definere en operator, \hat{T} for tidsreversjon. Det er klart at om man reverserer tiden to ganger, så er vi tilbake til det opprinnelige ($\hat{T}^2 = 1$).

10.3.2 P - Paritet

Dette kalles også speilingsymmetri. Hvis en prosess foregår i naturen, så skal den også kunne foregå på samme måte i en verden som er et speil av den opprinnelige verdenen. Hvis du er høyrehendt og ser deg i speilet, så vil personen du ser være en like realiserbar person. Vedkommende vil imidlertid være venstrehendt. Det ville vært svært underlig om hen forble høyrehendt, og det ville vært et klart brudd på paritetssymmetri!

I fig. 10.8 illustreres konseptet med positiv og negativ paritet. Paritetsoperasjonen, \hat{P} kan også kalles for speiling. Operasjonen er ekvivalent med å skifte fortegn på alle koordinater. Om man gjør operasjonen to ganger, så kommer man tilbake til det opprinnelige systemet. Om operasjonen gjentas, så vil vi komme tilbake til det opprinnelige systemet, altså $\hat{P}^2 = \hat{I}$ (enhetsoperatoren). Dermed kan paritetsoperatoren enten gi negativ paritet, eller positiv paritet. Som fig. 10.8 illustrerer vil lineære vektorer skifte fortegn ved en paritetsoperasjon, mens 'aksiale' vektorer, som $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ vil ikke skifte fortegn, noe vi også ser enkelt ser matematisk, siden både \vec{r} og \vec{p} skifter fortegn i paritetsoperasjonen, slik at produktet er uforandret.



Figur 10.8: Paritetstransformasjon. Vi tenker oss at det er et speil i z - x planet. Sirkelen opp til høyre roterer, og vi kan definere et banespinn $r \times mv$. I det speilede bilde har vi fortsatt samme banespinn. En lineær hastighetsvektor vil imidlertid skifte retning fra positiv y til negativ y . En paritetstransformasjon kan defineres som en transformasjon der alle tre koordinater skifter fortegn. Da ser vi at den lineære hastighetsvektoren har skiftet fortegn, mens spinnvektoren har beholdt fortegnet

Elementærpartiklene kan klassifiseres etter sin 'indre' paritet. Etter at man forsto at partiklene var systemer bygd opp av kvarker, kunne mye av klassifikasjonen tilskrives pariteten til de angulære bølgefunksjonene. Dette er kort nevnt i forbindelse med bølgefunksjonene til hydrogenatomet (se fig. 4.6).

Man mente lenge at paritet måtte være bevart i alle reaksjoner. Men det har vist seg at reaksjoner forårsaket av svake vekselvirkninger vil kunne bryte paritetssymmetri. Pariteten til en partikkelen kan være forskjellig fra den samlede pariteten til henfallsproduktene.

10.3.3 C - Ladningskonjugasjon

Ladningskonjugasjon betyr å bytte ut en partikkelen med sin antipartikkelen. Om man gjør ladningskonjugasjon to ganger, så er man selvsagt igjen bragt tilbake til det opprinnelige systemet. Denne symmetrien kan også brytes.

Man mente lenge at den kombinerte operasjonen \hat{CP} alltid var bevart. Men dette er altså heller ikke tilfelle ... dette er (kanskje?) bra, for hele universets eksistens avhenger av at det skal finnes et slikt brudd! Uten CP-brudd forstår man ikke hvordan det kan ha blitt skapt et univers bestående av materie etter 'The Big Bang'!

10.4 Invariant masse og kollisjonsenergi

Vi ønsker å produsere og studere nye partikler og resonanser ved akselatorene. Hvordan kan vi vite om vi har laget bestemt, ustabil partikkelen? ⁵. Når levetiden er kort, så er vi henvist til å slutte oss til dette utfra henfallsproduktene. I prosessen $a + b \rightarrow c + d + X$ ønsker vi å rekonstruere massen til systemet bestående av partiklene $c + d$, m_{cd} . Vi må ta hensyn til at de utgående partiklene beveger seg med relativistiske hastigheter. Hvis vi beveger oss sammen med et referansesystem der partikkelen er i ro, så er det jo greit. All energi $E = mc^2$ må finnes igjen i energien til partiklene c og d, så $m_{cd}c^2 = E_c + E_d$. Dessuten er bevegelsesmengden lik 0, $\vec{p}_c = -\vec{p}_d$.

Hvordan skal vi finne m_{cd} når partikkelen vi eventuelt har skapt er i bevegelse? Vi kan konstruere størrelser som er invariante under et skifte av referansesystem ⁶. Om to punkter transformerer ikke-relativistisk, så vi avstanden mellom dem forblir uendret, avstanden er invariant for Galilei-transformasjoner. Men relativistisk, så har vi fenomener som lengdekontrak-

⁵Strengt tatt kan vi aldri være helt sikre. Men hvis vi har funnet mange hendelser som er tilnærmet like, så kan vi være sikre i statistisk forstand

⁶Invariant masse er også omtalt i seksjon 1.7.3

sjon og tidsdilatasjon. Vi kan likevel konstruere et invariant 'lengdestykke', hvis vi involverer tiden som en fjerde koordinat i en 4-vektor, (x, y, z, ct) . Det viser seg at det er 'avstanden'

$$d^2 = (ct_2 - ct_1)^2 - [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2]$$

som er invariant under lorentztransformasjon.

Man kan også konstruere en 4-vektor ved hjelp av bevegelsesmengden ('romdelen') og energien ('tidsdelen') til en partikkel, en 4-bevegelsesmengde. Det er vanlig å sette tidsdelen først, og si at 4-vektoren er definert som $(E/c, p_x, p_y, p_z)$. Nå skal vi se på transformasjoner til/fra hvilesystemet til en partikkel, der $\vec{p} = 0$ og $E = mc^2$. Det invariante 'lengdestykket' (der det andre punktet er origo) blir:

$$(E/c)^2 - (\vec{p})^2$$

I hvilesystemet til partikkelen så er $p = 0$, så da er invarianten lik $(mc)^2$. Vi får det samme i et system som har hastighet v . I henhold til Lorentztransformasjonen har vi der at $p = \gamma mv$ og $E = \gamma mc^2$, med $\gamma = 1/\sqrt{1 - (v/c)^2}$ (Se standard omtale av relativitetsteori i lærebøker), og vi får:

$$(\gamma mc)^2 - (\gamma mv)^2 = m^2 \gamma^2 c^2 [1 - (v/c)^2] = (mc)^2$$

Vi kan selvsagt multiplisere med c^2 .

For et system av partikler defineres den invariante massen som

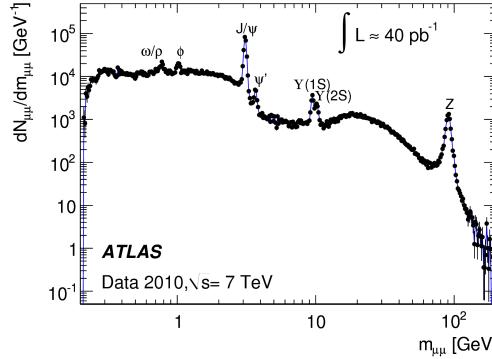
$$m_{inv}c^2 = \sqrt{(\sum E_i)^2 - (\sum \vec{p})^2 c^2} \quad (10.9)$$

Det er denne størrelsen som gjør oss istic til å rekonstruere massen til systemer av partikler og lete etter nye partikler. Fig. 10.9 viser det det invariante massespekteret for $\mu^+ \mu^-$ par fra prosessen $p + p \rightarrow \mu^+ + \mu^- + X$ som sett i ATLAS detektoren.

Helt analogt kan vi definere invariant kollisjonsenergi ved å konstruere den samme invarianten mellom de to kollisjonspartiklene, a og b . Invarianten s er gitt som

$$s = (E_a + E_b)^2 - (\vec{p}_a + \vec{p}_b)^2$$

\sqrt{s} er den tilgjengelige energien i kollisjonen. Ved mange akseleratoranlegg kolliderer to like partikler med $\vec{p}_a = -\vec{p}_b$, og vi har $\sqrt{s} = 2E_{beam}$. Ved CERNs LHC kolliderer to protoner med $\sqrt{s} = 13$ TeV. Dette er nok energi til å skape flere tusen mesoner og baryoner i en kollisjon.



Figur 10.9: Fordeling av invariante masser av $\mu^+\mu^-$ par funnet i data fra ATLAS detektoren. Man ser at det er produsert kortlivede partikler med forskjellige masser, som har henfalt til $\mu^+\mu^-$ par. Legg merke til at den vertikale skalaen er logaritmisk

10.5 Levetid, forgreningsforhold og bredde

Vi har forklart at det er en sammenheng mellom levetid og naturlig båndbredde til en eksitert tilstand gjennom usikkerhetsrelasjonen. Sammenhengen er

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$$

der båndbredden er lik den totale bredden av Breit-Wigner kurven. Γ er spredningen i energi man finner når man utfører gjentatte målinger av den i et ustabilt system. Relasjonen gjelder også for ustabile partikler som henfaller. De kan ofte henfalle til flere forskjellige slutt-tilstrender. Ved hjelp av Feynmandiagrammer kan man estimere de forskjellige bidragene, delbreddene. Den totale bredden er en sum av delbredder

$$\Gamma_{tot} = \sum_i \Gamma_i$$

Verdien av delbreddene er proporsjonal med *forgreningsforholdet* (Branching ratio) som gir sannsynligheten for at den ustabile partikkelen skal henfalle i en bestemt kanal

$$Br(a \rightarrow i) = \frac{\Gamma_i}{\Gamma_{tot}}$$

Vi har at summen av forgreningsforholdene blir 1. Dersom vi har målt totalbredden og et forgreningsforhold, så er altså delbredden

$$\Gamma_i = Br_i \Gamma_{tot} \quad (10.10)$$

Delbredder kan beregnes teoretisk ved hjelp av Feynmandiagrammer.

10.6 Myonet, τ -leptonet, og svake vekselvirkninger

Det ble tidlig klart at β -henfall skyldtes helt andre mekanismer enn det som forårsaket α henfall (som skyldes tunellering av heliumkjerner ut av tyngre kjerner). β -henfall er forårsaket av en egen kraft som kalles den svake kraften. Selv om den først ble observert i ustabile kjerner, så starter vi med en diskusjon av myonet, som ble oppdaget i kosmisk stråling i 1936. Myonet er ustabilt og henfaller til et elektron og to nøytrinoer. Feynmandiagrammer er vist i fig. 10.10

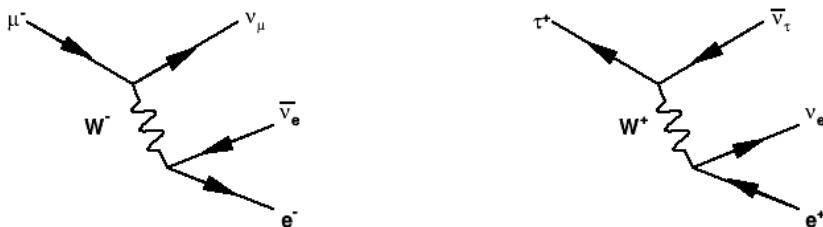
I dette diagrammet kan vi lese ut mye informasjon:

- Vi har innført en ny kraftformidler, *W-bosonet*. Det har elektrisk lading, og har en masse på

$$M_W = 80,40 \text{ GeV}/c^2$$

W-bosonet har heltallig spinn, og formidler altså en svak kraft som må være forårsaket av en type ladning som elektroner og nøytrinoer besitter.

- I henfallet beskrevet her så er den tunge W-partikkelen *virtuell*. (Se kapittel 3)
- Vi har innført nøytrale partikler som heter *nøytrinoer*, ν_e, ν_μ, ν_τ . Nøytrinoene antas å være fermioner med spinn lik $1/2$ slik som elektronene.
- Vi har innført en bevaringslov: Antall leptoner er bevart separat i hver generasjon av leptoner. Det er altså tre bevarte størrelser, L_e, L_μ og L_τ
- Vi trenger også en ny koblingskonstant i verteks. Denne kalles den svake koblingskonstanten, g_W



Figur 10.10: Feynman-diagram av: a) μ^- henfall b) τ^+ henfall. Verteksfaktorene er her ikke $\sqrt{\alpha}$, men den svake koblingskonstanten g_W .

Man finner at henfallsraten for myon henfall er

$$\Gamma(\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu) = K \left(\frac{G_F}{(\hbar c)^3} \right)^2 (m_\mu c^2)^5 \quad (10.11)$$

med

$$G_F/(\hbar c)^3 = 4\pi \frac{g_W^2}{(M_W c^2)^2}$$

G_F kalles Fermis koblingskonstant fordi Fermi utviklet en teori for β henfall allerede i 1933, der vekselvirkningen ikke var gjennom partikkelutveksling, men heller som noe som skjer i et punkt der de fire partiklene møtes om man tar bort linja for W-bosonet. Gjennom levetidsmåling av myonet finner man

$$G_F/(\hbar c)^3 = 1,166 \times 10^{-5} GeV^{-2}$$

Legg merke til at dette gjør den svake koblingskonstanten dimensjonsløs. Faktoren K i ligning 10 rommer her ikke bare kinematiske effekter, men også detaljer i vekselvirkningen. Blant annet viser det seg at W-bosonet bare vekselvirker med nøytrinoer med en bestemt retning på sin spinnvektor, den som peker i motsatt retning av bevegelsesretningen, noe som har konsekvenser for levetiden av myonet. De svake vekselvirkninger er ikke de samme dersom man speiler prosessene. Dette kalles *partitetsbrudd*.

Man mener at det er *universalitet* i den svake vekselvirkningen. Det betyr at man ikke innfører forkjellige koblingskonstanter i de tre forskjellige vertekspunktene i fig. 10.10. (verteksene $\mu\nu W$, $\tau\nu W$ og $e\nu W$).

Myonet har en masse på $m_\mu = 105,7 MeV/c^2$ og henfaller så godt som utelukkende gjennom reaksjonen i ligning 9. τ leptonet er mye tyngre, med en masse på $m_\tau = 1777 MeV/c^2$. Det ble oppdaget i elektron-positron annihilasjon (fig. 10.4). Da energien i kollisjonene kom over $2m_\tau c^2$ ble det produsert en del $\tau\bar{\tau}$ par i tillegg til de kjente $f\bar{f}$ (fermion) parene.

Henfallsmodene til τ -leptonet er mange, fordi kvarkene også føler svak vekselvirkning. Kvarkene kobler m.a.o. også til W-bosonet, og de tre letteste kvarkene, u , d og s vil alle kunne produseres i τ -henfall. Men det er bevaringsregler å passe på. Når τ^- henfaller til et kvarkpar, så er det hovedsakelig til paret $d\bar{u}$. Dette produserer i sin tur et av mesonene π^- ($J=0$) eller ρ (spinn = 1). Når τ -massen erstatter myonmassen så gjelder formel 8 også for leptoniske τ -henfall (med noen små korrekjoner).

10.7 Kvarker i svake vekselvirkninger

Da er det på tide å tegne Feynmandiagrammet for β henfall, som, på nukleon-nivå gir henfall av nøytroner

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$$

Dette forstår man nå som en overgang på kvark-nivå, slik det er tegnet i figur 10.11. Vi kan bare snu opp ned på n -en og p -n så har vi henfallet på kvarknivå! De to andre kvarkene i nøytronet er uberørt i henfallet. Det komplette Feynmandiagrammet for nøytronhenfall inneholder to rette kvarklinjer for å vise det.

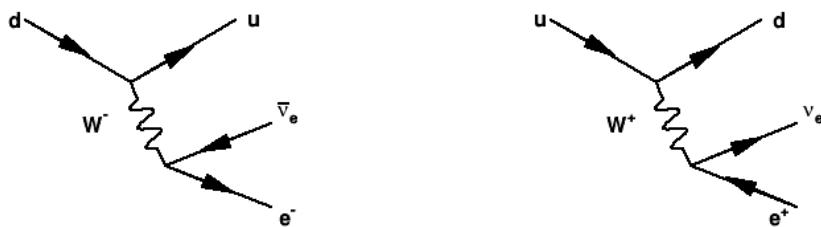
Som for leptoner, så kan henfallsdiagrammene gjentas for de tre generasjonene med kvarker. Legg merke til at vi har satt et merke på d-kvarken og s-kvarken (i oversikten nedenfor). Dette er fordi koblingen må ses på som blanding av kvark-koblinger. Denne blandingen må til for å forklare levetiden til partikler som inneholder s-kvarken.

10.8 Foreløpig oppsummering om svake vekselvirkninger

De seks kjente leptonene kan organiseres parvis i tre generasjoner

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e^- \end{pmatrix} \quad ; \quad \begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu^- \end{pmatrix} \quad ; \quad \begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau^- \end{pmatrix}$$

Bortsett fra det som kan forklares med at massene til de tre ladde leptonene er svært forskjellige, er det ingen kjent forskjell i veksevirkningene til de tre generasjonene. I produksjon og henfallsprosesser så regner man at leptontallet er bevart separat i de tre generasjonene.



Figur 10.11: Feynman-diagram av: a) β^- henfall b) β^+ henfall

Man trodde lenge at nøytrinoene var masseløse partikler, og de kan regnes masseløse i lepton og β henfall. Imidlertid er det etterhvert mange målinger som viser at nøytrinoene kan oscillere mellom forskjellige typer ($\nu_e \rightarrow \nu_\mu$ osv). For eksempel gir nøytrino-oscillasjoner en forklaring på hvorfor man eksperimentelt ser mye færre elektron-nøytrinoer fra sola enn forventet utfra modellen om hvorfor sola lyser. Slike oscillasjoner er bare mulige dersom det er en liten masseforskjell mellom nøytrinoene. Oscillasjonene skyldes hva som skjer etter at nøytrinoene har blitt produsert. Dette styres av den tidsavhengige Schrödingerligningen. Man har ikke funnet brudd på loven om separat leptontallsbevaring i prosesser der ladde leptoner deltar.

De seks kjente kvarkene kan organiseres på samme måte i tre generasjoner:

$$\begin{pmatrix} u \\ d' \end{pmatrix} ; \quad \begin{pmatrix} c \\ s' \end{pmatrix} ; \quad \begin{pmatrix} t \\ b' \end{pmatrix}$$

Her har u , c og t kvarkene alle ladning $q = (2/3)e$ mens ladningen til kvarkene nederst er $q = -(1/3)e$. Merkene på den nederste raden betyr at bevaring av kvarktall i svake vekselvirkninger gjelder tilstander som er en blanding av forskjellige kvarker⁷. Da man fant nye 'langlivede' partikler i proton-proton kollisjoner og andre steder på 60 og 70-tallet så måtte man innføre et nytt kvantetall til noen av partiklene: Særtall (Strangeness). Partikler med Særtall levde lenger enn andre partikler, og ble gjerne produsert parvis (med motsatt Særtall). Nå vet vi at dette skyldes at de hadde s-kvarker med i sin oppbygning. Følgende bevaringslov ble funnet:

- Særtall er bevart i sterke vekselvirkninger, men brutt i svake vekselvirkninger.

Brudd på særtall i svake vekselvirkninger er med i teorien ved å si at de svake kraftformidlerne vekselvirker med en blanding av kvartyper. Man innfører helt tilsvarende bevaringslover for de andre kvarktypene (Charmtall, Bunn-tall, Topptall).

10.9 Sterk kjernekraft, hadroner,kvarker,gluoner

Hadroner er fellesbetegnelsen på partikler som er bygd opp av kvarker. Kvarkene føler alle de kjente vekselvirkningene. Det er måten de responderer til den svake kraften som gjør at de ble samlet i dubletter over.

Teorien for de sterke vekselvirkningene heter QCD, KvanteKromodynamikk, og er også en kvantefelt-teori. Men den er mye mer komplisert enn

⁷Eksempel: Med to generasjoner så er $d' = d \cos \theta_C + s \sin \theta_C$, der θ_C kalles Cabibbo-vinkelen.

10.9. STERK KJERNEKRAFT, HADRONER, KVARKER, GLUONER 313

QED. Mens det en type elektrisk ladning, så er det tre typer sterk ladning, vi kan kalle dem r,g og b. ('red', 'green' og blue") (om vi tar med 'antiladning' så må vi heller si at det er h.h.v. to og seks typer ladning). Kraftformidlerne kalles *gluoner*, som kommer i åtte typer.

Gluonene har spinn=1 i likhet med fotonene, men de vekselvirker med hverandre, noe som er en konsekvens av at de selv har fargeladning. Gluonene er masseløse, men kan klumpe seg sammen i systemer av f.eks to eller tre gluoner, som da har resonansenergi som svarer til en effektiv masse. Mange eksperimenter har lett etter slike limballer (glueballs), og det er funnet en del topper i diverse massespekter som kan være slike limballer.

På slutten av 1960-tallet var det nokså klart at nukleonene hadde indre struktur, sannsynligvis i form av tre punktformede partikler. Det store antall nye partikler man hadde funnet kunne også systematiseres dersom man antok at hadronene hadde indre struktur. Man kunne klassifisere etter antatt kvarkinnhold. *Baryoner* består av tre kvarker, og har halvtallig spinn. *Mesoner* består av et kvark-antikvark par og har heltallig spinn (eller 0). Se videre omtale i tabellene. Ingen frie kvarker har vært observert, trass mange forsøk, ved stadig høyere kollisjonsenergier. Istedent går energien med til å lage nye mesoner og baryoner, gjerne samlet i bunter, 'jeter'.

10.9.1 e^+e^- -kollisjoner

Av særdeles stor betydning for framveksten både av QCD og elektrosvak teori, var eksperimentene som har blitt gjennomført i kollisjoner mellom elektroner og positroner. Man kunne studere annihilasjonsdiagrammet, fig. 10.4, i stor detalj. Ikke bare ved produksjon av et $\mu^+\mu^-$. Alle fermion-antifermion der fermionet har elektrisk ladning kan produseres gjennom diagrammet. Dersom nok energi var tilstede, så vi det resultere i reelle tilstander og partikler, bestående av de tilgjengelige kvarktypene. Hvis energien svarer til massen til av et meson (og kvantetallene passer) så får man resonant produksjon av dette mesonet.

Ved begynnelsen av 1970-tallet begynte kvarkmodellen å få gjennomslag. Man regnet med at tre typer kvarker eksisterte, *u*, *d* og *s* kvarkene. I 1974 oppdaget man imidlertid markante resonansfenomener i virkningstverrsnittet $\sigma(e^+e^- \rightarrow \text{hadroner})$ i kollisjoner ved massesenterenergi rundt 3.1 GeV. Den svært smale resonansen kunne ikke forklares som bestående av de kjente kvarktypene. Man hadde oppdaget mesoner bestående av en ny tyngre kvark, som fikk navnet sjarm-kvarken (*c*-kvarken). Så godt som samtidig ble dette mesonet også oppdaget i proton-proton kollisjoner. Det ble ikke enighet om hvordan mesonet skulle betegnes, og det har dermed fått navnet *J/ψ*. Senere fikk man kollisjoner ved enda høyere energier, og man oppdaget nye

resonanser ved ca 10 GeV, som skyldtes tilstander inneholdende enda en ny kvark, b -kvarken. På den tiden var det mange resultater som kunne forklares utfra en organisering av kvarktyper i dubletter, og leting etter en sjette kvark var igangsatt. Imidlertid ble energien på kollisjonene aldri høy nok til at produksjon av $t\bar{t}$ kvarker var mulig.

Det var spesielt nyttig å studere forholdet mellom virkningstverrsnittene for produksjon av hadroner og for produksjon av myonpar, altså

$$R = \frac{\sigma(e^+e^- \rightarrow \text{hadroner})}{\sigma e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-)}$$

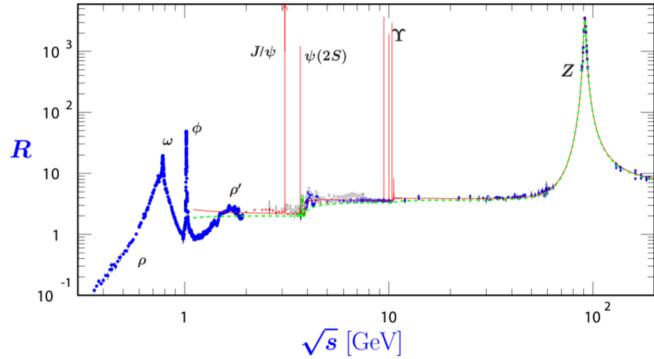
Figur 10.12 viser dette forholdet som funksjon av massesenterenergi. I tillegg til resonansene kommer det her fram at verdien av R bare kan forklares dersom det lages kvarkpar med en hyppighet som er tre ganger så høy som de enkleste forventningene. Dette kommer av en ekstra degenerasjonsgrad, nemlig *farge*. Hver kvarktype kan ha tre forskjellige typer *fargeladning*, som kan produseres med samme sannsynlighet, slik at antall mulige tilstander tredobles. Den målte verdien av R tolkes som bevis for eksistens av fargeladning slik det er forutsagt i QCD. Når energien er over terskelen for produksjon av et $b\bar{b}$ par, så kan man forutsi

$$R = \frac{N_C(q_u^2 + q_d^2 + q_s^2 + q_c^2 + q_b^2)}{q_\mu^2} \quad (10.12)$$

der q betegner elektrisk ladning på de forskjellige kvarkene (og myonet). N_C er antall farger som fins for hver kvark. Målinger av R passer altså med $N_C = 3$.

10.9.2 Proton-proton, og antiproton-proton kollisjoner

Et typisk Feynmandiagram for den elementære kollisjonen i en proton-proton kollisjon ved LHC vil se ut slik som i fig. 10.13 Her er det igjen en ny vertexfaktor, $\sqrt{\alpha_s}$. α_s er den sterke koblingskonstanten. Grunnen til at vi sier at vekselvirkningen skyldes farge-ladning er at det er en analogi med de tre primærfargerene. Fargeladningen til kvarkene må blande seg til noe fargeløst, slik blandingen av de tre primærfargene blir. Man tror at det er bare fargeløs blandinger av kvarker som kan realiseres som selvstendige partikler. De enkleste fargeløse tilstander får man fra systemer med tre kvarker, noe som gir oss baryonene, eller systemer med et kvark antikvark par, noe som gir oss mesonene. Når c og b kvarkene er så tunge at når disse binder seg til en antikvark til et meson, så gir en ikke-relativistisk beskrivelse mening. Man kan studere systemet med Schrödingerligningen slik som for hydrogenatomet,



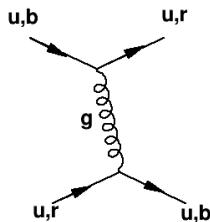
Figur 10.12: Forholdet R . De røde 'strekene' er veldig smale og høye resonanser i virkningstverrsninttet. Fra [26]

bortsett fra at Coulombpotensialet må erstattes med noe som er relevant for fargekrefter. Det viser seg at et potensial på formen

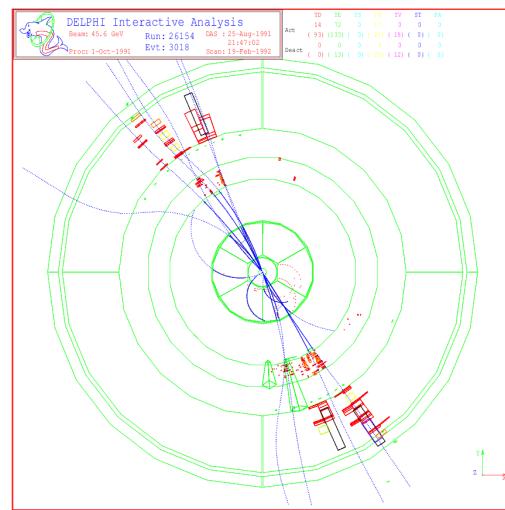
$$V(r) = -a/r + br \quad (10.13)$$

passer fint. Om man trekker kvarkene fra hverandre så vil energien som kreves bare øke med avstanden. Når avstanden er over ca 1 fm så har vi så mye energi til stede at det skapes nye kvark-antikvark par. Det er ingen ting som tyder på at det skal være mulig å observere frie kvarker. Fig. 10.14 viser et bilde av prosessen $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}$. Istedentfor å se to kvarker, så ser vi to grupper med partikler som beveger seg i hver sin retning.

Coulombpotensialet svarer til vekselvirkning som i fig 10.13, altså utveksling av ett gluon. a kan relateres til koblingen i verteks, α_s , den sterke koblingskonstanten. α_s er mye større enn $1/137$, men er ikke konstant. Verdien



Figur 10.13: Feynman-diagram av kollisjon av to u-kvarker, med gluonutveksling. Kvarken har fargeladning som overføres med gluonet til den andre kvarken. Verteks-faktoren her er kvadratrotten av den sterke koblingskonstanten, α_s



Figur 10.14: Bilde som viser et eksempel på prosessen $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}$ i DELPHI eksperimentet ved CERNs LEP (Large Electron Positron Collider). Projeksjon i planet som er vinkelrett på stråleretning, der elektronet og positron har gått hver sin vei og kollidert i sentrum av bildet. Et kvark-antikvark par er dannet gjennom annihilasjon (se fig. 10.4 med kommentar). Kvarkene har umiddelbart dannet hadroner, (flest mesoner slik som π -mesonet) i to kollierte bunter ('jetter'), som vi ser sporene av i detektoren.

minker med økende energioverføring i kollisjonene og prosessene. For 'harde' prosesser med energioverføring rundt 100 GeV, så er verdien av α_s rundt 1/10. QCD beskriver i teorien også vekselvirkningene som gjør at kvarkene er bundet sammen f.eks. i et proton, men beskrivelsen av vekselvirkningene som en perturbasjon etter potenser i α_s er ikke lenger brukbar. I stedet gjøres store data-simuleringer for å få innsikt i hva som skjer, i såkalt *lattice QCD*. Slike beregninger gir også støtte til antakelsen om at det statiske potensialet mellom en kvark og en antikvark øker lineært med avstanden mellom dem for 'store' avstander.

For å beskrive den sterke vekselvirkningen mellom kvarkene, så klassifisieres de etter fargelading, en fargetriplett for hver kvark.

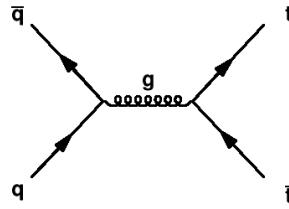
Påvisning av W og Z bosonene og toppkvarken

Etter å ha funnet b-kvarken i elektron-positron annihilasjon, så antok man at det eksisterte en sjette kvark med enda større masse. Den antatte kvarken ble døpt 'toppkvarken' lenge før den var funnet. Man flyttet stadig grensene for dens masse både gjennom søk i elektron-positron kollisjoner og i kollisjoner mellom protoner.

Teorien for de svake vekselvirkningene forutsa også eksistensen av W-bosoner; og det nøytrale Z-bosonet. Hvordan skulle man kunne påvise disse bosonene som var forutsagt å være nesten hundre ganger tyngre enn protonet. Cerns nye flaggskip på slutten av 1970 tallet, SPS (Super proton synchrotron), kunne etterhvert akselerere protoner til 450 GeV, altså 500 ganger protonmassen. Men dette var ikke nok av to grunner: For det første så er det energien i kollisjonene mellom protonets bestanddeler, kvarkene (og etterhvert gluonene) som må opp i 100 GeV. For det andre måtte protonene fra SPS skytes på target som var i ro i laboratoriet. Dette er ikke fordelaktig med tanke på massesenterenergi.

Massesenterenergien i kvarkkollisjonene ble langt lavere enn 100 GeV. Men så fant man metoder for å produsere og samle opp antiprotoner i store nok mengder til at man kunne lage antiproton-proton kollisjoner. Det viste seg videre mulig å akselerere antiprotoner i motsatt retning av protoner i den eksisterende SPS'en. Dermed fikk man kollisjoner med massesenterenergi på 546 GeV, noe som var nok til å finne partikler med masser rundt $100 \text{ GeV}/c^2$. SPS-maskinen ble omdøpt til S \bar{p} pS. W og Z bosonene ble funnet i 1983 i disse kollisjonene.

Men det var fortsatt ingen tegn til toppkvarken (men noen feilaktige indikasjoner har vært publisert på 80-tallet). Ved Fermilab i USA (nær Chicago) tok man imidlertid over teknikken med å produsere antiproton-protonkollisjoner ved enda høyere energier, og i 1994 ble toppkvarken endelig



Figur 10.15: Det mest dominerende Feynmandiagrammet for produksjon av topp-kvarken ved Fermilab's Tevatron.

funnet, med en masse på rundt $170 \text{ GeV}/c^2$, i $p\bar{p}$ -kollisjoner med massesenterenergi på 1,8 TeV. Det dominerende Feynmandiagrammet for produksjonen er vist i fig 10.15. Toppkvarken vil henfalle umiddelbart, og det er ikke mulig å danne mesoner som inneholder toppkvarken før den henfaller.

10.10 Z^0 -bosonet. Antall generasjoner og forening av vekselvirkninger.

Svake vekselvirkninger har en tredje kraftformidler, Z^0 -bosonet. Dette kan også produseres i e^+e^- annihilasjon. Den generelle formelen for virknings-tversnittet for produksjon av en slik resonans er iflg. [26]⁸

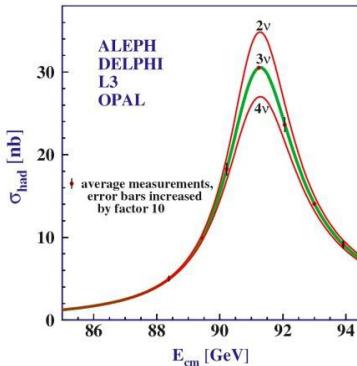
$$\sigma = \frac{K}{E^2} \left[\frac{\Gamma^2/4}{(E - M)^2 + \Gamma^2/4} \right]$$

der Γ er totalbredden. Fig. 10.7 viser denne formelen for produksjon av Z^0 bosonet, som har masse på $91,2 \text{ GeV}/c^2$ og en total bredde på $2,5 \text{ GeV}$. I Standardmodellen kan man forutsi totalvidden av Z^0 bosonet. Det vil henfalle til alle kvark og leptonpar der kvark (lepton) massen er mindre enn halvparten av Z^0 massen. Dette vil si at den henfaller til alle kjente kvarker og leptoner, bortsett fra t-kvarken. Formelen er slik

$$\Gamma_{tot} = \Gamma_{had} + 3\Gamma_l + N_\nu\Gamma_\nu$$

Her er Γ_{had} delvidden for Z-helfall til et kvark-antikvark par (altså summert bidrag til $u\bar{u}, d\bar{d}; s\bar{s}; c\bar{c}; b\bar{b}$), og Γ_l er delvidde til et ladd leptonpar

⁸Referansen [26] er til 'Particle Data Group'. De utgir partikkelfysikkens 'bibel', med data om alle elementærpartikler, og artikler om det meste som en partikkelfysiker trenger. Se <http://pdg.lbl.gov/>



Figur 10.16: Målt virkningstverrsnitt for prosessen $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}$ i energiområdet rundt $m_{Z^0}c^2$, sammenlignet med teoretisk forutsigelse for forskjellig antall nøytrinofamilier.

$e^+e^-; \mu^+\mu^-; \tau^+\tau^-$, mens Γ_ν er forutsagt delvidde til et nøytrinopar. Delviddene kan beregnes med høy presisjon i SM. Vi er også sikre på at vi har funnet alle kvarktyper og ladde leptoner med masse mindre enn $M_Z/2$. Men det kan finnes lette nøytrinotyper som ikke er oppdaget. I så fall ville Z^0 partikkelen henfalle til dette. Da ville dette være synlig i form av økt totalbredde. Ved Cern's LEP, så har man målt formen av virkningstverrsnittet for Z^0 produksjon med høy presisjon, og man finner at Γ_{tot} passer perfekt med at den henfaller til akkurat tre nøytrinotyper. (Se fig. 10.16) Derfor tror vi ikke at det finnes mer enn tre generasjoner med kvarker og leptoner. Z^0 -partikkelen var også en svært viktig oppdagelse for å bekrefte teorien som forener elektromagnetisk og svak kjernekraft. At disse teoriene er forent, betyr at det fins en relasjon mellom ladningene. Den er

$$g_W = \frac{e}{\sin \theta_W} \frac{1}{\sqrt{4\pi \epsilon_0 \hbar c}}$$

For en direkte sammenligning av 'styrken', så er det greit å definere en 'svak' finstrukturkonstant ved bruk av finstrukturkonstanten vi kjenner (se ligning 10.5)

$$\alpha_W = g_W^2 = \alpha / \sin^2 \theta_W$$

Vinkelen θ_W kalles Weinberg-vinkelen, og er en parameter i teorien som er målt til $\sin^2 \theta_W = 0,23$. Vinkelen kan bl.a. bestemmes ut fra forholdet mellom W og Z^0 massene, idet teorien forutsier $\cos \theta_W = \frac{m_W}{m_{Z^0}}$. α_W er altså omrent 5 ganger større enn α . Men den svake kraften har som sagt svært kort rekkevidde siden felt-bosonene har så høy masse.

Det er derfor riktig å si at vi bare har *tre* fundamentale krefter i naturen:

- Den elektrosvake kraften.
- Den sterke kjernekraften (som beskrives med QCD).
- Gravitasjonskraften.

Når man bruker uttrykket Standardmodellen, så omfatter dette både elektrosvak teori og QCD. Teoriene har to ting til felles:

- 1 Begge er kvantefelt-teorier, og slik sett videreføringer av QED (som ble etablert på 1950 tallet)
- 2 Alle etterprøvbare observasjoner er i samsvar med de to teoriene s forutsigelser.

Teoriene kan ikke forutsi alle observasjoner. Spesielt QCD blir fort veldig komplisert ved lave energier. Men der den kan anvendes, så ser det ut til at prediksjonene er riktige.

10.11 Higgs-bosonet

Kraftformidlere med masse har vært vanskelig å leve med innen kvantefelt-teori. Den vellykkede perturbasjonsteorien QED blir meningslös dersom man gir fotonene masse. Higgs og andre foreslo en mekanisme for hvordan man kunne gi fermioner og kraftformidlende bosoner masse, og samtidig unngå problemene. Dette kunne tas i bruk i Standardmodellen. En bivirkning var at mekanismen forutsa eksistensen av et nytt boson med spinn = 0, Higgsbosonet. Dette ble oppdaget i proton-proton kollisjoner ved CERNs LHC i 2012, og har en masse på $125\text{GeV}/c^2$. Higgsbosonet har den merkverdige egenskap at det kobler til fermioner gjennom *masse* (multiplisert med elektrosvak ladning), se fig. 10.17. Den dimensjonsløse koblingskonstanten blir

$$g_{Hff} = \frac{m_f}{\sqrt{2}M_W} g_W$$

Siden Higgsbosonet har spinn lik 0, så er diagrammet identisk med det Yukawa foreslo for pion-utveksling mellom nukleoner, så dette kalles for Yukawa-koblingen. Delvidden for et Higgshenfall til et fermion-antifermionpar p.g.a. dette diagrammet kan med god tilnærming skrives: ⁹:

$$\Gamma(H \rightarrow f\bar{f}) = C m_f^2 \quad (10.14)$$

Naturlig nok så finner vi igjen vertex-faktoren kvadrert. Tilnærmingen $\Gamma =$

⁹Mandl and Shaw: "Quantum Field Theory", Wiley 1984 gir en mer presis beregning av masseavhengigheten

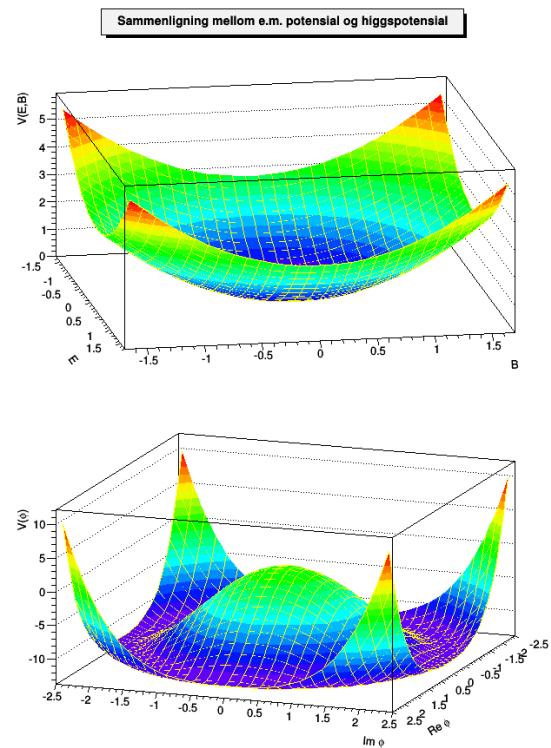


Figur 10.17: Feynman-diagram for higgs henfall. a) Higgs til fermioner. Koblingsstyrken er proporsjonal med massen til fermionet.b) Higgs til to fotoner. Det kommer inn to faktorer av størrelsesordenen α i denne henfallsraten.

Cm_f^2 er god selv for det tyngste fermion-paret Higgspartikkelen kan henfalle til, nemlig til et par av b-kvarker.

Feltet forbundet med Higgs-partikkelen er en kompleks størrelse, $\phi = Re(\phi) + iIm(\phi)$. Hva slags energitetthet får man som følge av higgsfeltet? Som analogi kan man se på energitettheten i elektromagnetismen. Her har man en energitetthet (ofte kalt 'potensial') gitt som $V(E, B) = \frac{1}{2}(\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0} B^2)$. Den laveste energitettheten inntreffer naturlig nok når det elektromagnetiske feltet er lik null. For Higgsfeltet er dette *ikke* tilfelle. Den laveste energitettheten er for en verdi av ϕ som ikke er null! $V(\phi)$ følger en fjerdegradsligning, og den laveste energien inntreffer ikke for en bestemt verdi av $\phi = Re(\phi) + iIm(\phi)$, men for en bestemt verdi av $\phi^* \phi$. Figur 10.18 illustrerer dette. For praktiske beregninger må man velge en verdi for higgsfeltet der potensialet har et minimum. Det faktum at man må velge blir kalt for *symmetribrudd*.

Higgspartikkelen ble oppdaget i henfallet $H^0 \rightarrow \gamma\gamma$. Hvordan er dette mulig? Higgs-partikkelen er elektrisk nøytral, og kobler ikke til fotonet fordi det er masseløst. Svaret finner vi om vi innfører diagrammer med flere vertex-faktorer, i dette tilfellet med en s.k. *loop*. Henfallsraten blir liten på grunn av de ekstra faktorene av størrelsesordenen α , men er likevel interessant på grunn av den distinkte eksperimentelle signaturen. Det dominerende bidraget i loopen er topp-kvarken siden den har så høy masse. Mye av energien i protonene finner man i det sterke feltet som holder kvarkene sammen, gluonfeltet. Nå to protoner kolliderer, så er skapes ofte reaksjonen ved sammensmelting av feltene. Vi avslutter med å oppfordre til å lete opp Feynman-diagrammet som beskriver dannelsen av Higgspartikkelen ved s.k. gluon-gluon fusjon, og påfølgende henfall i de to henfallskanalene to fotoner og fire leptoner! Det utrolige er at det teoretiske virkningstverrsnittet for disse prosessene er beregnet numerisk og bekreftet eksperimentelt!



Figur 10.18: Det elektromagnetiske potensial (øverst) og Higgspotensialet (nederst) som funksjon av sine respektive felter (enheter på aksene er helt vilkårlige)

10.12 Beregninger ved hjelp av Feynmandiagram.

Et Feynmandiagram representerer en *Lorentz invariant spredningsamplitude* M . Vi skal her kort oppsummere diagrammet i fig. 10.4, bare for å gi en liten følelse av hva det hele går ut på. Det er på ingen måte nok til at man kan komme igang med numeriske beregninger. En nokså ny lærebok som er veldig klar i så måte er Mark Thomson: "Modern Particle Physics" [24], og kan anbefales om man er interessert i å komme igang med slikt.

10.12.1 Omskriving av Diracligningen

Diracligningen skrives om ved å definere fire *gammamatriser* av størrelse 4x4, ved matrisene β og α_i brukt i ligningen.

$$\gamma^0 = \beta \quad \gamma^i = \beta \alpha^i$$

Da kan Diracligningen for frie partikler skrives på s.k. kovariant form

$$(i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{mc}{\hbar})\Psi = 0$$

Her er $x^0 = ct$, og vi summerer over like indekser. Når vi ser bort fra tidsavhengigheten er det fire løsninger som hver er en firekomponent søylevvektor, $u_i(p)$ for partikler og $v_i(p)$ antipartikler ($i = 1, 2$ representerer de to løsningene for forskjellig spinnkomponent, $\frac{1}{2}$ eller $-\frac{1}{2}$). Disse funksjonene kalles Dirac-spinorer. Her er p firerbevegelsesmengde (E, p_1, p_2, p_3) til partikkelen. De tilhørende adjungerte spinorene er 4x1 kolonnevektorer definert som $\bar{u}_i(p) = u_i^\dagger \gamma^0$ og $\bar{v}_i(p) = v_i^\dagger \gamma^0$. (u_i^\dagger er den Hermitisk konjugerte av u_i .¹⁰

10.12.2 Feynmandiagram

Linja med pil som går inn vertex og ut igjen representerer en *strøm*:

$$j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$$

Vi ser at hver komponent av j^μ er et tall som framkommer etter en matrisemultiplikasjon. j^μ er en relativistisk 4-vektor. Når pila peker mot tiden, så brukes antipartikkelløsningene.

¹⁰Hermitisk konjugert: Elementene i u_i komplekskonjugeres og vektoren transponeres.

Feynmandiagrammet representerer to strømmer som vekselvirker gjennom en propagator (et boson) med masse m_X . Denne propagatoren skrives

$$\frac{-ig_{\mu\nu}}{q^2 - (m_X c^2)^2}$$

q er overført bevegelsesmengde. Styrken av vekselvirkningen er gitt ved ladningen, som multipliseres med hver strøm. Diagrammet i figur 4 svarer til

$$-iM = [\bar{v}(p_2)ie\gamma^\mu u(p_1)] \frac{-ig_{\mu\nu}}{q^2} [\bar{u}(p_3)ie\gamma^\nu v(p_4)]$$

Vi observerer at $g_{\mu\nu}j^\nu = j_\mu$ slik at vi ender opp med et tall proporsjonalt med $e^2 \frac{j^\mu j_\mu}{q^2}$. Videre må vi passe på bevaring av energi og bevegelsesmengde ved å skrive $q = p_1 + p_2$ i propagatoren. I uttrykket over har vi ikke med indeks på spinorene. For å komme videre til et virkningstverrsnitt så kvadrerer vi amplituden og summerer over alle kombinasjoner av spinnkomponenter (indeks på u og v) som er forenlig med bevaring av angulært moment.

10.13 Oppgaver

- 1 Vis at finstrukturkonstanten er dimensjonsløs.
- 2 Vis at Yukawapotensialet er en løsning av Klein-Gordon ligningen.
Hint: Det er kulesymmetri. Vi velger kulekoordinater (r, θ, ϕ) og vi trenger bare å ta hensyn til r -avhengighet. I kulekoordinater har vi

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

- 3 Beregn rekkevidden til en kraft med feltpartikkel med masse lik $135 MeV/c^2$
- 4 Beregn rekkevidden til en kraft der W-bosonet er kraftformidler. I hvor lang tid brytes loven for energibevaring i et β -henfall? (iflg. usikkerhetsrelasjonen).
- 5 J/ψ -mesonet har en vidde på 93 keV. Hvilken levetid svarer dette til?
- 6 Skriv ut formel 10.9 for invariant masse mellom to partikler. Hva blir formelen når mc^2 til de to partiklene er mye mindre enn energien? Hva blir invariant masse mellom to myoner som har bevegelsesmengde på h.h.v. $1 GeV/c$ og $2 GeV/c$, når de kommer ut fra et vekselvirkningspunkt med vinkel mellom dem på 45 grader?
- 7 Myonet har en levetid på $2,2 \cdot 10^{-6}s$. Bestem verdien av faktoren K i ligning 10.11.
- 8 τ -leptonets levetid er $2,9 \cdot 10^{-13}s$. Bruk formler 10.10 og 10.11 til å forutsi forgreningsforholdet $Br(\tau \rightarrow e\nu\bar{\nu})$
- 9 Bestem verdien av g_W^2 . Sammenlign med verdien av finstrukturkonstanten. Den direkte sammenlignbare størrelsen kan defineres som $\alpha_W = (g_W)^2/(4\pi)$
- 10 Beregn forholdet
- $$\frac{\Gamma(H \rightarrow \mu^+ \mu^-)}{\Gamma(H \rightarrow b\bar{b})}$$
- 11 Skissér grafisk den potensielle energi ($V(r)$), ligning 10.13. a er funnet å være $0,3(\hbar c)$ og $b = 0,23 GeV^2/(\hbar c)$. Hva er energien ved en avstand på 1 fm? ($\hbar c = 197 MeV fm$)
- 12 Gi et overslag av verdien av R , ligning 10.12 ved massesenterenergiene $2 GeV$, $5 GeV$ og $30 GeV$.

10.14 Liste over partikler

KVARKER:

Massene til de lette kvarkene er vanskelig å bestemme, men man mener nå at protonmassen ($938 \text{ MeV}/c^2$) i hovedsak sitter i gluonfeltet som holder kvarkene sammen, slik at massene til de letteste kvarkene er mye mindre enn $1/3$ av protonmassen, slik man antok tidligere. Alle kvarker tilordnes et Baryontall = $1/3$ (og $-1/3$ for antikvarker). Ekstra kvantetall er også nevnt i tabellen hvis de ikke er 0.

navn	Symbol	ladning	masse(MeV/c^2)	Kvantetall
Opp	u	$+\frac{2}{3}$	$2,2 \pm 0,4$	
Ned	d	$-\frac{1}{3}$	$4,7 \pm 0,5$	
Sjarm	c	$+\frac{2}{3}$	1270 ± 30	$C=1$
Sær	s	$-\frac{1}{3}$	96 ± 8	$S=-1$
Topp	t	$+\frac{2}{3}$	$173\,000$	$T=1$
Bunn	b	$-\frac{1}{3}$	4200	$\tilde{B} = -1$

Tabell 10.1: Kvarker

LEPTONER

Nøytrino-oscillasjoner viser at nøytrinoer har masser. Nøytrinomassene antas å være svært små. Grunnet oscillasjoner så får man overganger mellom de tre nøytrinotypene når de er i 'fri flukt' gjennom rommet. Ekstra kvantetall er også nevnt i tabellen hvis de ikke er 0. Kvantetallene for nøytrinoene er slik de oppleves i reaksjoner. De frie nøytrinoene som flyr i store mengder rundt oss (f.eks. fra sola) er blandinger av de tre nøytrinotypene, og kan ikke tilordnes et spesielt e , μ eller τ -kvantetall.

navn	Symbol	ladning	masse(MeV/c^2)		Levetid
elektron-nøytrino	ν_e	0	liten	$L_e = 1$	-
elektron	e^-	-1	$0,511$	$L_e = 1$	stabil
myon-nøytrino	ν_μ	0	liten	$L_\mu = 1$	-
myon	μ^-	-1	105	$L_\mu = 1$	$2,20 \mu \text{ s}$
tau-nøytrino	ν_τ	0	liten	$L_\tau = 1$	-
tau-lepton	τ^-	-1	1777	$L_\tau = 1$	$0,29 \text{ ps}$

Tabell 10.2: Leptoner

BOSONER

Symbol	spinn	ladning	masse(GeV/c^2)	vidde
γ	1	0	0	-
W^+	1	+1	80,39	2,1 GeV
W^-	1	-1	80,39	2,1 GeV
Z^0	1	0	91,188	2,5 GeV
H^0	0	0	125,1	< 1,7 GeV *
g (gluon)	1	0	0	-

Tabell 10.3: Bosoner*. Oppgitt vidde til Higgspartikkelen er en øvre grense fra data. Vidden antas å være mye mindre enn denne grensen, rundt 4 MeV.

NOEN HADRONER

Hadroner er delt i *mesoner* som består av en kvark og en antikvark og *baryoner* som består av tre kvarker. Topp-kvarken er for ustabil til å danne mesoner før den henfaller (t-kvarken har en vidde på ca 2 GeV). Hadroner tildeles kvantetall tilsvarende kvarkinnhold, som er bevart i sterke reaksjoner. Baryontallet er alltid bevart, mens kvantetallene som reflekterer kvarktype er brutt i henfall, som er forårsaket av svake vekselvirkninger.

Symbol	kvarkinnhold	spinn	ladning	masse(MeV/c^2)	levetid (vidde)
π^\pm	$u\bar{d}, \bar{u}d$	0	± 1	139,6	26 ns
π^0	$u\bar{u}, d\bar{d}$	0	0	135,0	$8,5 \times 10^{-17}$ s
K^\pm	$u\bar{s}, \bar{u}s$	0	± 1	493,7	12 ns
K^0, \bar{K}^0	$d\bar{s}, s\bar{d}$	0	0	497,6	51 ns og 0,09 ns *
η_c	$c\bar{c}$	0	0	2983	(32 MeV)
J/ψ	$c\bar{c}$	1	0	3097	(93 keV)
D^\pm	$c\bar{d}, \bar{c}d$	0	± 1	1870	1,04 ps
D^0, \bar{D}^0	$c\bar{u}, u\bar{c}$	0	0	1865	0,41 ps
η_b	$b\bar{b}$	0	0	9399	(10 MeV)
Υ	$b\bar{b}$	1	0	9460	(54 keV)
B^\pm	$u\bar{b}, \bar{b}u$	0	± 1	5279	1,64 ps
B^0, \bar{B}^0	$d\bar{b}, \bar{b}d$	0	0	5280	1,52 ps

Tabell 10.4: Noen mesoner. * De to fysiske blandingene av kvarkinnhold i nøytrale K-mesoner manifesterer seg som partikler med svært forskjellig levetid! Samme effekt gjør seg gjeldende for nøytrale D og B mesoner, men her har man ikke presise målinger av forskjellene, så snittverdier er oppgitt

Symbol	kvarkinnhold	spinn	ladning	masse(MeV/c^2)	levetid (vidde)
p	uud	$\frac{1}{2}$	+1	938, 27	stabil
n	udd	$\frac{1}{2}$	0	939, 57	880 s
Λ^0	uds	$\frac{1}{2}$	0	1115, 7	263 ps
$\Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-$	uus, uds, dds	$\frac{1}{2}$	+1,0,-1	$\approx 1190^*$	80 ps
Ξ^0, Ξ^-	uss, dss	$\frac{1}{2}$	0,-1	$\approx 1320^*$	290 ps
Ω^-	sss	$\frac{3}{2}$	-1	1672	82 ps
Λ_c^+	udc	$\frac{1}{2}$	+1	2286	0,20 ps
Λ_b^0	bdb	$\frac{1}{2}$	0	5620	0,15 ps

Tabell 10.5: Noen baryoner. * Det er massesplittinger på noen MeV mellom partiklene. Et omtrentlig gjennomsnitt er oppgitt.

Kapittel 11

Kosmologi

Mennesker har alltid undret seg over hvordan verden er blitt til, og de fleste religioner begynner med en skapelseshistorie. I tidligere tider var også stjernehimmelen et fascinerende syn som var kilde til mange spekulasjoner. I vår tid kan de fleste av oss knapt se en stjerne på nattehimmelen, på grunn av alt det falske lyset vi beveger oss i om kvelden. I mørket som rådet om natten tidligere, så framsto dette synet svært mye klarere og mer innholdsrikt enn det gjør for vanlige mennesker idag.

Er vi som jordboere del av universet av stjerner og himmellegemer vi ser? Idag er de fleste enige om at jorden er en planet som beveger seg rundt sola, som er en stjerne blant utrolig mange andre stjerner. Stjernene (med og uten planetsystemer) har 'klumpet' seg sammen i galakser, og universet inneholder massevis av galakser. Ved nærmere observasjon ses det at galaksene gjerne ser ut til være nokså flate, med et sentrum med spiralarmer av stjerner som stråler utover. Vår egen galakse, Melkeveien, er slik og når forholdene tillater det kan man se stjernene i Melkeveien som et bånd av stjerner på himmelen.

Kosmologi, studiet av universets opprinnelse er en del av astronomi, som er et eget fagfelt og handler om å studere stjerner og andre himmellegemer. For å studere stjerner og planetbaner har fysikken spilt en svært viktig rolle, i alle fall siden Isaac Newton formulerete sin gravitasjonsteori. Ved hjelp av denne kan man beskrive planetbaner med stor presisjon, og med stor prediksionskraft. Ved å sammenligne observasjoner av banen til planeten Uranus med beregninger basert på Newtons gravitasjonsteori, kunne man forutsi eksistensen av den åttende planeten i solsystemet, Neptun. Neptun ble funnet i 1846 på grunnlag av slike prediksjoner.

I løpet av de siste tiårene har observasjonene blitt nærmere og nærmere knyttet til den delen av fysikken som diskuterer de elementære prosessene i kjerne- og partikkelfysikk. Dessuten har sterke teleskoper, og nye, satellittbaserte instrumenter gitt veldig mye gode og presise data som gjør at

universmodeller kan etterprøves med god presisjon. Interessen for kosmologi har dermed blitt svært stor innen miljøene som forsker innen disse fagfeltene. I dette kapittelet begrenser vi oss til en svært kort oversikt om dette spennende emnet. Referanse [25] er en nylig utkommet lærebok på passende nivå som gir kosmologi mer omtale enn vi gjør i denne boka. Dette kapittelet baserer seg på den, Wikipedia, og noen oversiktsartikler som er lagt ut av 'Particle Data Group' [26]. Forhåpentligvis får leseren et visst utbytte av å lese dette, selv om forfatteren må innse at han desverre ikke har full oversikt over emnet.

11.1 Observasjoner av himmellegemer

De viktigste instrumentet for observasjoner av objektene i universet er teleskop av forskjellige størrelser. Tradisjonelt har disse observert i spekteret for synlig lys, men nå observeres det også i andre områder av det elektromagnetiske spektrum, spesielt mot lengre bølgelengder.

Stjernene kan klassifiseres etter lysstyrke, og deles inn i et forholdsvis lite antall typer, som lyser med en gitt absolutt lysstyrke og farge. De forskjellige stjernene har også forholdsvis distinkte kjemiske sammensetninger, som kan bestemmes utfra analyse av spektrallinjer. Intensiteten vi faktisk observerer vil avhenge av avstanden, som $1/r^2$. Men farge og spektrallinjer forteller oss om hvilken type stjerne vi observerer. Når typen er kjent vet vi også noe om absolutt intensitet. Dermed vil den observerte lysstyrken fortelle oss avstanden til stjernen.

Har man gode teleskoper så vil man ikke bare kunne observere stjerner i melkeveien, men også galakser.

11.1.1 Enheter i astronomien

Avstander

I astronomien benyttes spesielle enheter for avstand, hastighet og annet. En AU (Astronomical Unit) er en enhet for lengde, nemlig middelavstanden mellom jorda og sola. Fra 2015 er den fastlagt som $1 \text{ AU} = 149\,597\,870,7 \text{ km}$.

En annen viktig lengdeenhet er ett *lysår*. Det er den avstanden lyset tilbakelegger i løpet av et år, omtrent $3 \times 10^5 \times \pi \times 10^7 \text{ km} \approx 9,4 \times 10^{12} \text{ km}$.

En annen enhet for lengde kommer fra målinger av *parallakse*. Man kan finne avstanden ved å sammenligne forskjell i posisjon til en stjerne, når den utmåles på to tidspunkt som er seks måneder fra hverandre (f.eks. 1. januar og 1. juli). Da har stjernens vinkel med planet til jordbanen endret seg,

siden jorda har flyttet seg 2 AU. Hvis vinkelen er endret med 2 busekunder (2/3600 av en grad), så er avstanden til stjernen 1 Parsec (se fig. 11.1). 1 Parsec er omtrent 3,26 lysår.

Hastigheter

Hastigheter til stjerner og galakser kan man finne ved å studere spektrallinjene i lyset de sender ut. Mønsteret av spektrallinjer gjør at man kan identifisere elementene som sender ut lyset. Spektrallinjene kan være dopplerforskjøvet mot kortere eller lengre bølgelengder i henhold til formel 1.8. Formelen kan omskrives til formel for *blåskift* eller *rødskift*

$$z = \frac{f_0 - f}{f} \approx \beta \quad (11.1)$$

der f er observert frekvens, og f_0 er utsendt frekvens. Uttrykket blir tilnærmet lik hastigheten for hastigheter mye mindre enn lyshastigheten. I tillegg til å gi informasjon om en galakses hastighet, kan man også studere rotasjonshastigheter i stjernesystemer som spiralgalakser på denne måten.

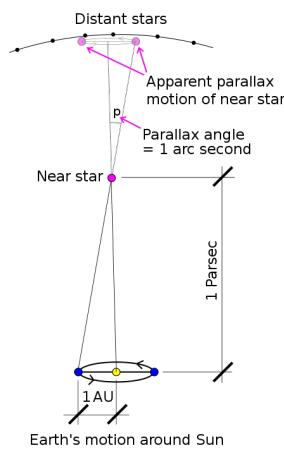
Tid måles ofte i dager, altså lengden av et jordisk døgn, 86400 sekunder.

11.2 Hubble-ekspansjon

Hvorfor er det mørkt om natten?

Dette kan virke som en merkelig introduksjon til denne seksjonen, men la oss anta at universet har uendelig utbredelse og er stabilt og statisk, slik at de store stjernesystemene ligger i ro, og er jevnt fordelt i det uendelige universet. Da påpekte astronomen Heinrich Olbers i 1823 at himmelen burde være like lys som en gjennomsnittlig stjerne. Uansett i hvilken retning man ser burde man nemlig finne en stjerne, siden det fins uendelig mange stjerner! Denne inkonsistensen med observasjon kalles for Olbers' paradoks. Det er helt åpenbart noe galt med hypotesen om at universet er uendelig med uendelig mange stjerner i ro på himmelen.

Den amerikanske astronomen Edwin Hubble studerte hastigheter og avstander til fjerne galakser. Dette ble mulig fra omtrent år 1920, da et nytt, stort, teleskop ble tatt i bruk ved Mount Wilson Observatory i California. Mens tidligere observasjoner stort sett var begrenset til stjerner i vår egen galakse (Melkeveien) det ble nå mulig å studere andre galakser. Hubble beregnet avstand og rødskift (og dermed hastighet) til galaksene og fant at det var en korrelasjon: Jo mer fjerntliggende galaksen er, jo hurtigere fjerner



Figur 11.1: Definisjon av lengdeenheten Parsec. (Figur fra engelsk Wikipedia: Strain og Booyabazooka). Stjernen 'Near star' ser ut til å ha flyttet på seg fra den ble observert i desember til den ble observert i juni. Posisjon er observert relativt til en bakgrunn av andre stjerner som ligger så langt borte at de observeres som stillestående. Forskjell i vinkel som retningen til stjernen danner med bakgrunnen gir informasjon om avstanden til stjernen. Om stjernen tilsynelatende har flyttet mye på seg så ligger den nærmere enn når den tilsynelatende har flyttet lite på seg. Siden vi kjenner radien til solbanen og måler 'Parallakse-vinkelen', så kan vi beregne avstanden til stjernen

den seg fra oss. Han tilpasset observasjonene til en enkel rettlinjet lov som beskrev hastighet som funksjon av avstand, Hubbles lov

$$v = H_0 D \quad (11.2)$$

Størrelsen H_0 kalles for Hubbles konstant. Denne akselerasjonen oppgis gjerne til å ha en verdi på 70 km/s/Mparsec, noe som betyr at en stjerne som er en Mparsec unna fjerner seg med en hastighet på 70 km pr. sekund. Legg merke til at denne økende hastigheten ikke er en akselerasjon i m/s². Siden hastigheten til galaksene øker med avstand blir enhheten (m/s)/m, altså dimensjonsmessig s⁻¹.

Har H_0 samme verdi for alle avstander? Saul Perlmutter og samarbeidspartnere satte igang et stort prosjekt for kartlegge rødskiftet til fjerntliggende *supernovaer*. Disse er for fjerntliggende til at avstanden kan måles med parallakse. Mange stjerners utvikling kulminerer i en voldsom eksplosjon som manifesterer seg som en ny, sterkt lysende stjerne på himmelen. Lysstyrken på disse stjernene er godt kjent, og omtrent den samme for alle supernovaer. En supernova kalles for en 'Standard Candle'. Dermed kan lysstyrken som observeres benyttes til å bestemme avstanden til supernovaen, idet det forventes at observert lysstyrke avtar som $1/r^2$, der r er avstanden. Nå er mange slike supernovaer kartlagt, og figur 11.2 viser avstand mot rødskift. Vi ser at Hubble lov gjelder for små rødskift. Rødskiftene øker med økende avstand, men for relativistiske hastigheter etterhvert et det ingen enkel sammenheng med hastighet. Men både rødskiftet og avstandsparameteren kan fortsatt estimeres fra data.

Det ser også ut til at ingen retning peker seg ut i ekspansjonen. Det er ikke slik at stjerner og galakser som befinner seg på en del av himmelen er mer rød (eller blå)-skiftet enn stjerner i en annen retning. Vi befinner seg i et referansesystem der ingen retning peker seg ut i forhold til hastighetene og den kosmiske bakgrunnstrålingen (som beskrives nedenfor). Befinner vi oss i ro i universets sentrum? Det kan vi ikke vite..det første vi lærte i denne boka var at ingen referansesystemer peker seg ut. Men vårt referansesystem er 'co-moving' (for å bruke det engelske uttrykket) med bakgrunnstrålingen.

11.3 Λ - CDM modellen

Den mest aksepterte modellen for universets utvikling kalles ' Λ - Cold Dark Matter - modellen. Den bygger på Einsteins generelle relativitetsteori med en kosmologisk konstant Λ lagt til, og en hypotese om at det fins en mengde masse i universet som bare manifesterer seg gjennom gravitasjonskraften, og

som har treghet, slik at de kan ha lave hastigheter. Modellen har sterkt støtte i observasjoner, og vi skal forsøke å forklare ingrediensene i teorien.

Generell relativitetsteori er en geometrisk beskrivelse av et rom som krummer seg rundt objekter med masse. Når massetettheten endres, så endres også de geometriske parametrene som beskriver rommet. Man innfører en *skala-parameter*, $R(t)$, som er slik at ekspansjonen passer med Hubbles lov idag. (I Newtonsk fysikk er $R(t)$ avstanden fra et tenkt sentrum som materien beveger seg ut fra) Men H_0 blir en funksjon av tiden fra universets skapelse. Men en slik modifikasjon er det mulig å skrive ned Friedmann's ligninger, ([25] og [26] \dot{R} er hastighet og \ddot{R} er akselerasjon).

$$H^2 \equiv \left(\frac{\dot{R}}{R} \right)^2 = \frac{8\pi G_N \rho}{3c^2} - \frac{kc^2}{R^2} + \frac{\Lambda c^2}{3} \quad (11.3)$$

og

$$\ddot{R} = \frac{\Lambda c^2}{3} - \frac{4\pi G_N}{3c^2}(\rho + 3p) \quad (11.4)$$

Her antas det at tettheten, ρ er den samme i hele universet, at universet er homogen og isotrop. Grunnen til at jeg har skrevet ned disse ligningene er at de viktigste parametrene i den mest aksepterte kosmologimodellen inngår: 'Λ-CDM'-modellen - 'Lambda - Cold Dark Matter'. Her er variablene:

- G_N er Newtons gravitasjonskonstant
- ρ er universets massetetthet. Vi må merke oss at ligningene gjelder for en uniform tetthet i hele universet. Om det verken fins mørk materie eller strålingenergi, så er dette rett og slett tettheten til vanlig materie som har masse (hovedsakelig protoner og nøytroner i dagens univers).
- k er en krumningsparameter som forteller noe om geometrien i universet. Om $k = 0$ kalles universet for 'flatt'. Om $k = +1$ så vil universet etterhvert trekke seg sammen og kollapse igjen. Om $k = 0$ eller -1 vil universet eksplandere evig.
- Λ er 'den kosmologiske konstanten'. Den ble opprinnelig innført av Einstein for å gjøre universet stabilt, altså at det verken skal implodere eller utvide seg i all evighet. Han innførte Λ som en 'korreksjon' til dynamikken slik den framstår på venstre side i ligninger 11.3 og 11.4. I analogi med ligningen for akselerasjon p.g.a. gravitasjon $a = G_N M / r^2$ kan man si at Λ ble en korreksjon til akselerasjonen. Men nå tolkes heller som en del av *kilden* til akselerasjon, og plasseres derfor på høyre side av likhetstegnet. Siden ligningen dreier seg om energi, så er Λ

med og definerer energiinnholdet i universet. Men det er en merkelig form for energi. Ligning 11.4 tilsier at en positiv verdi av Λ gir en frastøtnings-'kraft' mellom objektene i universet (eller en utvidelse av selve rommet som de massive objektene befinner seg i).

- p er en parameter som betegnes som trykk. Det må være snakk om 'indre trykk'. Trykk er jo kraft pr. areal, noe som dimensjonsmessig er det samme som energitethet. I termodynamikken kan vi lese at 'indre trykk' forteller noe om hvordan et systems indre energi (gjerne betegnet med symbolet U) endrer seg ved en volumendring. Dette kan være både positivt og negativt. Dersom bestandlene i universet oppfører seg som en ideell gass, så er den termodynamiske energien gitt som $U = \frac{3}{2}NkT$, altså kun en funksjon av temperaturen, og ingen avhengighet av volumet, så 'indre trykk' er lik null for denne delen. Den delen som ikke endres ved volumendring kalles materiedelen. Og så er det en komponent som endres ved volumendring. Den kosmiske bakgrunnstrålingen er det viktigste bidraget til dette trykket. Som vi har sett, så viser ligning 7.76 at energien i den sorte strålingen er direkte proporsjonal med volumet for gitt temperatur.

Om Newtons gravitasjonsteori gjaldt uten modifikasjoner eller tillegg, så ville bare det første ledet vært med i ligning 11.3¹. Dette handler om ekspansjon eller kontraksjon av objekter fra et gitt sentrum i et uendelig stort rom.

Vi må også merke oss at Newtons lover ikke tillater et statisk univers. Om alle galakser starter opp i en tilstand i ro, så vil gravitasjonskraftene sørge for at de ubønnhørlig trekkes mot hverandre til en slags gravitasjonell kollaps. Om ekspansjonen er rask nok, over en unslippelseshastighet, så vil man alltid ha en viss utoverrettet bevegelse av massene i universet. Hvis universet bare inneholder materie, så vil man få $R(t) \propto t^{2/3}$. Om all materie ble skapt i et stort smell så gir Newtonsk fysikk at rosinene i bolledeigen fjerner seg fra hverandre i det uendelige, men med noe redusert hastighet. (*Utenfor* bolledeigen er -i alle fall forfatterens oppfatning at- det tredimensjonale rommet er tomt i denne klassiske forståelsen av et univers som startet med et stort smell).

Einstiens gravitasjonsteori gir ligninger som oppfører seg på samme vis, nemlig at et univers som er statisk i utgangspunktet vil kollapse. I tillegg handler teorien om ekspansjon av *selve rommet*. Skalaparameteren $R(t)$ beskriver ikke bare hvordan galakser fjerner seg fra hverandre i rommet, men

¹Ref. [25] forklarer hvordan ligningen utledes i dette tilfellet. Man velger et gravitasjonspotensial med nullnivå i det uendelig fjerne, og en sentralsymmetrisk distribusjon av materie

også hvordan selve rommet utvider seg! Einstein likte ikke at universet var ustabilt, og han innførte Λ for å lage et statisk univers. Det var Friedman som viste at ligningene som utledes fra den generelle relativitetsteorien for å beskrive universets utvikling (lign. 11.3 og 11.4) gjelder uansett verdi av Λ . Etter at han ble kjent med Hubbles' ekspansjonsdata skal Einstein ha angret på at han innførte en kosmologisk konstant, noe han skal ha omtalt som 'the biggest blunder in my life'.

Friedmanns ligninger beskriver universets ekspansjon ved hjelp av forskjellige energibidrag til denne. Vi ser at en positiv Λ vil bidra til at universet aksellererer. Det er dette bidraget som kalles for mørk energi. Men det vil balanseres av tilstedeværelse av materie, gjennom parameteren ρ , og stråling, gjennom parameteren p .

Man definerer en *kritisk tetthet*, ρ_c , som er slik at $\Lambda = 0$ når det ikke er noen krumning i universet, altså $k = 0$:

$$\rho_c = \frac{3c^2 H^2}{8\pi G_N}$$

Så defineres en *kosmologisk tetthetsparameter*,

$$\Omega_{tot} = \frac{\rho}{\rho_c}$$

Denne tetthetsparameteren har flere komponenter, ikke bare universets masse. Den dekomponere slik:

$$\Omega_{tot} = \Omega_m + \Omega_r + \Omega_V$$

Her er Ω_m den delen som forklares med masse, som fermioner og ikke-relativistisk, mørk materie. Ω_r er andelen som gir et indre trykk (som fotoner), mens Ω_V er andelen som kommer fra den kosmologiske konstanten. Indeksen V har fått sitt navn fordi denne energien ofte kalles for vakuumenergi.

Observasjoner støtter hypotesen om at det fins en frastøtende vakuumenergi. I figur 11.2 (nederst) ser vi observasjoner av supernovaer ved høye rødskift gir støtte for at en stor andel av energien i universet er knyttet til den kosmologiske konstanten. I Λ -CDM modellen ser det ut til at universet ekspanderer med akselererende hastighet!

Det som passer best med observasjon pr. idag er omrent $\Omega_m = 0,3$ og $\Omega_V = 0,7$. Ω_r er svært liten, og krumming, k , er nær null (Siden vi har kosmisk bakgrunnstråling, så kan ikke Ω_r være eksakt null), slik figuren antyder.

Observasjoner ved svært store rødskift

De satellittbaserte instrumentene observerer galakser med svært høye rødskift, der bølgelengdene er dopplerforskjøvet til å være radiobølger. Siden galakse-ne er så langt unna, betyr det samtidig at vi observerer galakser som ble laget for svært lenge siden. Vi får altså innsikt i universets utvikling ved å studere disse galaksene. James Webb teleskopet har observert galakser som er så gamle at det spekuleres i om modellen for universets utvikling må revurderes (se omtale i neste seksjon).

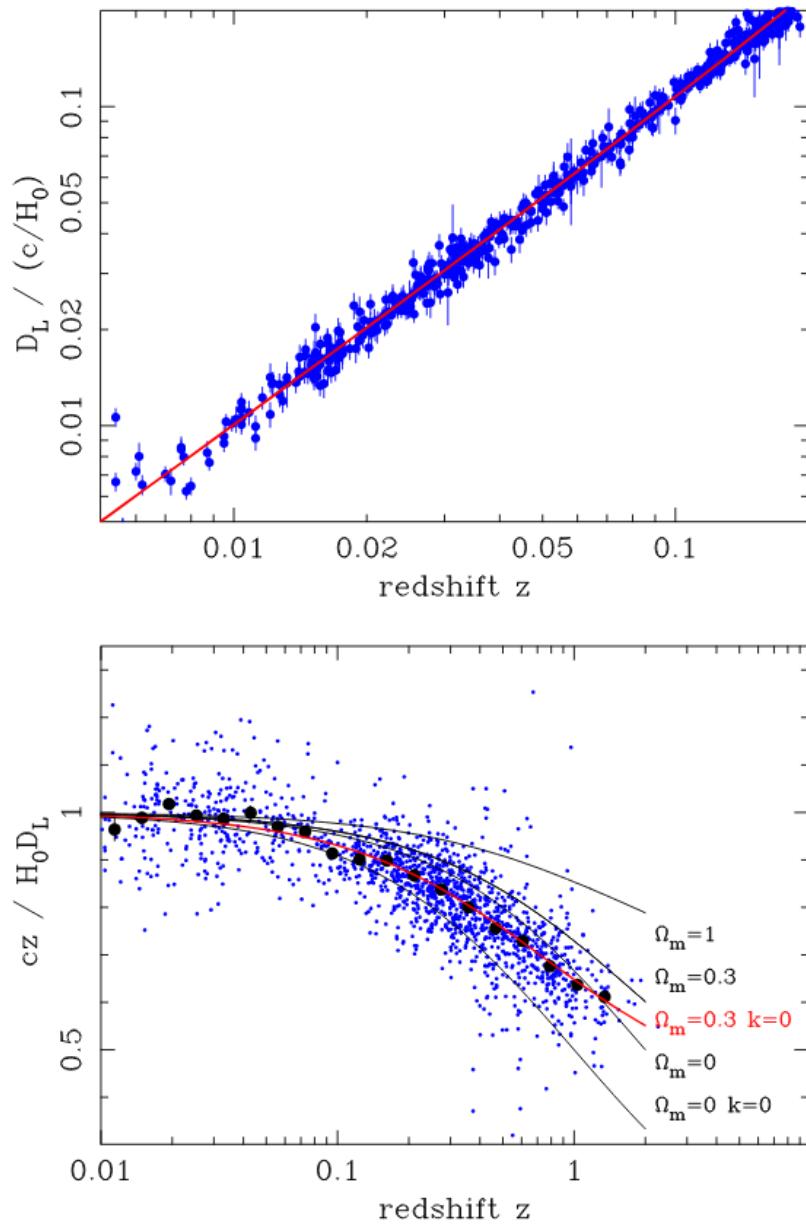
Mørk materie

Når man prøver å gjøre rede for materien i stjerner og galakser skulle man tro at man endte opp med en mengde svarende til $\Omega_m = 0,3$. Dette er ikke tilfelle. Den synlige materien mener man at utgjør kun 15% av dette. Resten er materie man ikke vet hva er! Det fins ingen kjente måter å observere den mørke materien på, for det fins ingen stråling som kan assosieres med den.

Hvorfor tror man at denne materien eksisterer? Eksistensen er indirekte påvist på flere måter.

1. Den sveitsiske astronofysikeren Fritz Zwicky studerte 'klumper' av fjerne galakser på 1930 tallet, og kunne ikke forklare det han så uten å innføre mer materie enn det han kunne observere.
2. Fra slutten av 1930 tallet har rotasjonskurver til spiralgalakser vært studert. på 1970 studerte astronomen Vera Rubin dette svært nøye. Rotasjonen i galaksenes ytterkanter var mye raskere enn det som kunne forklares ved hjelp av den synlige materien. Men man kan forklare observasjonene dersom mørk materie roterer med spiralarmene.
3. Gravitasjonslinser: En rekke galakser og stjerner observes som ringer fordi lyset som kommer fra den avbøytes rundt en klump med mørk materie som ligger mellom galaksene og jorda.

Hva består den mørke materien av? Er det en ny type partikler som ikke er del av dagens Standardmodell? En mye studert mulighet for utvidelse kalles for Supersymmetri (SUSY). Her skal det finnes en 'partner' for hver kjent partikkkel. For hvert fermion, (kvarker og leptoner) skal det finnes et boson (skvarker og sleptoner). De kjente bosonene skal ha fermioniske partnere. Hvis vi har en supersymmetrisk bevaringslov (kalt 'R-paritet'), så skal den letteste supersymmetriske partikkelen være stabil, og er dermed kandidat for mørk materie. Om det er en viss vekselvirkning mellom våre kjente partikler



Figur 11.2: Avstand som funksjon av rødsiktig for supernovaer (fra [26]). I det nederste plottet er avstanden dividert med den lineære trenden gitt av Hubble's lov. Da vises hvordan sammenhengen ikke lenger er lineær ved høye rødsikte. I Λ -CDM modellen kan man forutsi hvordan denne sammenhengen må være for gitt innhold i universet. De svarte punktene viser median av observasjonene for forskjellige rødsikte, og linjene viser forutsigelser av trenden for forskjellige materieandeler og geometrier av universet

og supersymmetriske partikler, så kan det være mulig å lage supersymmetriske partikler i kollisjoner med høy energi, slik man har ved CERNs LHC. Søk etter supersymmetri (og andre nye fenomener) er et stort fagfelt innen partikkelfysikk. Til nå har man ikke funnet noe. Isteden flyttes de nedre grensene for hvor stor masse slike partikler må ha stadig oppover.

En annen hypotese vil være tunge partnere til nøytrinoene i Standardmodellen. Det fins mange andre forslag, som vi ikke skal beskrive her. Den klart mest deprimerende muligheten vil være om den mørke materien slett ikke vekselvirker med våre kjente partikler (bortsett fra gjennom gravitasjon). Da vil vi aldri finne ut hva den mørke materien består av.

Til slutt må vi nevne at det og spekuleres i om Newtons gravitasjonslov (kraft proporsjonal med $1/r^2$) gjelder for alle avstander. Kanskje den må modifiseres ved svært lange avstander, i teorier kalt MOND (Modified Newtonian Dynamics). Målet her er å beskrive fenomener som rotasjonskurver uten å innføre mørk materie. Det er ikke helt utelukket at noe slikt er mulig, selv om det pr. idag ikke fins noen enhetlig forklaring på alle observasjoner i en slik teori.

11.4 Universets utvikling

Hva forteller det oss at objektene i universet fjerner seg fra oss med en hastighet som øker med avstanden? Har universet alltid ekspandert, og vil det alltid fortsette å ekspandere? Og hva er det som ekspanderer?

I Einsteins generelle relativitetsteori ser man på gravitasjonskraften som en manifestasjon av at rommet krummer seg rundt objekter med masse. Den er en teori for geometrien i rommet, og hvordan den utvikler seg. Ofte sammenlignes dette med en bolledeig som hever seg altså øker i volum. Galaksene som fjerner seg fra hverandre med rosiner i en bolledeigen. Utvidelsen dei- gen gjør at rosinene fjerner seg fra hverandre. Jo større avstand mellom to rosiner, jo hurtigere beveger de seg fra hverandre.

Med en slik analogi, så melder følgende tre spørsmål seg umiddelbart:

1. Hva befinner seg *utenfor* bolledeigen?
2. Hvordan ekstrapoleres rosinenes bevegelse bakover i tid?
3. Hvordan ekstrapoleres rosinenes bevegelse framover i tid?

11.4.1 Det store smellet og kosmisk bakgrunnstråling

En ting man kan si om dagens univers, er at det er svært tomt! Det er svært stor avstand mellom galaksene, og mellom stjernene i galaksene. Men la oss

se på spørsmål 2: Om vi går bakover i tid så må universet - eller i alle fall objektene som fyller de delene av universet som vi kan se - ha vært mindre, og massetettheten tilsvarende større. Om man går tilbake langt nok i tid, så virker det som at alt var samlet på et veldig lite område. Tiden det har gått siden alt var samlet i et 'punkt' er omtrent 13,7 milliarder år.

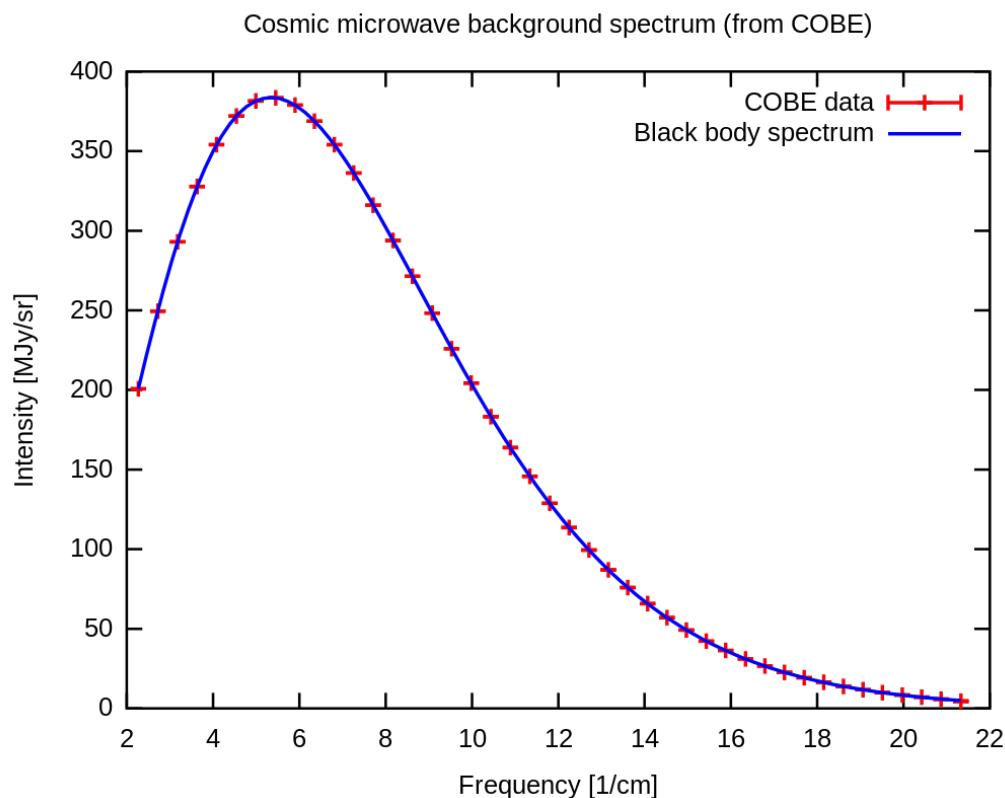
Var det varmt da det varmt? Vi må nesten anta et universet som sådan ikke har fått tilført energi utenfra under ekspansjonen. I lys av termodynamikkens første lov, ligning 7.4, må dermed universet ha vært *mye* varmere på den tiden, siden volumet var mye mindre! Vi har lært at alle legemer med en temperatur også sender ut sort stråling. Det viser seg at hele universet bader i slik sort stråling! Dette ble oppdaget av Penzias og Wilson i 1965 ved radioastronomi. I radioastronomi studerer man elektromagnetisk langbølget stråling, i mange bølgelengdeområder. Allerede på 1940-tallet hadde man observert slik radio'støy' uten å kunne forklare den, men i 1965 fikk man altså forklart fenomenet som var opphav til støy i alle radioer og fjernsynsapparater som dengang tok imot sendinger som elektromagnetisk stråling i lokale antenner. Strålingen er i mikrobølggeområdet, med typisk bølgelengde på 2 mm. Det målte spekteret svarer til en temperatur på 2,73 K, og passer perfekt med Plancks strålingslov (se fig. 11.3). På grunn av energibevaring, så må det ha vært høyere energitetthet i strålingen i tidligere tider, da det synlige universet var mindre. Temperaturen i strålingen må ha vært større enn nå. Denne betraktingen tilsier at universet var svært varmt da det varmt!

Den kosmiske bakgrunnsstrålingen tas til inntekt for at universet var skapt i et stort termodynamisk smell. Siden strålingen passer så perfekt med Plancks strålingslov, så må også universets tetthet ha vært svært uniform. Uniform massetetthet er en forutsetning for Friedmanns ligninger, som dermed kan benyttes. Men massetettheten er ikke helt uniform. Materien har jo klumpet seg til galakser og stjerner. Avstanden mellom klumpene kan man faktisk forutsi ved å studere ørsmå variasjoner i temperaturen av den sorte strålingen. Motsatt: Med målinger av variasjonene i temperatur så kan man si noe om strukturen av massefordelingen i universet. Det viser seg at temperaturene har et gjennomsnittlig avvik fra middelverdien på rundt $20 \mu\text{K}$. Noen steder i universet er altså litt varmere enn andre steder.

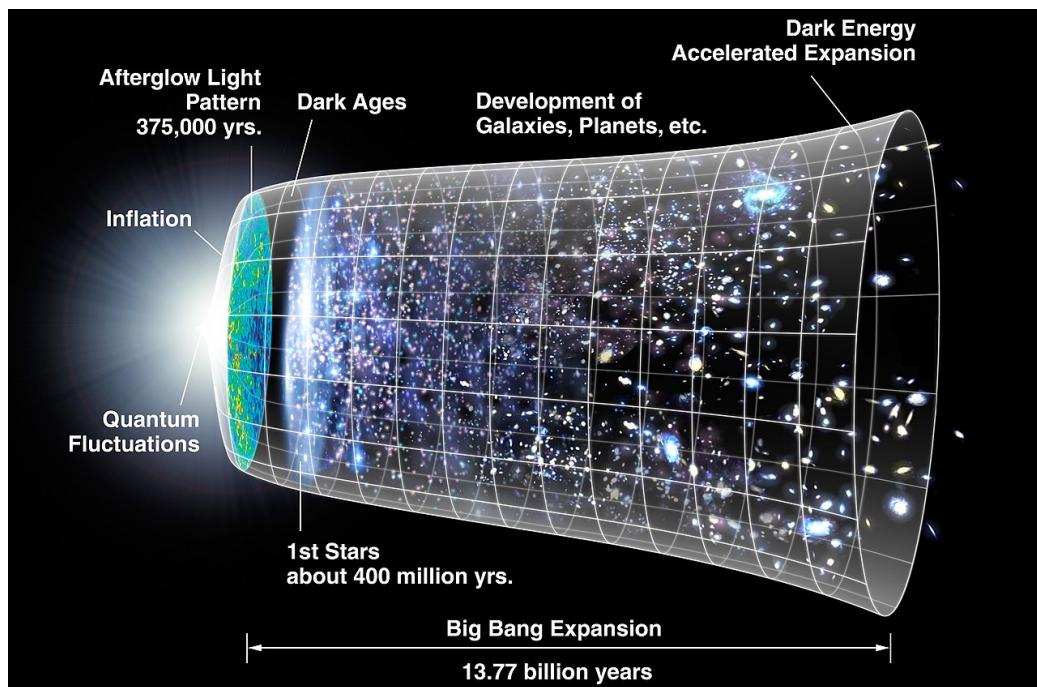
Om man ekstrapolerer til universets 'begynnelse' så må det altså ha vært et svært varmt sted, faktisk så varmt at all materie kun eksisterer som en varm 'suppe' av stråling og elementærpartikler.

11.4.2 Inflasjon (oppblåsing)

De første brøkdelene av et sekund etter smellet antar man at det var *inflasjon*, en voldsom ekspansjon av universets rom-tid. Hvis energitetten er



Figur 11.3: Spekter av kosmisk bakgrunnstråling. Formen følger det som forventes utfra Planck's strålingslov med svært god presisjon, og man finner at universets temperatur for tiden er på 2,73 K. Datapunktene vises som røde kryss, men usikkerhetene er for små til at de kan vises i figuren! (Fra Wikipedia: By Quantum Doughnut - Own work, Public Domain, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=12958270>)



Figur 11.4: Universets utvikling. Fra Wikipedia (NASA/WMAP Science Team - Original version: NASA; modified by Cherkash). Det er klistret inn et 'bilde' av den kosmiske bakgrunnstrålingen på den tiden da universet var strålingsdominert. Satellitteksperimentet WMAP har produsert dette kartet over strålingstemperaturer. Planck-satellitten har laget et enda mer detaljert kart.

svært stor, så dominerer den første termen i Friedmanns ligning 11.3. Da får man en eksponentiell vekst i R , $R(t) \propto e^{Ht}$ med $H = \sqrt{8\pi G\rho/(3c^2)}$. Denne muligheten var først påpekt av den amerikanske fysikeren Alan Guth i 1981. Konstanten H var stor og ekspansjonen var svært rask i begynnelsen siden tettheten var stor. Man regner at inflasjonsperiodens varighet var noe slikt som 10^{-32} sekunder (iflg. Wikipedia)! Vi ser (fra ligning 11.3) at den kosmologiske konstanten også kunne ha bidratt til inflasjon, men en regner at materiedelen dominerte.

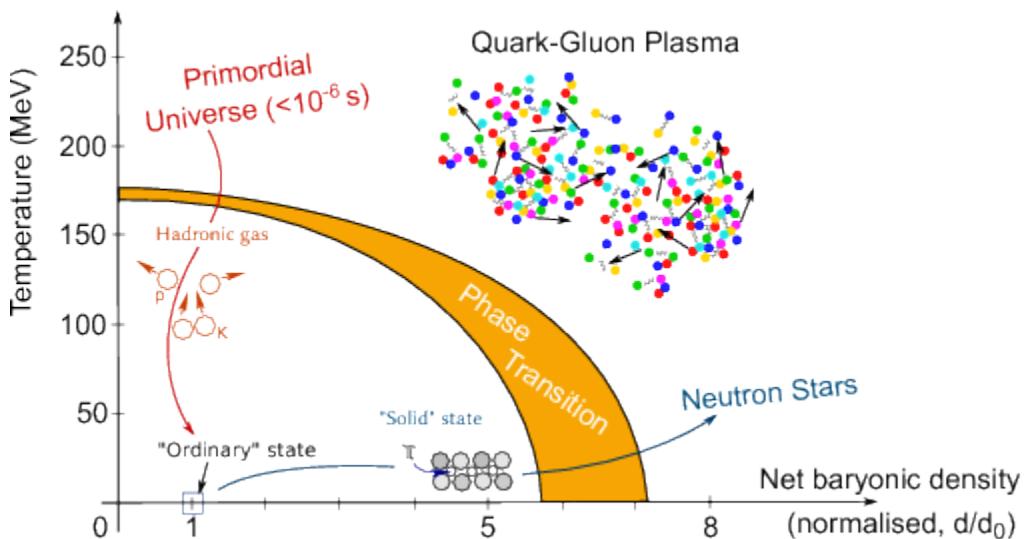
11.4.3 Kvark-gluon plasma

Etter at inflasjonsperioden var over begynte det å dannes materie, både den materien som ble til den 'baryoniske' materien vi kjenner idag, og den mørke materien. Den baryoniske materien eksisterte som et plasma² av kvarker og gluoner de første mikrosekundene av sin eksistens. I denne suppen gjelder ikke reglene for fargenøytralitet siden energitetheten er så høy at eventuelle bundne systemer splittes opp igjen helt umiddelbart. Det har vist seg mulig å lage små eksempler på kvark gluon plasma her på jorda! Ved Cerns LHC akselererer man tunge atomkjerner, f.eks. to blykjerner, som kolliderer med massesenterenergier på flere TeV (10^{12} eV) pr. nukleon. Da er energitetheten i systemet av de to kjernene så høy at de eksisterer som et plasma av kvarker og gluoner. Ved å studere plasmaet i eksperimenter som ALICE ved LHC så håper man å få innsikt i universets kvark-gluon plasma oppførte seg og i mekanismene som førte til at det ble skapt baryoner (se figur 11.5).

11.4.4 Skapelse av baryoner

Etter omtrent 10 mikrosekunder var temperaturen lav nok til at bundne systemer med kvarker overlevde. Aller først må de ha vært skapt mesoner, protoner, nøytroner, antiprotoner og antinøytroner. Det er i utgangspunktet stor symmetri mellom reaksjoner mellom partikler og de tilsvarende reaksjonene med antipartikler. Men i overgangen fra plasmaet til et unvers fylt med protoner og nøytroner så må det ha vært en liten asymmetri mellom materie og antimaterie som har ført til overskudd av materie - den materien som fins i universet idag. Det antas at forholdet mellom antall protoner og antall antiprotoner var omtrent lik $(10^9 + 1)/10^9$ før annihilasjonsprosessene startet. Den sovjetiske fysikeren Andrei Sakharov har formulert tre nødvendige betingelser for at det observerte overskuddet av materie i vårt univers skal være mulig:

²Et *plasma* er et system av frie ioner og betegnes av mange som en fjerde aggregat-tilstand



Figur 11.5: Fasediagram for hadronmaterie. I det tidlige univers var det svært høy temperatur, og materien eksisterte som et plasma. Dette er et sted høyt opp på y-aksen. I tungionekollisjoner skaper man plasmaet ved å lage systemer med svært høy tetthet. (Fra CERN, ALICE-PHO-SKE-2015-002)

1. Det må ha eksistert reaksjoner som bryter bevaring av baryontall.
2. Det må være et brudd på såkalt CP-symmetri. Det er det samme som å si at det er en liten asymmetri mellom materie og antimaterie.
3. På et tidspunkt må reaksjoner ha funnet sted i et univers som ikke er i termisk likevekt, i en slags faseovergang (fra kvark-gluon plasmaet til baryon suppen).

I partikkelfysikkens standardmodell så fins det ikke brudd på baryontall. Dermed må man formulere utvidelser av modellen for å forklare overskuddet av materie. Men det er brudd på CP-symmetri i Standardmodellen. Dette er mulig når man har tre generasjoner av kvarkpar. CP-brudd er eksperimentelt påvist, og graden av asymmetri er målt. Det viser seg at den observerte asymmetrien er for liten til at den kan forklare mengden med materie i universet. Man tror at all antimaterie har annihilert med materie etter ca 3 sekunder, og de resterende baryonene er det som bygger opp universet av idag. Det er først etter at baryoner ble skapt at den sorte strålingen kunne 'unslippe'. Bakgrunnstrålingen vi ser idag kan derfor ikke fortelle oss så mye om kvark-gluonplasmaet. Men nøytrinoer burde kunne unslippe, så det spekuleres i om man kan lære noe om det tidlige univers ved å se etter nøytrinoer fra verdensrommet.

11.4.5 Skapelse av lette kjerner

Etter noen sekunder var temperaturen lav nok til at protonene og nøytronene eksisterte som partikler. Da var temperaturen omtrent 10^{10} K ($kT \approx 0,9$ MeV). Siden nøytronene er tyngre enn protonene, så er det en asymmetri i antallene, i omtrent henhold til Boltzmannfaktoren

$$\frac{N_n}{N_p} = e^{(m_p - m_n)c^2/kT} = e^{(938,3 - 939,5)\text{MeV}/kT}$$

Da vil det ikke lages nye nøytroner, så de kommer til å henfalle. Men noen av dem vi fusjonere og lage deuteriumkjerner, som igjen fusjonerer til Tritium og He-4 kjerner. Man mener at disse prosessene forklarer godt det observerte forholdet mellom antall 'oppinnelige' protoner og He-4 kjerner i universent, som er omtrent 4 til 1. For å lage tyngre elementer så må man enten få et proton til å fusjonere med en He-4 kjerne, eller fusjonere to He-4 kjerner. *men verken He-5 eller Be-8 fins, ikke engang som ustabile kjerner.* Dermed stopper fusjonsprosessen i det tidlige univers med Li-7 som tyngste element. Vi kan også nevne at ved en temperatur over ca 10^{10} K vil det også stadig dannes elektron-positron par fra fotonene i bakgrunnstrålingen, slik at det må ha vært mange elektroner til stede.

11.4.6 Dagens kosmiske bakgrunnstråling

Bakgrunnstrålingen var til stede gjennom kjerneprosessene beskrevet over, og lagde mange typer reaksjoner. Men omtrent 370 000 år etter det store smellet var materien så tynn at strålingen i det store og hele ikke reagerte lenger. Universet ble gjennomsiktig for denne typen stråling. Det er denne strålingen vi observerer som den kosmiske bakgrunnstrålingen idag.

11.4.7 Den mørke tiden, og dannelsen av stjerner og galakser

På omtrent samme tid som strålingen 'frigjorde' seg fra den kosmiske suppen, så var det kaldt nok til at elektroner kunne binde seg til kjerner. Det ble laget nøytrale atomer. I lang tid svevde disse omkring som tilnærmet frie, før gravitasjonskraften fikk dem til å samle seg og lage stjerner. Dette skjedde etter omtrent 400 millioner år. Etterhvert trakk stjernene seg sammen i galakser og vi fikk universet slik vi kjenner det idag. Med det nye James Webb teleskopet kan man faktisk se tilbake til den tiden, og man forsøker å identifisere så gamle galakser som mulig. Alderen bestemmes ved hjelp av rødskiftet i

spektrene. Iflg. modellen beskrevet her er det altså grenser for hvor gamle galaksene kan være, og observasjonene kan sette modellen på prøve.

Den kosmiske bakgrunnstrålingen gir også informasjon om hvordan galaksene har blitt dannet og hvordan de fordeler seg rundt om i universet. At strålespekteret er et tilnærmet perfekt svartlegemespekte betyr at galaksene er fordelt veldig jevnt omkring i hele universet. Men man har, målt ut spekteret i alle himmelretninger for å se etter små variasjoner i temperaturen (WMAP og Planck-satellittene). Det viser seg at det er ørsmå variasjoner i temperaturen. Strukturen av disse variasjonene som funksjon av retning gir informasjon om hvordan galaksene klumper seg og avstanden mellom dem, o.s.v. Det matematiske verktøyet for å analysere disse variasjonene består bl.a. av kulefunksjonene ($Y_{l,m}(\theta, \phi)$). Jo høyere l , jo hurtigere varierer temperaturen som funksjon av vinkel, og en finner at hovedbidraget til variasjonen svarer til l -verdier rundt 100. Dette svarer til en vinkelavstand mellom to varme områder på omtrent en grad.

11.4.8 Dagens og framtidens univers

En nøkkelfigur er fig. 11.2 b), der man forsøker å tilpasse parametrene i Friedmanns ligning til observasjon. For å få det til å passe trenger man som sagt både mørk materie og en frastøtende vakuumenergi. Det ser ut til at vakuumenergien er såpass stor at ekspansjonen vil akselerere i framtiden!

Universets geometri blir også testet gjennom krumningsparametene. Det er uvisst om $k = 0$ eller om vi har et lite avvik fra dette. Krumningen er også viktig for å forstå geometrien i universet. Den kan være 'åpen', $k < 0$, lukket, $k > 0$, eller 'flat', $k = 0$. I et lukket univers kan vi se på geometrien som en tredimensjonalflate på en firedimensjonal 'kule'. Reiser man langt nok i samme retning i et slikt univers så kommer man til slutt tilbake til utgangspunktet!

Observasjonen at universets størrelse ser ut til å akselerere, passer best med at den kosmoligiske konstanten, Λ er positiv. Det må finnes en frastøtende energi. Hva er opphavet til den? I partikkelfysikken mener man at det må være et 'skalarfelt', med en vekselvirkningspartikkel med spinn lik null. En av hypotesene har vært at det er feltet forårsaket av Higgspartikkelen som har gitt denne energien.

Partikkelhorisonten

Hvis partikler vekselvirker og vi faktisk observerer lys fra reaksjonene, så er det grenser for hvor langt unna de kan være i et univers som er 13.7 milliarder år gammelt. Denne grensen kalles for partikkelhorisonten. Siden

selve rommet har eksplandert, og spesielt hurtig under inflasjonstiden, så er denne horisonten mye lengre unna enn 13,7 milliarder lysår. Mange mener isteden at den er rundt 47 milliarder lysår. Dette blir da grensen for hvor langt unna objekter som i teorien kan observeres, faktisk kan ligge. Eksakte verdier av både dette og universets utstrekning vil avhenge av hva slags kosmologisk modell man studerer. Vi får også en 'forklaring' på hvorfor det er mørkt om natten. Det er grenser for hvor fjerntliggende kilden til lyset vi observer kan ligge. Dessuten har fjerntliggende lys blitt rødskiftet til langt utenfor det synlige området!

11.5 Enhetsteori og Planck-enheter

Partikkelfysikken har som mål å beskrive naturens oppbygning på en så rasjonell måte som mulig. Hvor mange fundamentale byggestener fins det? Kan alle krefter i naturen sammenfattes i én teori? Det vil i så fall være nødvendig å lage en kvanteteori for gravitasjon, med en fundamental vekselvirknings-partikkel. Max Planck spekulerte i hva slags størrelsесordener som kunne definere grensene for størrelsen av naturkonstantene:

Det later til at universet er bygd rundt et lite antall naturkonstanter. Max Planck spekulerte i et system for måle-enheter bygd opp rundt disse konstantene. Naturkonstantene det er snakk om er Newtons gravitasjonskonstant, Plancks (reduserte) konstant, lyshastigheten, og Boltzmanns konstant. I den siste revisjonen av SI enhetene har man tatt utgangspunkt i eksakte verdier for tre av disse konstantene for å definere alle andre enheter. Men i tillegg trengs Newtons gravitasjonskonstant for å lage 'naturlige' enheter som også beskriver gravitasjon. Hva om man kombinerer konstantene på enklest mulig måte for å definere 'grunnenheter'? Ved dimensjonsanalyse konstruerer man da en enhet for lengde, Plancklengden:

$$l_P = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} = 1,616 \times 10^{-35} \text{m}$$

Dette blir den minst tenkelige avstand for vekselvirkninger.

Planckmassen blir

$$m_P = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} = 2,176 \times 10^{-8} \text{kg}$$

Dette svarer til omtrent 10^{19} protonmasser, og anses å være den størst tenkelige masse som noen elementærpartikkel kan ha (inkludert kraftformidlere).

Ut fra dette kan vi konstruere Plancktettheten

$$\rho_P = \frac{c^5}{\hbar G^2} = 5,155 \times 10^{96} \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

Dette blir tettheten av universet da det smalt (Big Bang).

Til slutt har vi Planck-tiden

$$t_P = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^5}} = 5,39 \times 10^{-44} \text{ s}$$

Dette blir den kortest tenkelige tiden etter universets store smell.

I kapittelet om elementærpartikkelfysikk har vi snakket om tre fundamentale krefter, elektromagnetisme, svak kjernekraft og sterk kjernekraft. Videre har man i standardmodellen etablert en sammenheng mellom elektromagnetisme og svak kjernekraft. Kreftenes styrke viser seg faktisk å være nokså like! Det er rekkevidden til de to kreftene som er forskjellige. Den sterke kraften, slik den er beskrevet i QCD er heller ikke fantastisk mye sterkere enn de to andre. Den elektromagnetiske koblingskonstanten har verdi $\alpha \approx 1/137$.³ Den sterke koblingskonstanten α_s varierer fra en verdi lik omrent 0,1 ved korte avstander (mindre enn ca 0,1 fm), og øker til omrent 1 for avstander over 1 fm, før kvarkene og gluonene splittes opp i nye kvark-antikvark par og danner mesoner og baryoner.

Det er når man ønsker å lage en kvanteteori for gravitasjon at det er relevant å spekulere i om Planck-enhetene er 'naturlige'. Vil man finne en kvanteteori for gravitasjon med en dimensjonsløs koblingskonstant? Her nyter det ikke å sette inn en massiv vekselvirkningspartikkel, slik man har gjort for svake vekselvirkninger, for gravitasjon har jo uendelig rekkevidde! Dessuten er den svært mye svakere enn de tre andre kreftene. Men hvordan oppfører gravitasjon seg under ekstreme forhold (svært høye tettheter eller temperaturer)? Vil gravitasjonen omformuleres til en kvanteteori? En slik kvanteteori er ikke funnet, men to ting er klart: En slik teori må gå mot Newtons teori for makroskopiske avstander, og være konsistent med Einsteins generelle relativitetsteori for høye masser og tettheter.

I partikkelfysikken har man gjort gigantiske framskritt i forståelsen av materiens mest fundamentale oppbygning slik det framstår her på jorda. Dette er oppsummert i Standardmodellen. Men det er veldig mange ingredienser i universet som krever en mer omfattende modell. En fullgod modell ville bl.a. forklare hva mørk materie er, hva den mørke energien er, forklare asymmetrien mellom materie og antimaterie, og forhåpentligvis kunne inkorporere gravitasjonsteorien i en enhetlig felt-teoretisk beskrivelse av kreftene i naturen. Det er med andre ord mye å ta fatt i for framtidige generasjoner av fysikere!

³Ordet 'koblingskonstant' er misvisende, for den er ikke konstant. For svært korte avstander øker styrken, og må α korrigeres mot høyere verdier.

Tillegg A

Noen formler og integraler

$$\int_0^\infty x^n e^{-kx} = \frac{n!}{k^{n+1}} \quad (\text{A.1})$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-a^2 x^2} dx = \frac{n!}{2a^{2n+2}} \quad (\text{A.2})$$

$$\int_{-\infty}^\infty x^{2n} e^{-a^2 x^2} dx = \frac{(2n)! \pi^{1/2}}{n! a (2a)^{2n}} \quad (\text{A.3})$$

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx = 2,315 \quad (\text{A.4})$$

$$\int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6} \quad (\text{A.5})$$

$$\int_0^\infty \frac{x^{\frac{3}{2}}}{e^x - 1} dx = 1,783 \quad (\text{A.6})$$

$$\int_0^\infty \frac{x^2}{e^x - 1} dx = 2,404 \quad (\text{A.7})$$

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15} \quad (\text{A.8})$$

Tillegg B

Statistikk

Lys og materiepartikler (som f.eks. elektroner) kan behandles både som bølgepakker og punktpartikler. Når de ses på som partikler, er oppstilling nødvendig for å komme fram til størrelser som intensitet. Dermed kreves litt kjennskap til statistikk etterhvert som vi diskuterer fotoner i kapittel 2. Det står en del der, men vi oppsummerer også her.

La oss tenke oss at vi skal telle opp en serie måleutfall av for eksempel posisjonen av fotoner som passerer en spalt og treffer en skjerm. Treffene registreres i litt forskjellige posisjoner, noe som både kan skyldes unøyaktig måleutstyr og iboende unøyaktigheter slik vi kommer fram til i diskusjonen av fotoner.

B.1 Middelverdi og standardavvik

Dersom man skal finne en størrelse (en lengde, en tid, etc. etc.) med best mulig presisjon, så lønner det seg vanligvis å måle flere ganger, og ta gjennomsnittet av resultatene. Gjennomsnittet, eller *middelverdien* av målingene defineres slik:

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_N}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (\text{B.1})$$

der N målinger har gitt resultatene x_1, x_2, \dots, x_N .

Hvis det utføres et stort antall målinger så er det hensiktsmessig å dele målingene i grupper med like, eller tilnæmet like resultater. Dersom vi antar at vi har m forskjellige klasser av utfall (x_1, x_2, \dots, x_m) , og antall ganger vi har fått utfall x_i er f_i , så kan middelverdien skrives slik:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^m f_i x_i}{\sum_{i=1}^m f_i} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^m f_i x_i$$

der $\sum_{i=1}^m f_i = N$. Vi sier nå at vi har en *ordnet* måleserie. Det er da hensiktsmessig å presentere resultatene i et **histogram**.

Hva blir *usikkerheten* på vårt anslag av størrelsen? Som hjelp til dette må vi finne *standardavviket* av målingene. Dette er definert som:

$$s = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \quad (\text{B.2})$$

eller skrevet for et ordnet materiale

$$s = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^m f_i (x_i - \bar{x})^2}$$

For store N ser vi at dette er nær den gjennomsnittlige absoluttverdien av avviket fra middelverdien. En ny *enkeltmåling* av størrelsen vil falle innenfor ett standardavvik av den fundne middelverdi (altså i intervallet $(\bar{x} - s, \bar{x} + s)$) i omrent 68% av tilfellene når måleutfallene er gaussfordelte. Dette standardavviket oppgis som enkeltmålingens usikkerhet. Hvorfor dividerer vi med $N-1$ istedenfor med N ? Dette henger sammen med at vi *ikke vet* hva den egentlige verdien er, og at bare én måling ikke gir nok informasjon til å oppgi en fornuftig *statistisk* usikkerhet.¹

Ved beregninger kan det være fordeler ved å skrive standardavviket slik:

$$s = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 - N\bar{x}^2 \right)} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \left[N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2 \right]}$$

eller

$$s = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left[\sum_{i=1}^m f_i x_i^2 - N\bar{x}^2 \right]} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \left[N \sum_{i=1}^m f_i x_i^2 - \left[\sum_{i=1}^m f_i x_i \right]^2 \right]}$$

Da er det nemlig ikke nødvendig å gjennomføre beregningen av middelverdi før man går igang med beregning av standardavvik. Dette kan ha fordeler i PC-baserte beregninger, spesielt hvis en ønsker fortløpende oppdatering av middelverdi og standardavvik etterhvert som måleverdier leses inn. I seksjon 2.2.4 vises det hvordan man kommer fram til formlene over for en kontinuerlig

¹Vi kan selvsagt ha informasjon om måleinstrumentet som setter oss i stand til å si noe om måleusikkerheten til en enkeltmåling

beregning, og det presenteres en beregning av forventet standardavvik når den underliggende sannsynlighetsfordelingen er en boks med skarpe kanter.

Det er klart at usikkerheten, eller standardavviket på *middelverdien* \bar{x} , blir mindre og mindre ettersom vi øker antall målinger. Den blir

$$s_{\bar{x}} = \frac{s}{\sqrt{N}} \quad (\text{B.3})$$

Denne formelen kan utledes enkelt fra formel for feilforplantning som benyttes i eksperimentalfysikken.

Til slutt kan vi også anslå standardavvikets usikkerhet. Formelen for denne usikkerheten er

$$s_s = \frac{s}{\sqrt{2(N-1)}} \quad (\text{B.4})$$

Vi ser at den relative usikkerheten i standardavviket er gitt som

$$\frac{s_s}{s} = \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}}$$

Vi trenger altså over 50 målinger for at presisjonen på usikkerheten skal bli bedre enn 10%. Derfor angir man ofte usikkerhet med kun ett eller to signifikante siffer. Eksempel: Får man et måleresultat $x = 3,4345323$ på kalkulatoren, med beregnet usikkerhet 0,951233456 så skal man *aldri* oppgi resultatet som $x = 3,4345323 \pm 0,9511233456$. Istedent skal det stå

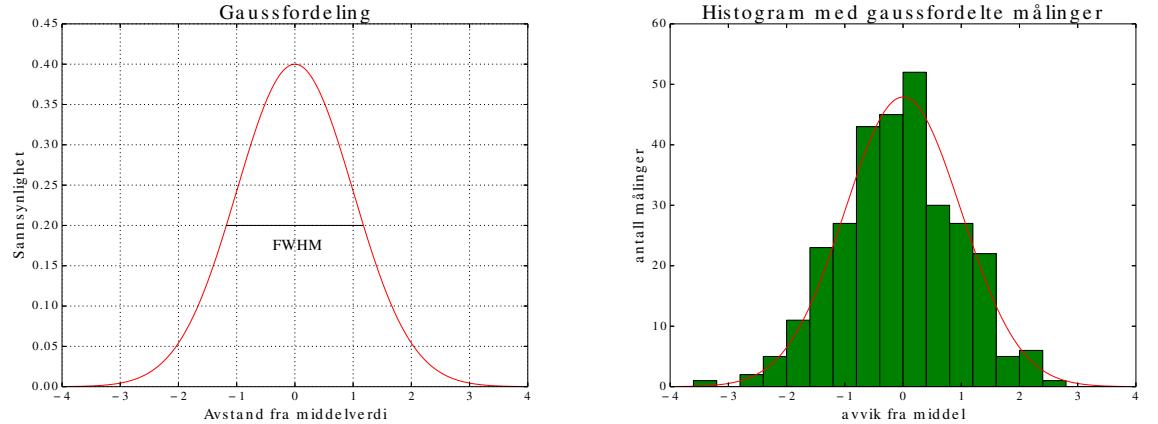
$$x = 3 \pm 1$$

eller

$$x = 3,4 \pm 1,0$$

B.1.1 Sammenhengen med sannsynlighetsbegrepet

Om man gjentar samme måling mange ganger så vil man vanligvis oppleve at de fundne verdiene klumper seg symmetrisk rundt middelverdien av målingen. Lager man et histogram som viser frekvensen av måleutfallene, så ser de ut som at det mest sannsynlige utfallet ligger svært nær middelverdien. Ut fra histogrammet kan man beregne sannsynligheten, $p(x)\Delta x$ for at en måling skal falle innenfor intervallet Δx som omfattes av en søyle i histogrammet. I svært mange tilfelle er det rimelig å anta at sannsynligheten for et måleutfall er proporsjonal med den teoretiske gaussfordelingen, også kalt normalfordelingen:



Figur B.1: a) Gaussfordeling med middelverdi 0 og standardavvik 1, b) Histogram med 300 tilfeldig genererte måleresultat som følger denne sannsynlighetsfunksjonen

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}} \quad (\text{B.5})$$

der σ er standardavviket av gaussfordelingen, anslått til s fra målingene slik det er beregnet fra formel 2.

Dersom man har mange måleverdier i en frekvensfordeling, så kan man enkelt anslå standardavviket ved å lese av fordelingens fulle bredde ved halv høyde (på engelsk forkortet til FWHM, Full Width at Half Maximum). Dersom verdiene er normalfordelte, så kan det vises at

$$s = \sigma = FWHM/2,36$$

Fig. B.1.1 illustrerer dette.

Hvis ikke annet er angitt, så oppgis usikkerhet ved å oppgi standardavviket. Men vi ser av fig. 1 at det er nokså sannsynlig at den sanne verdien man prøver å finne ligger utenfor ett standardavvik. Man definerer konfidensnivået (engelsk: *Confidence Level, C.L.*) som en spesifikasjon av sannsynligheten for at den sanne verdien ligger i et spesifisert intervall. Dette finnes ved å integrere sannsynlighetsfunksjonen i intervallet. For gaussfordelingen får man at ett standardavvik svarer til et konfidensnivå på 68% siden

$$\int_{-\sigma}^{+\sigma} p(x)dx = 0,68$$

der $p(x)$ er gaussfordelingen, ligning (B.5). Det er med andre ord 32% sannsynlighet for at den sanne verdi *ikke* ligger innenfor spesifisert usikkerhet.

Alternativt kan man angi usikkerhetsintervall med spesifisert konfidensnivå. I en del sammehenger benyttes usikkerhet med f.eks. 90% eller 95% *C.L.*. For normalfordelte observasjoner tilsvarer dette intervaller på henholdsvis $\pm 1,64$ og $\pm 1,96\sigma$.

B.2 Poissonstatistikk og -fordeling

I denne boka gjør vi også bruk av andre teoretiske sannsynlighetsfordelinger enn gaussfordelingen. Sannsynlighet for mynt eller kron ved myntkast følger binomialfordelingen slik vi har diskutert kapittelet om i statistisk fysikk. Vi diskuterer ikke dette videre her, men vi vil omtale *Poissonstatistikk*. Dette kan godt ses på som et særlig tilfelle av binomialstatistikk, der vi ikke har 50/50 fordeling av to mulige utfall. Istedent antas sannsynligheten for 'suksess' som veldig liten. Situasjonen vi kan se på er radioaktivt henfall, der midlere antall henfall pr. sekund skal finnes ved å telle antall henfall som finner sted i et gitt tidsintervall. Antall atomkjerner i kilden er svært stort, og alle atomene har samme sannsynlighet for å henfalle i intervallet, men det er bare noen av dem som faktisk gjør det. Teorien for at et gitt antall atomer faktisk henfaller i intervallet er beskrevet med en sannsynlighetsfordeling som heter Poissonfordelingen, gitt ved

$$p(n) = \frac{m^n e^{-m}}{n!} \quad (\text{B.6})$$

Denne funksjonen er definert for alle heltall, $n \geq 0$. Ved bruk av den såkalte Γ -funksjonen, så kan definisjonen av $n!$ ² utvides til å omfatte reelle tall, noe som er nyttig. For heltall så er $n! = \Gamma(n + 1)$. Da kan summer av $p(n)$ over forskjellige intervaller i n erstattes med integraler, og (B.6) kan plottes som en kontinuerlig funksjon (se fig. B.2). Dette gjøres i tilgjengelige pythonrutiner i biblioteket *numpy*

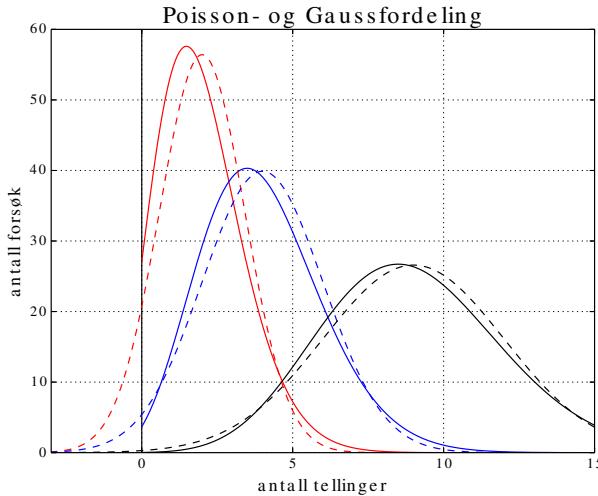
Det kan vises at standardavviket til denne fordelingen er gitt ved

$$s = \sqrt{m} \quad (\text{B.7})$$

Når man, i et gitt tidsintervall, gjør kun en oppelling av antall henfall som man vet er tilfeldig fordelt, og ønsker å si noe om forventet utfall, m blir ved neste måling, så kan man si at anslaget er

$$m = n \pm \sqrt{n}$$

² $n! = 1 \times 2 \times \dots \times (n - 1) \times n$ og vi har $0! = 1$



Figur B.2: Poissonfordeling (heltrukken) og Gausstilnærming (stiplet) for 200 forsøk med middelverdier h.h.v 2, 4 og 9. Poissonsannsynlighet er bare definert for hele tall, men er her likevel tegnet som kontinuerlig funksjon (se tekst)

Hvis man gjentar målingen så vil presisjonen på m forbedres slik det er vist i ligning (B.3). Legg merke til at selv om hvert måling gir et helt antall, n , så er middelverdien, m , et reelt tall.

Når den forventede middelverdien av antallet, m , øker, så nærmer Poissonfordelingen seg en Gaussfordeling med $\sigma = \sqrt{m}$. Fig. 2 illustrerer dette. Siden det er ufysikalsk å få et negativt antall tellinger i et enkeltforsøk, så er ikke Poissonfordelingen definert for negative verdier, i motsetning til gaussfordelingen som er definert overalt. For middelverdier under $m = 10$ (anslagsvis), så er fordelingen nokså skjev.

Tillegg C

Dirac's 'Bra - Ket' formalisme

Om man skulle få presentert et foredrag eller skriftlige betraktninger der man bruker kvantemekanikk, så vil man mer eller mindre umiddelbart bli konfrontert med slike symboler: $|\psi\rangle$ og $\langle\psi|M|\psi\rangle$. Det er dermed på sin plass å avmystifisere denne notasjonen selv om vi ikke bruker den i denne læreboka. Lærebøker på dette nivået har tradisjonelt beskrevet kvantemekanikken ved hjelp av bølgefunksjoner i rommet $\psi(x)$.

Da vi snakket om egenspinn var vi imidlertid nødt til å henge merkelapper på bølgefunksjonen for å spesifisere tilstander som ikke er noen funksjon i rommet. En generalisering av begrepene er nødvendig. Det var Dirac som innførte bra-ket notasjonen i sin presise formulering av kvantemekanikken ved bruk av vektorrom og lineær algebra.

En *tilstandsvektor*, kalt $|\psi\rangle$, kan bare spesifiseres nærmere ut ifra hva vi vil vite om den. Vi kan for eksempel ønske å vite noe om energien til systemet spesifisert med $|\psi\rangle$. Da må vi dekomponere tilstanden etter mulige energitilstander (som vi forhåpentligvis kan finne ved å løse Schrödingerligningen). Disse energi-egentilstandene vil være *basisvektorer* som gjør det mulig å dekomponere tilstandsvektoren. Dette er helt analogt med at vi kan dekomponere enhver vektor i rommet ved hjelp av tre ortogonale basisvektorer. For eksempel kan vi snakke generelt om en vektor \vec{v} . Så kan den spesifiseres nærmere ved hjelp av basisvektorene: \vec{u}_x , \vec{u}_y og \vec{u}_z , slik at vi skriver $\vec{v} = a\vec{u}_x + b\vec{u}_y + c\vec{u}_z$.

Vi kan dekomponere tilstanden, $|\psi\rangle$, på samme måte og skrive

$$|\psi\rangle = \sum a_n |\psi_n\rangle$$

Her kan basisvektorene være de forskjellige energitilstandene, og koeffisientene a_n er sannsynlighetsamplituder for de forskjellige energiene. Dirac kalte vektoren $|\psi\rangle$ for en 'ket'. Grunnen til et slikt ord er at vi må definere et

indreprodukt, (eller skalarprodukt) mellom vektorer. For tilstandsvektorer i kvantemekanikken har hver 'ket', en tilhørende 'bra'-vektor, $\langle \psi |$. Dette er den komplekskonjugerte tilstandsvektoren

$$\langle \psi | = \sum a_n^* \langle \psi_n |$$

(om koeffisienten står foran eller bak bra-vektoren har ingen betydning). Heldigvis viser det seg at alle sett basisvektorer som er utviklet etter fysisk målbare størrelser (Energi, posisjon, bevegelsesmengde...) er ortogonale!

Vi har altså produktet $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{n,m}$. Dermed er matrisenotasjon svært godt egnet til å beskrive vektorene, spesielt om det er snakk om et endelig antall tilstander. Vi kan skrive

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

Da transponerer og komplekskonjugerer vi for å få den tilhørende bra-vektoren

$$\langle \psi | = (a_1^*, a_2^*, \dots, a_N^*)$$

Lengden av vektoren blir skalarproduktet med seg selv:

$$\langle \psi | \psi \rangle = a_1^* a_1 + a_2^* a_2 + \dots + a_N^* a_N$$

Tilstanden er normert om denne summen er lik 1.

Ofte fins det uendelig mange energitilstander, noe som gjør matrisenotasjonen uegnet, selv om det er snakk om diskrete egenverdier og tellbare tilstander. Men når vi snakker om egenspinn eller banespinn, så er jo matrisenotasjon svært hensiktsmessig. Egenspinntilstander har jo ingen romlig bølgefunksjon, så da er man uansett til henvist til matrisenotasjonen. Når vi endrer rekkefølgen av multipliseringen, og skriver $|\psi\rangle \langle \psi|$ så har vi isteden et 'ytreprodukt', der resultatet blir en $N \times N$ matrise. Vi tar også med oss at summen av ytreprodukt over basisvektorene blir til enhetsoperatoren

$$\Sigma_1^N |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \hat{I}$$

Måling av en dynamisk størrelse for tilstanden vil svare til å velge et passende sett basisvektorer, formelt ved å sette inn enhetsoperatoren.

Vi ønsker jo også å beskrive romlige tilstander. Hvordan beskriver vi en partikkkel som befinner seg nøyaktig i posisjonen x ? I lys av Heisenbergs

usikkerhetsrelasjon vet vi at dette er ufysikalsk, men vi kan likevel definere en slik tilstand, $|x\rangle$, i posisjonsrommet. Bølgefunksjonen $\psi(x)$ må være:

$$\psi(x) = 0 \text{ for } x' \neq x \text{ og } \infty \text{ for } x' = x$$

Ansamlingen av uendelig mange mulige posisjoner, er vektorer i et uendeligdimensjonalt 'Hilbertrom' (navnet er oppkalt etter matematikeren David Hilbert). De kan ses på uendelig mange basisvektorer som er ortonormerte ved deltafunksjonen

$$\langle x'|x \rangle = \delta(x' - x)$$

Her er $\delta(x' - x)$ Dirac's deltafunksjon, som er lik null overalt bortsett fra i $x' = x$ der den er uendelig stor. Ettersom vi har sagt at deltafunksjonen skal beskrive en sannsynlighet, så må den være normert: $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x' - x) dx' = 1$.

Når vi vil projisere tilstanden $|\psi\rangle$ inn i posisjonsrommet, så må vi skrive tilstanden som en sum over basisvektorer, som i dette tilfellet er et integral over mulige posisjoner. Vi har

$$\langle x|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|x' \rangle \langle x'|\psi \rangle dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x' - x)\psi(x')dx' = \psi(x)$$

Den adjungerte tilstanden blir

$$\langle \psi|x \rangle = \psi^*(x)$$

Normering av tilstandsvektoren i posisjonsrommet blir til

$$\langle \psi|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi|x \rangle \langle x|\psi \rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx \equiv 1$$

Forventningsverdier for en operator \hat{M} kan skrives

$$\langle \psi|\hat{M}|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{M}\psi(x)dx$$

Her må \hat{M} defineres som funksjon av posisjon. (f.eks $\hat{x} = x$ eller $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, eller $\hat{H} = -\hbar^2/2m\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$). Formelt sett må det settes inn to integraller over deltafunksjonsnormerte posisjonstilstander til for å få dette resultatet. Vi henviser interesserte til standard lærebøker i kvantemekanikk (f.eks. [6]eller [7]) for å få mer innsikt i denne formalismen.

Tillegg D

Deteksjon av partikler og stråling

All kunnskap i kjerne-og partikkelfysikk er basert på deteksjon av ladde partiklers ionisasjon på en eller annen måte. Det kan være direkte oppsamling av frigjorte ioner, eller det kan være observasjon av lys som emitteres på grunn av de-eksitasjon av ioner som er laget på grunn av de ladde partiklene som treffer et passende, gjennomsiktig materiale. Dette kalles scintillasjonsdetektorer.

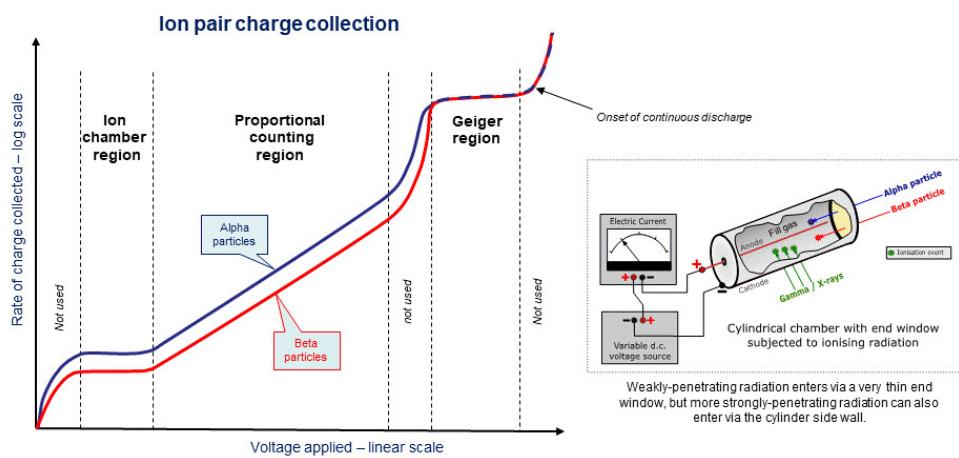
Det er et forholdsvis lite antall partikler som er stabile nok til at de tilbakelegger mer enn et par millimeter, og som kan detekteres direkte. Disse partiklene er: Elektroner, myoner, fotoner, protoner, nøytroner og pioner. I tillegg har vi noen hadroner med særtall (kaoner og Lambda-partikler). Vi beskriver kort noen av prinsippene.

D.1 Ionisasjonsdetektører av gass

Geiger-Müller røret er en detektortype som har vært anvendt i lang tid. Det er konstruert som et rør med en elektrode i midten. Elektroden settes på høy spenning slik at det settes opp mellom elektroden og veggens rundt. Når det lages frie ioner på grunn av strålingen så vil ioneparene drifte i hver sin retning i røret. Ionene får nok energi til å lage nye ionepar når de nærmer seg anoden i midten, og vi får en multipliseringseffekt. Snart er hele volumet ionisert, og vi får en utladningspuls som per proporsjonal med antall ionepar i telleren. Hvert gang det lages ett ionepar vil en slik utladning foregå, når spenningen er stor nok. Telleren opererer i 'Geiger-modus'. Spenningen som skal til for denne operasjonsmåten vil avhenge av dimensjoner og geometri i detektoren. Den er vanligvis nåkså høy, fra flere hundre til over tusen volt.

Practical Gaseous Ionisation Detector Regions

This shows an idealised plot of the three gaseous detection regions, using the concept of applying a variable voltage to a cylindrical chamber which is subjected to constant ionising radiation. Alpha and beta particles are separately plotted to demonstrate the effect of different radiation energies, but the same principles apply to all forms of ionising radiation.



In the ion chamber region gas ionisation is direct and results in a current flow proportional to overall ionisation. At higher field strengths gas multiplication effects can be used, allowing output of individual ionisation events as measurable pulses.
In the proportional region, pulse sizes are proportional to the energy of each ionisation event. In the Geiger region a fill gas at reduced pressure ($1/10^6$ atmosphere) allows greater multiplication but produces a uniform pulse for each ionising event regardless of its energy.

OS

Figur D.1: (Fra Wikipedia: Doug Sim - Own work, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=19789442>)

Om spenningen settes ned vil man få en utladning som er proporsjonal med den opprinnelige ioniseringen forårsaket av den ladde partikkelen. Man kan også sette opp mange høyspenningstråder i et større volum, og utforme det elektriske feltet slik at ionene bare oppsamles på tråder som ligger svært nær den opprinnelige ioniseringen. Detektorvolumene kan være store sylinder rundt et vekselvirkningspunkt som det kommer partikler fra. Da har man en spordetektor med mange posisjonsmålinger langs med partikelbanen. Presisjonen av målingene kan forbedres ved å måle tiden det tar for ionparene å samle seg opp og lage en elektrisk signal tråden. Da har man et driftkammer. Slike oppsett har vært benyttet i svært mange eksperimenter. Man får høy presisjon i målingene, og siden mediet partiklene beveger seg i er en gass, så er det bare små forstyrrelser i partikelbanene.

D.2 Silisiumdetektorer

Halvlederdioder kan benyttes som partikkeldetektorer, slik det er beskrevet i seksjon 8.5.4. Man kan oppnå høy presisjon på målingene av partikelkoordinater ved å lage segmenterte diodestrukturer. Fordelen med disse detektorene er at de gir svært raske og korte signalpulser. For å måle partikelbaner må flere plan med silisiumsdetektorer settes etter hverandre. De kan dermed brukes i detektoroppsett som må håndtere høy tetthet av partikler, og høy kollisjonshyppighet. Silisiumsdetektorer er derfor foretrukket i eksperimenter ved LHC, selv om materialet i sensorene forstyrrer partikelbanene mye mer enn materialet i gassfylte ionisasjonsdetektorer.

D.3 Magnetfelt

For å måle bevegelsesmengden til partiklene så må spordetektorene plasseres i et magnetfelt der partiklene går i sirkelbaner. Krumningsradien (slik det er forklart i seksjon 1.7.1) er direkte proporsjonal med den komponenten av bevegelsesmengden til partikkelen som står vinkelrett på magnetfeltet, $p_t = qBr$. For å se at partikelbanen avviker fra en rett linje så er det ønskelig å måle på en så stor del av sirkelbanen som mulig. Krumningen blir større om magnetfeltet er høyt. Størrelsen på detektorsystemene i LHC er i stor grad bestemt av ønsket om å kunne måle bevegelsesmenger til elementærpartikler som er på flere hundre GeV/c. For å sette opp et høyt magnetfelt benyttes solenoider (og andre strømsløyfer) av superledende kabler, som må kjøles ned til et par kelvin.

Opplösningsevnen, den relative usikkerheten på målingen, øker propor-

sjonalt med bevegelsesmengden:

$$\frac{\sigma_p}{p} = K \times p$$

Man vil altså at konstanten, K, er så liten som mulig. I ATLAS detektoren er oppløsningsvnen slik at presisjonen i målingen av til en myon med bevegelsesmengde på 1 TeV (Terra = 10^{12}) er omtrent 10%. Myoner vil i alminnelighet ikke absorberes i detektormaterialet, så da er målingen av bevegelsesmengde spesielt viktig for myoner.

D.4 Måling av energi ved absorbsjon

Detektorene som er satt opp for å absorbere all energien til partikler kalles for *kalorimetre*.

Elektroner og fotoner

Prosesser med fotoner og elektroner er beskrevet i seksjon 2.2, og det er disse prosessene som inntrer når et høyenergetisk foton eller elektron treffer et fast stoff. Etter et par centimeter har skjedd en av disse prosessene: Bremsestråling, Comptonspredning, pardannelse eller fotoabsorbsjon. Sekundærpartiklene (fotoner og elektroner) som skapes vil initiere nye reaksjoner av samme type om de har nok energi. Disse prosessene vil gjenta seg og lage nye partikler, inntil det ikke er energi igjen. Den opprinnelige partikkelen har generert en *elektromagnetisk skur* av elektroner og fotoner. Antall partikler i skuren, og den samlede ioniseringen vil være proporsjonal med energien til den opprinnelige partikkelen.

For å absorbere all energi så er det fordelaktig at bremsematerialet er så tungt som mulig. Ofte benyttes lag bestående av blyplater og aktivt materiale. Det aktive materialet kan være ionisasjonskamre av gass, eller scintillasjonsdetektorer. Bremsematerialet kan også være tunge, scintillerende, krystall. Intensiteten av lyspulsen som genereres leses da ut av f.eks. fotodioder eller fotomultiplikatorer. Samlet tykkelse kan typisk være 50 - 100 cm.

Signalet som detekteres fra en slik elektromagnetisk skur blir til etter en statistisk prosess. Oppløsningsvnen blir relativt sett bedre og bedre når energien til det innkomende fotonet eller elektronet øker, og er typisk gitt som

$$\sigma(E)/E = K/\sqrt{E}$$

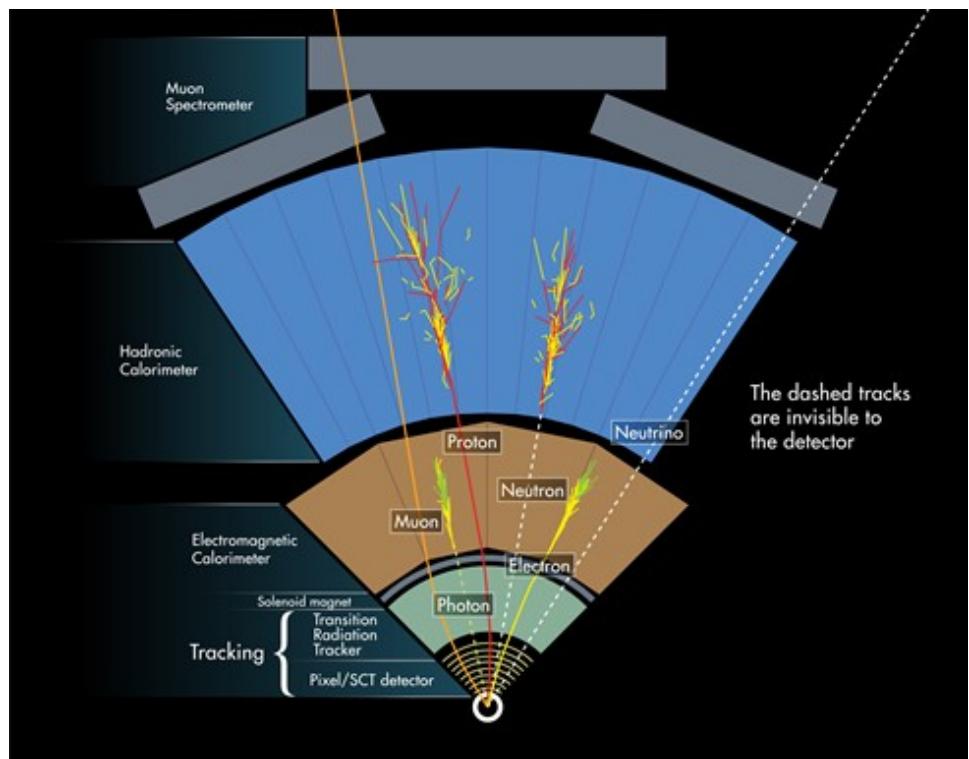
Typiske verdier for K ligger mellom 0,05 og 01 når energien oppgis i GeV.

Hadroner

Tyngre partikler vil ikke indusere en slik elektromagnetisk skur. Sannsynligheten for bremsestråling er nemlig proporsjonal med $1/m^4$. (der m er massen. Elektroner bremesestråler villig vakk. Myoner har 200 ganger høyere masse, og sannsynligheten for bremsestråling må deles på 200^4 .

Hadroner, som pioner og protoner, er enda tyngre men vil imidlertid lage kjernereaksjoner. All energien til hadronene (pioner, protoner, nøytroner) vil absorberes som følge av disse reaksjonene, og det lages en hadronskur. Det trengs flere meter med jern for å absorbere energien. Opplosningsevnen til et hadronkalorimeter har det samme forløpet som for elektromagnetiske kalorimetre, men verdien av K er her typisk et sted mellom 0,5 og 1.

I sum ender et detektorsystem opp med å se ut omrent som prinsipp-skissen vist nedenfor, fig. D.2.

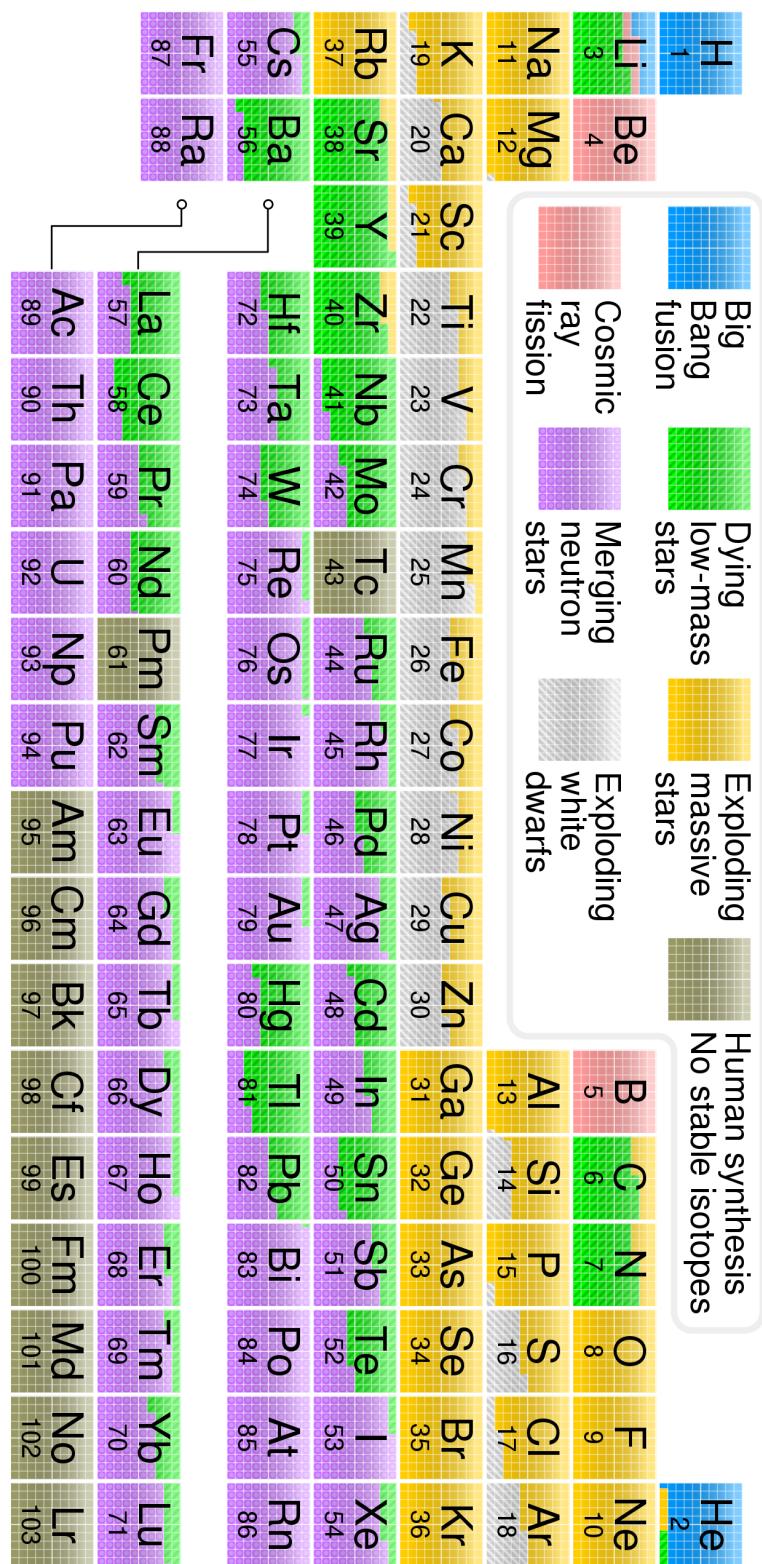


Figur D.2: Prinsippskisse for ATLAS detektoren (fra CERN). Det er to typer spordetektorer. Her måles bevegelsesmengden til alle ladde partikler. Fotoner og elektroner vil stoppe helt i det elektromagnetiske kalorimenteret. Protoner og pioner vil fortsette, og avgive all energi i Hadronkalorimenteret. Myoner vil traversere helt ut til myonspektrometeret. De nøytrale nøytrinoene vil ikke velsekvirke i det hele tatt, og forsvinne ut av detektorsystemet. Men ved å se på energibalansen i systemet har man mulighet til å finne ut hvor mye energi som har forsvunnet uten å vekselvirke. I tillegg til nøytrinoer kan ubalanse i energiregnskapet være en signatur for mystiske partikler som ikke er del av vår standardmodell.

Tillegg E

Det periodiske system

På neste side vises det periodiske system, med fargekode som viser hvordan de forskjellige elementene ble skapt. (bilde fra Wikipedia: By Cmglee - Own work, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=31761437>) Det hadde vært praktisk om atomære masser også var skrevet inn, men de er jo ikke så vanskelige å finne ved behov.



Bibliografi

- [1] Einsteins egen populærframstilling:
<https://archive.org/stream/cu31924011804774#page/n9/mode/2up>
- [2] J. Schwartz og M. McGuinness: *Einstein for begynnere* (oversatt fra engelsk av P.A. Amundsen)
- [3] Se f.eks. Jostein Gaarder *Sofies verden.*
- [4] Utledningen som gir ligning 1.22 er tatt fra et notat om GPS av Neil Ashby, universitetet i Colorado (2006) (funnet etter søk på nettet)
- [5] N. Bohr: *On the Constitution of Atoms and Molecules*, Philos. Mag. 26,1 (1913). Funnet gjennom Wikipedia.
- [6] P.C.Hemmer: *Kvantemekanikk* Tapir akademisk forlag 5. utgave (2005)
- [7] D.J.Griffiths: *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice hall.(1995)
- [8] R.P. Feynman og A.R. Hibbs: *Quantum Mechanics and Path Integrals* Mc.Graw Hill (1965)
- [9] A. Beiser: *Concepts of Modern Physics*. 6th. ed. Mc Graw Hill (2003)
- [10] A. Egeland, T. Henriksen, I. Kanestrøm: *Drivhuseffekten* Fysisk institutt, Universitetet i Oslo, 1990.
- [11] E. Lillestøl, O. Hunderi og J.R. Lien: *Generell fysikk for universiteter og høyskoler, bind 2*, Universitetsforlaget, 2001.
- [12] A.M. Glazer og J.S.Wark: *Statistical Mechanics, A survival guide*, Oxford University Press, 2001.
- [13] H.D.Young og R.A.Freedman: *University Physics with Modern Physics* 15th. ed. Pearson (2018).

- [14] R. Pohl et al. *The size of the proton* Nature 09250 Vol 466 doi:10.1038 (2010)
- [15] Povh et al. *Particles and Nuclei* Springer 1995.
- [16] Bauer and Westfall: *University Physics with Modern Physics* 2nd. ed. Mc Graw Hill 2014.
- [17] <https://www.ntnu.no/museum/bestill-karbondatering>, konsultert 3/6-2022.
- [18] <https://www.radioactivity.eu.com>
- [19] T. Henriksen et al: *Radiation and Health* <https://www.mn.uio.no/fysikk/tjenester/kunnskap/straling/radiation-and-health-2015.pdf>. Kan lastes ned gratis.
- [20] S. Rose: <https://sunnivarose.no/2019/05/31/cesium-og-strontium/>. Konsultert 18 oktober 2022.
Sunniva Rose er også forfatter av boka *Vi er Stjernestøv - Kjernefysikk for folk flest*
- [21] S. Darby et al: *Radon in homes and risk of lung cancer: collaborative analysis of individual data from 13 European case-control studies.* (2004) BMJ, doi:10.1136/bmj.38308.477650.63
- [22] *Thorium som energikilde i Norge*
https://www.regjeringen.no/globalassets/upload/oed/pdf_filer/horinger/horing-thoriumutvalgets-rapport/thoriumrapporten-norsk-versjon.pdf (2008)
- [23] B.R. Martin og G. Shaw: *Particle Physics* 3rd. ed. Wiley 2008.
- [24] Mark Thomson: *Modern Particle Physics*. Cambridge University Press, 2013.
- [25] G.N. Felder og K.M. Felder *Modern Physics* Cambridge University Press (2023).
- [26] R.L. Workman et al: *The Review of Particle Physics*. Prog. Theor. Exp. Phys. 2022, 083C01 (2022). Nettside: pdg.lbl.gov