
Kompendium i FYS2140 Kvantefysikk

A. Raklev, T. Engeland,
M. Hjorth-Jensen og S. Viefers

Fysisk Institutt, Universitetet i Oslo, 2014

Forord

Kursets struktur

Kurset er delt inn i tre hoveddeler:

- Første del tar for seg den historiske utviklingen fra slutten av det nittende århundre til begynnelsen av forrige århundre. I denne tidsperioden vokste erkjennelsen av at klassisk fysikk (Newtons lover m.m.) ikke kunne beskrive resultater fra flere nye eksperimenter, bla. flere spektroskopiske data. Denne utviklingen førte fram til den nye kvanteteorien rundt 1925. De nye begrepene som ble innført var bla. **materieegenskapen til lys, bølgeegenskapene til materien og kvantiseringen av fysiske størrelser som f.eks. energien eller banespinnet**. Forelesningene i denne delen dekkes av disse forelesningsnotatene.
- Andre del tar for seg en første introduksjon til kvantemekanikk, med løsning av Schrödingerligningen for enkle systemer, samt kvantemekanikkens grunnleggende matematiske formalisme. Denne delen avsluttes med en kvantemekanisk beskrivelse av hydrogenatomet. I denne delen følger vi læreboken, “Introduction to quantum mechanics” av David J. Griffiths, men for kapittelet om kvantemekanikkens formalisme, og avsnitt 4.4 om spinn, så har vi inkludert en oppsummering i dette kompendiet som dekker pensum.
- Tredje og siste del undervises resten av semesteret. Her tar vi for oss ulike anvendelser fra kvantemekanikkens spede begynnelse til i dag, f.eks. innen atomfysikk, molekylegenskaper, moderne partikkelfysikk og faste stoffers fysikk. Deler av dette materialet finnes i kap. 5 i Griffiths, avsnitt 5.1 og 5.2, og resten finner dere i dette kompendiet.

Kursets innhold

- Første del.
 - Enheter og størrelser i FYS2140
 - Sort legeme-stråling og Plancks kvantiseringshypotese
 - Fotoelektrisk effekt
 - Röntgenstråling
 - Comptonspredning
 - Bohrs atommodell

- Materiebølger og partikkel-bølge dualitet
- Heisenbergs uskarphetsprinsipp
- Litt bølgelære
- Andre del.
 - Introduksjon til kvantemekanikk og enkle kvantemekaniske systemer
 - Kvantemekanikkens formalisme
 - Kvantisering av banespinn
 - Hydrogenatomet
- Tredje del.
 - Atomfysikk, det periodiske systemet
 - Molekyler
 - NMR
 - Moderne partikkelfysikk

Til slutt en takk til alle som har kommet med kommentarer og forbedringsforslag til disse notatene. Vi er svært takknemlige for hjelpen Simen Kvaal ga i utviklingen av flere av de numeriske oppgavene. Kompendiet i FYS2140 ble opprinnelig skrevet av Morten Hjorth-Jensen i samarbeid med Torgeir Engeland og ble kraftig revidert av Susanne Viefers høsten 2004/våren 2005. En del kapitler er skrevet om helt. Siste revisjon av notatene ble gjort av Are Raklev våren 2013 med hjelp fra Siv Aalbergsgjø. I forelesningsnotatene til første del av kurset har vi hentet inspirasjon fra flere kilder, bl.a. Brehm og Mullin: "Introduction to the Structure of Matter" som var pensumbok tidligere, "Nonclassical Physics Beyond Newton's View" av R. Harris og "Modern Physics" av Serway, Moses og Moyer.

Innhold

Forord	iii
I VEIEN FRAM TIL SCHRÖDINGERS LIGNING	1
1 BRUDET MED KLASSISK FYSIKK	3
1.1 Innledning	3
1.1.1 Hva er kvantemekanikk?	4
1.2 Enheter i kvantefysikk	6
1.3 Plancks kvantiseringshypotese	10
1.3.1 Utledning av Wiens Forskyvningslov	17
1.3.2 Utledning av gjennomsnittsenergi per svingemode	17
2 LYSETS PARTIKKELEGENSKAPER	19
2.1 Fotoelektrisk effekt	19
2.2 Röntgenstråling	23
2.3 Comptonspredning	25
2.4 Oppgaver	32
3 BOHRS ATOMMODELL	37
3.1 Innledning	37
3.2 Bohrs atommodell	39
3.2.1 Franck-Hertz eksperimentet	43
3.3 Oppgaver	44
4 MATERIEBØLGER	47
4.1 Dobbeltpalteeksperimentet	47
4.2 Davisson-Germer eksperimentet og Bragg diffraksjon	50
4.3 De Broglies hypotese	51
4.4 Gruppe- og fasehastighet	53
4.5 Bølge eller partikkel?	57
4.6 Oppgaver	58
II KVANTEMEKANIKK	61
5 Formalisme	63
5.1 Tilstander	63
5.2 Operatorer	64

5.3	Målinger	65
5.4	Forventningsverdier	66
5.5	Kompletthet	66
6	Spinn	69
6.1	Stern–Gerlach eksperimentet (1922)	69
6.2	Den normale Zeeman-effekt	70
6.3	Stern-Gerlach-eksperimentet og oppdagelsen av spinn	71
6.4	Viktige fakta om spinn	72
6.5	Den anomale Zeemaneffekt (dvs. med spinn)	74
6.6	Bølgefunksjon med spinn	74
6.7	Spinn-bane-kobling	74
6.8	Addisjon av angulærmoment	75
6.9	Kombinasjoner av to spinn: Singlet- og triplet	76
III	ANVENDELSER	77
7	Molekyler	79
7.1	Bindingsmekanismer	79
7.2	Rotasjon og vibrasjon	81
7.3	Molekylspektra og strålingsoverganger	84
8	NMR	89
9	Elementærpartikler	93
9.1	Partikkelzoo	93
9.2	Henfall	94
9.3	Oscillasjon av nøytrale mesoner	97

Del I

VEIEN FRAM TIL
SCHRÖDINGERS LIGNING

Kapittel 1

BRUDDET MED KLASSISK FYSIKK

Anybody who is not shocked by quantum theory has not understood it. *Niels Bohr*

Kursets første del har som hensikt å gi dere en viss oversikt over den historiske utviklingen som førte til formuleringen av kvantemekanikken rundt 1925. Dette er på ingen måte et forsøk på en fullstendig historisk oversikt. Vi vil kun ta for oss det vi anser som de viktigste bitene på denne vei. Dette inkluderer en beskrivelse av sort legeme-stråling vha. Plancks kvantiseringshypotese, den fotoelektrisk effekt, Comptonspredning, Röntgenstråling, Bohrs atommodell, samt materiens partikkel- og bølgeegenskaper. Når vi har gått igjennom denne innledende delen, så er vi klare til å ta fatt på konsekvensene av den historiske utviklingen i del 2, som omhandler kvantemekanikkens grunnleggende formalisme.

1.1 Innledning

Det finnes to paradoksalt forskjellige oppfattelser av tilstanden i Fysikk rundt forrige århundreskifte. Den ene, med stor oppslutning i samtiden, er at man gjennom Newtons mekanikk, Maxwells elektromagnetisme og utviklingen av termodynamikk hadde en bortimot fullstendig beskrivelse av verden, og at det som gjenstod kun var småproblemer. Dette illustreres kanskje best av Lord Kelvin som i 1900 sa følgende:

There is nothing new to be discovered in physics now. All that remains is more and more precise measurement.

Den andre oppfatningen er at man satt på en Pandoras-boks av eksperimentelle observasjoner som, med basis i veletablert klassisk fysikk, ikke lot seg forklare, og som varslet en fullstendig revolusjon. Det kan være verdt å bite seg merke i dette i en verden hvor det stadig stilles spørsmål ved verdien av grunnforskning, nå som “alt er oppdaget”.

En kan argumentere for at startskuddet for kvanteteorien gikk den 14. desember 1900, da Planck foreleste om sin teori for sort legeme-stråling til det Tyske

Fysiske selskap. En rekke fysiske fenomen, sort legeme-stråling, fotoelektrisk effekt, diskrete spektra fra ulike gasser, Röntgenstråling m.m., kunne altså ikke forklares vha. det vi idag kaller for klassisk fysikk, dvs. den tids bevegelseslover for naturen, uttrykt vha. Newtons og Maxwells ligninger. Teorien resulterte i flere inkonsekvenser, slik som den såkalte 'ultrafiolette katastrofe' (se senere), eller at elektroner i følge klassisk teori burde kollapse inn i atomkjernen.

I første omgang ble disse problemene søkt løst vha. *ad hoc* hypoteser, slik som Plancks kvantiseringshypotese eller Bohrs atommodell. Denne historiske gangen viser oss også klart at fysikk er et eksperimentelt fag, *teorier om naturen utvikles hånd i hånd med eksperiment*, og aller sterkest er kanskje utviklingen når teori og eksperiment er på kollisjonskurs.

Etterhvert som en fikk større eksperimentell innsikt om både atomer og stråling, viste slike *ad hoc* forklaringer seg som utilstrekkelige. Krisen i klassisk fysikk kom til sin ende rundt 1925–1928 med formuleringen av kvantemekanikken. Her følger noen viktige oppdagelser og teorier som var med å forme den første tiden:

1898	Madam Curie	Radioaktiv polonium og radium
1900	Planck	Plancks kvantiseringshypotese og sort legeme-stråling
1905	Einstein	Fotoelektrisk effekt
1911	Rutherford	Atommodell
1913	Bohr	Kvanteteori for atomspektra
1922	Compton	Spredning av fotoner på elektroner
1923	Goudsmit og Uhlenbeck	Elektronets egenspinn
1924	Pauli	Paulis eksklusjonsprinsipp
1925	De Broglie	Materiebølger
1926	Schrödinger	Bølgeligning og ny naturlov
1927	Heisenberg	Uskarpetsrelasjonen
1927	Davisson og Germer	Eksperiment som påviste materiens bølgeegenskaper
1927	Born	Tolkningen av bølgefunksjonen
1928	Dirac	Relativistisk kvantemekanikk og prediksjon av positronet

Kvantemekanikken har vært et uunnværlig verktøy i vår søken etter å forstå naturen, fra å forklare hvorfor sola skinner, til studier av atomer, deres struktur og understrukturer, supraleiding, nøytronstjerner, strukturen til DNA-molekylet, elementærpartiklene i naturen m.m. Og kvantemekanikken ligger samtidig til grunn for store deler av vår nåværende og framtidige teknologiske utvikling.

Fra et mer filosofisk ståsted kan vi si at dialektikken, det vil si argumenter og motargumenter, spørsmål og svar, mellom eksperiment og teori var med på å forme en ny naturvitenskapelig filosofi. Som basis for vår forståelse av naturen har vi erstattet determinismen gitt ved f.eks. Newtons lover med en *sannsynlighetsbestemt* determinisme, men det er altså determinisme likevel.

1.1.1 Hva er kvantemekanikk?

Kvantemekanikk er et matematisk byggverk, et sett av regler for å lage fysiske teorier om naturen, en matematisk språk for å uttrykke naturlover, hvor Schrödingers ligning er det helt sentrale elementet, både for mikroskopiske og

makroskopiske systemer. Sett med regler inneholder også tolkninger av teoriene samt ulike postulater, f.eks. hvordan en måling av en fysisk størrelse skal defineres. Reglene er for såvidt enkle, men høyst ikke-trivielle i sine tolkninger, noe som har ledet og fortsatt leder til interessante kontroverser om naturens egenskaper og vår evne til å forstå den. Den kanskje mest kjente kritikeren av kvantemekanikken er Einstein, som, sammen med Planck, var en av teoriens 'jordmødre'.

Kvantemekanikken kjennetegnes, som dere kommer til å merke, ved at den, i motsetning til klassisk mekanikk, er høyst *ikke-intuitiv*. Naturen på atomært nivå den *mikroskopiske* verden, kan oppføre seg helt forskjellig fra måten vi er vant til å tenke på. Dette skyldes selvsagt at det vi kaller "intuisjon" er basert på våre hverdagslige sanseerfaringer, og at våre sanser er laget for å oppfatte den *makroskopiske* verden. Vi ser ikke enkeltatomer. Uansett medfører dette at kvantemekanikken kommer som et sjokk for de aller fleste. Dere kommer til å møte en hel del nye og uvante begreper og matematisk formalisme som det tar en del tid å fordøye. (NB! En viktig del av denne fordøyelsesprosessen er å regne mange oppgaver...!). Men la dere ikke skremme av dette — det er disse uvante egenskapene ved naturen som gjør kvantefysikken så fascinerende og spennende!

Som en liten forsmak vil jeg her nevne fire av de "merkelige" egenskapene ved kvantemekanikken som dere vil møte i løpet av kurset. De har ingen klassisk analog. Jeg velger her litt upresise, "sleivete" formuleringer framfor presise definisjoner (de kommer senere og ville vært ganske ubegripelige på dette tidspunktet):

- **Energikvantisering**

Vi er vant til å tenke på energi som en kontinuerlig størrelse. Den potensielle energien $\frac{1}{2}kx^2$ til en fjær, for eksempel, kan ifølge klassisk mekanikk anta en hvilken som helst verdi. Men ser vi på verden med stort nok forstørrelsesglass (dvs. på atomært nivå), finner en at energier bare kan anta visse, diskrete verdier. Dette kalles *kvantisering*. Vi vil se mange eksempler på dette, bl.a. for elektroner som er bundet til atomer, og energien til fotoner ("partiklene" som lyset består av).

- **Bølge-partikkel dualitet**

En kan tilordne bølgeegenskaper til enhver partikkel (eller for den saks skyld til hver og en av oss...), og partikkelegenskaper til lyset. At lyset består av "partikler" (energipakker) har jeg allerede nevnt. Et sjokkerende bevis på materiens bølgeegenskaper er dobbeltspalte-eksperimentet: dere har lært om interferens med klassiske bølger på videregående. Imidlertid, sender man *ett elektron* mot to spalter, vil det litt sleivete sagt gå gjennom begge spaltene samtidig og *interferere med seg selv*. Som en konsekvens av dette trenger man en *bølgeligning* (Schrödingerligningen) til å beskrive materien, i stedet for Newtons mekanikk. Og det viser seg at det eneste vi kan få vite noe om utfra denne bølgeligningen er **sannsynligheter**, f.eks. sannsynligheten for at en partikkel skal befinne seg et gitt sted.

- **Heisenbergs uskarphetsrelasjon**

Klassisk er det slik at posisjon \mathbf{x} og bevegelsesmengde \mathbf{p} er uavhengige størrelser. Vi kan holde en kaffekopp i ro og samtidig vite hvor den befinner seg! Kvantemekanisk impliserer Heisenbergs uskarphetsrelasjon at vi ikke

kan lokalisere en partikkel og samtidig bestemme dens bevegelsesmengde til en vilkårlig presisjon. Matematisk uttrykkes dette som

$$\Delta \mathbf{p} \Delta \mathbf{x} \geq \frac{\hbar}{2},$$

der $\Delta \mathbf{x}$ er “uskarpheten” i posisjon, og $\Delta \mathbf{p}$ er “uskarpheten” i bevegelsesmengde. Grunnen til at vi ikke merker noe til dette i hverdagen, er at den relative uskarpheten er uhyre liten for makroskopiske gjenstander. Men på atomært nivå har uskarphetsrelasjonen merkbare og viktige konsekvenser.

- **Paulis eksklusjonsprinsipp**

To fermioner (som f.eks. elektroner, protoner, nøytroner, kvarker og nøytrinor) kan ikke befinne seg i samme tilstand (dvs. med samme energi og på samme sted, hva det nå enn skulle bety i lys av uskarphetsrelasjonen) samtidig. (Som sagt, formuleringen her er ganske upresis.) Dette fører bl.a. til, som dere vel alt vet fra kjemien, at energiskall i atomer kan bli fulle. Eksklusjonsprinsippet er m.a.o. avgjørende for hele materiens struktur!

Vår målsetting i dette kurset er å gi en introduksjon til kvantemekanikken, hvor vi vektlegger den historiske gangen fram til Schrödingers ligning og det å forstå enkle kvantemekaniske systemer. I tillegg tar vi med oss noen anvendelser for å demonstrere hvordan kvantemekanikken brukes i “den virkelige verden”.

Matematikken i dette kurset er ikke vanskelig, selv om en del manipulering med matematiske uttrykk kan virke innfløkt innledningsvis. Den abstrakte matematiske formalismen som kjennetegner kvantemekanikk vektlegges ikke i dette kurset, men vil til en viss grad bli innført der den kan hjelpe på forståelsen. Videregående emner som FYS3110 har dette som et viktig tema. De vanskeligste matematiske problemene vi kan komme i kontakt med er integral av typen

$$\int_a^b e^{-\alpha x} x^n dx,$$

og

$$\int_a^b e^{-\alpha x^2} x^n dx,$$

hvor α en reell positiv konstant og n et positivt heltall. Bokstavene a og b representerer integrasjonsgrensene. I tillegg kommer kjennskap til regning med komplekse tall og variable.

1.2 Enheter i kvantefysikk

Hovedbudskapet i dette avsnittet er at dere bør venne dere til å bruke “lure” enheter, både når dere regner oppgaver med penn og papir, og i de numeriske oppgavene — såvel i mellomregninger som i sluttsvaret. Med “lure” (eller elegante) enheter mener vi kort sagt enheter som er slik at en unngår enormt store (eller små) tall av typen 10^{-34} eller 10^{19} i regningene. For å foregripe begivenhetene litt, kan jeg jo røpe at dette i praksis innebærer å uttrykke energier i elektronvolt (eV), lengder i nanometer (nm) eller Ångström (Å), og masser i MeV/ c^2 . Som dere vil se etter hvert, gjør ikke dette bare at regningene blir enklere og mer elegante, men også at man lettere unngår feil. Flere detaljer og noen

lure triks kommer mot slutten av avsnittet. Men først noen betraktninger som skal gjøre dere mer fortrolig med de størrelsesordener vi typisk opererer med.

I kvantefysikk er vi opptatt av å beskrive fysiske fenomen på det vi kan kalle mikroskala. Typiske lengdeskalaer av interesse går fra 10^{-8} m ned til 10^{-18} m. Enhetene som da benyttes er **nm**, leses nanometer, som er 10^{-9} m og **fm**, leses femtometer, og er gitt ved $1\text{ fm} = 10^{-15}$ m.¹ Nanometer er den typiske lengdeskalaen i atomfysikk, faste stoffers fysikk og molekylfysikk. Tilsvarende anvendes femtometer i kjerne- og partikkelfysikk. Senere i dette kurset skal vi se at det er en sammenheng mellom de kreftene som virker (f.eks. Coulombvekselvirkningen i atomfysikk) og et systems energi og dermed dets lengdeskala.

For å gi dere et enkelt eksempel på de lengdeskalaer som vi skal befatte oss med, kan vi regne ut en omtrentlig verdi for diameteren til et hydrogenatom. Til dette trenger vi Avogadros tall

$$N_A = 6.023 \times 10^{23},$$

som betyr at det er N_A atomer i A gram av et ethvert element, hvor A er det atomære massetall. Det vil si at et 1 g hydrogen, 12 g karbon (^{12}C) og 238 g uran (^{238}U) har like mange atomer. La oss så anta at vi har et gram av flytende hydrogen og stiller oss selv spørsmålet om hvor stor utbredelse et hydrogenatom har, dvs. hvor stor er diameteren til hydrogenatomet som består av et elektron og et proton. Vi har oppgitt at tettheten ρ av flytende hydrogen er $\rho = 71$ kg/m³. Volumet som et gram opptar er da

$$V = \frac{10^{-3} \text{ kg}}{\rho}, \quad (1.1)$$

og volumet som et atom opptar blir derfor

$$V_{\text{atom}} = \frac{V}{N_A} = \frac{10^{-3} \text{ kg}}{N_A \rho} = \frac{10^{-3} \text{ kg}}{71 \text{ kg/m}^3 \cdot 6.023 \times 10^{23}} \simeq 2.3 \times 10^{-29} \text{ m}^3. \quad (1.2)$$

Siden vi her ser på en væske — i motsetning til en gass — ligger atomene tett sammen. Vi antar derfor at denne væsken består av tettpakkede kuler av hydrogenatomer, slik at vi kan sette diameteren d

$$d \sim V_{\text{atom}}^{1/3} \simeq 3 \times 10^{-10} \text{ m} = 0.3 \text{ nm}. \quad (1.3)$$

Vi skal senere i kurset se at når vi regner ut den gjennomsnittlige diameteren for hydrogenatomet vha. kvantemekanikk, vil vi finne en lignende størrelsesorden for diameteren. Dette enkle eksempel er ment som en illustrasjon på de lengdeskalaer som er av betydning for det vi skal drive med her. I forbifarten kan vi nevne at radius til et proton er ca. 1 fm, mens radius til en atomkjerne (uten elektronene, kun protoner og nøytroner) slik som bly er på ca. 7 fm. Dette forteller sitt om styrken på den sterke kjernekräften som holder en atomkjerne sammen.

La oss nå introdusere den viktige energienheten vår. Fra FYS-MEK1110 og FYS1120 har dere vært vant med Joule som energienhet, $J = \text{kg m}^2/\text{s}^2$. I

¹Iblant kan man også møte enheten Fm (med stor F), som uttales Fermi. Dette er det samme som en femtometer.

FYS2140 vil vi operere med energiskalaer av typen 10^{-19} J. Da er det hensiktsmessig å innføre en ny energienhet, **elektronvolt**, med enhet eV. Vi vet at elektronets ladning er gitt ved

$$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}, \quad (1.4)$$

og at $1 \text{ J} = 1 \text{ C} \cdot 1 \text{ V}$. Vi definerer 1 eV som *den mengde kinetisk energi som et elektron får når det akselereres gjennom en potensialdifferanse på 1V*. Dette betyr at $1 \text{ eV} = e \cdot 1 \text{ V} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot \text{V}$, dvs.

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}. \quad (1.6)$$

For å illustrere bruken av MeV/c^2 som masseenheter, ser vi på hvileenergien til elektronet, $E_0^{\text{elektron}} = m_e c^2$, hvor massen til elektronet er $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$. Regner vi ut denne hvileenergien i enheten eV, får vi

$$m_e c^2 = 9.11 \times 10^{-31} \cdot (3 \times 10^8)^2 \text{ J} \simeq 8.20 \times 10^{-14} / 1.602 \times 10^{-19} \text{ eV}, \quad (1.7)$$

som gir

$$E_0^{\text{elektron}} = m_e c^2 = 5.11 \times 10^5 \text{ eV} \quad (1.8)$$

eller 0.511 MeV, med $1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$. **For massen brukes ofte**

$$m_e = E_0^{\text{elektron}} / c^2, \quad (1.9)$$

dvs. at vi skriver $m_e = 0.511 \text{ MeV}/c^2$, som leses MeV-over-c-i-andre. For protonet har vi $m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$.

I atomfysikk, faste stoffers fysikk og molekylfysikk har vi energier på størrelsesorden **noen få eV**, i all hovedsak er det Coulombvekselvirkningen som gir vesentlige bidrag til disse systemenes fysikk. I kjerne- og partikkelfysikk opererer vi med energier av størrelsesorden MeV (elektronet og de lette kvarkene), GeV (= 1000 MeV) (tunge kvarker, leptoner og de elektrosvake bosonene) eller TeV (massen til den mystiske Higgs partikkelen).² Maksimal bindingsenergi til kjerner, når vi ser bort fra hvileenergien til protoner og nøytroner, er på ca. 8 MeV (^{56}Fe). Atomær masseenheter gitt ved 1 u, som er 1/12 av massen til ^{12}C , tilsvarer $1.6604 \times 10^{-27} \text{ kg}$ eller $931.48 \text{ MeV}/c^2$.

En annen nyttig størrelse vi vil møte er Plancks konstant h

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js} = 4.136 \times 10^{-15} \text{ eVs}, \quad (1.10)$$

dog brukes oftest \hbar (leses h-strek)

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js} = 6.582 \times 10^{-16} \text{ eVs}. \quad (1.11)$$

I tillegg forekommer \hbar ofte sammen med lyshastigheten c , slik at en ny 'hendig' størrelse er

$$\hbar c = 197.3 \text{ eV nm (MeV fm)} \quad (1.12)$$

²Andre prefikser for tierpotenser finnes i tabell 1.1.

eller

$$hc = 1240 \text{ eV nm (MeV fm)}. \quad (1.13)$$

Et lurt lite triks: i en del sammenhenger kan det faktisk være lurt å gange med c over og under brøkstreken for å få inn denne konstanten! Dette trikset får dere garantert bruk for i obligene, så la meg demonstrere det med et lite eksempel. Anta at vi skal regne ut tallverdien til uttrykket

$$\frac{h}{m_e c}$$

der h er Planck's konstant, m_e er elektronets hvilemasse og c er lyshastigheten. Her kunne vi satt inn h i enheter Js, lyshastigheten i m/s og m i kg. Dette hadde medført et par enormt små tierpotenser (10^{-34} og 10^{-31}) i mellomregningen. La oss i stedet gange med c både over og under brøkstreken og skrive om uttrykket på følgende måte:

$$\frac{h}{m_e c} = \frac{hc}{m_e c^2} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{0.511 \times 10^6 \text{ eV}} \simeq 0.002 \text{ nm}.$$

Til slutt nevner vi at faktoren i Coulombvekselvirkningen mellom f.eks. to elektroner

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad (1.14)$$

hvor ϵ_0 er permittiviteten og r er absoluttverdien av avstanden mellom de to elektronene, kan settes som

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44 \text{ eV nm} \quad (1.15)$$

Tabell 1.1: Standard metrisk notasjon for tierpotenser

Potens	prefiks	symbol
10^{18}	exa	E
10^{15}	peta	P
10^{12}	tera	T
10^9	giga	G
10^6	mega	M
10^3	kilo	k
10^{-2}	centi	c
10^{-3}	milli	m
10^{-6}	micro	μ
10^{-9}	nano	n
10^{-12}	pico	p
10^{-15}	femto	f
10^{-18}	atto	a

Vi kommer ellers — siden vi ikke er fullstendig riv rav ruskende gale, eller engelske — til å bruke det internasjonale enhetssystemet, SI, hvor dynamiske variable uttrykkes i fem fundamentale enheter, meter (m), kilogram (kg), sekund

(s), ampere (A) og kelvin (K). I kvantefysikk er det, som vist ovenfor, mer hensiktsmessig å bruke enheter som eV for energi. I tabell 1.2 finner dere flere konstanter som blir brukt i dette kurset.

Tabell 1.2: Nyttige konstanter

Konstant	symbol	verdi
Lyshastighet	c	3.00×10^8 m/s
Gravitasjonskonstant	G_N	6.67×10^{-11} Nm ² /kg ²
Coulombkonstant	k	8.99×10^9 Nm ² /C ²
Boltzmannkonstant	k_B	1.38×10^{-23} J/K $= 8.61 \times 10^{-5}$ eV/K
Elektronladning	e	1.60×10^{-19} C
Plancks konstant	h	6.63×10^{-34} Js $= 4.136 \times 10^{-15}$ eVs
	hc	1240 eVnm
	$\hbar = h/2\pi$	1.055×10^{-34} Js $= 6.582 \times 10^{-16}$ eVs
	$\hbar c$	197.3 eV nm
Bohrradius	$a_0 = \hbar^2/m_e k e^2$	0.0529 nm
Finstrukturkonstanten	α	1/137.036
Coulombfaktor	$k e^2$	1.44 eV nm
Elektronets gyromagnetisk faktor	g_e	2.002
Grunntilstand hydrogen	$E_0 = -k e^2/2a_0$	-13.606 eV
Rydberg	Ry	13.606 eV
Nukleær magneton	$\mu_N = e\hbar/2m_p$	3.152×10^{-14} MeV/T

Tabell 1.3: Masser til viktige partikler

Partikkel	i kg	i MeV/c ²	i u
elektron	9.109×10^{-31} kg	0.511 MeV/c ²	0.000549 u
proton	1.672×10^{-27} kg	938.3 MeV/c ²	1.007277 u
nøytron	1.675×10^{-27} kg	939.6 MeV/c ²	1.008665 u
hydrogen	1.673×10^{-27} kg	938.8 MeV/c ²	1.007825 u

Annen informasjon som er nyttig å huske er at bølgelengden til synlig lys går fra 700 nm (mørk rød) til 400 nm (mørk fiolett).

1.3 Plancks kvantiseringshypotese

I dette avsnittet skal vi se vårt første eksempel på *kvantisering*. Med kvantisering menes at en gitt fysisk størrelse bare antar visse, diskrete verdier. Et velkjent eksempel på dette er elektrisk ladning: Som dere vet, observeres fri ladning alltid som et heltallig multiplum av elektronladningen e — ladning er med andre ord kvantisert.³ Det vi skal se her, er at *energi* kan være kvantisert. Denne hypotesen

³Kvarker, dvs. byggestenene som f.eks. nøytroner og protoner består av, har tredjedels ladninger, men de opptrer ikke fritt — bare i kombinasjoner med heltallsladning. Det finnes også

ble introdusert av Planck i 1900 og løste, som vi skal se, mysteriet med at klassisk fysikk ikke kunne forklare eksperimentelle observasjoner av såkalt sort legeme stråling. Plancks kvantiseringshypotese utgjorde det avgjørende bruddet med klassisk fysikk og la grunnlaget for utviklingen av kvantemekanikken.

Et av problemene en ikke var i stand til å forklare vha. klassisk fysikk var frekvensfordelingen til elektromagnetisk (e.m.) stråling fra et legeme ved en gitt temperatur, f.eks. sola eller en vanlig kokeplate. Når vi setter på en kokeplate merker vi i begynnelsen ikke noen nevneverdig fargeforandring, selv om vi registrerer at den blir litt varmere. Etter en stund blir den rødgledende og innbyr neppe til å bli tatt på. Men før vi definerer problemet noe nærmere, la oss ta for oss noen definisjoner:

- Termisk stråling : den e.m. stråling som sendes ut fra et legeme som resultat av dets temperatur. Alle legemer sender ut (emisjon) og mottar (absorpsjon) e.m. stråling.
- Ved gitt temperatur T er vi interessert i å finne fordelingen av emittert stråling som funksjon av den e.m. strålingen sin frekvens ν eller bølgelengde λ . Vi minner om følgende relasjon mellom frekvensen ν og bølgelengden λ

$$\nu = \frac{c}{\lambda}.$$

- Frekvensfordelingen

$$M_\nu(T)$$

kalles spektralfordelingen eller kanskje bedre fordelingsfunksjonen for frekvensspekteret, eller bare frekvensfordelingen. Denne fordelingen gir oss **hvor mye utstrålt energi vi får fra en gjenstand ved temperatur T per areal per tid per frekvensenhet**. Figur 1.1 viser eksempler på frekvensfordelinger for ulike temperaturer fra et såkalt sort legeme.⁴ Figuren viser også resultatet fra klassisk teori. Denne fordelingsfunksjonen viser en divergerende oppførsel (ultrafiolett katastrofe) ved høye frekvenser (eller små bølgelengder), i strid med eksperimentelle resultat.

- Integrerer vi over alle frekvenser

$$M(T) = \int_0^\infty M_\nu(T) d\nu$$

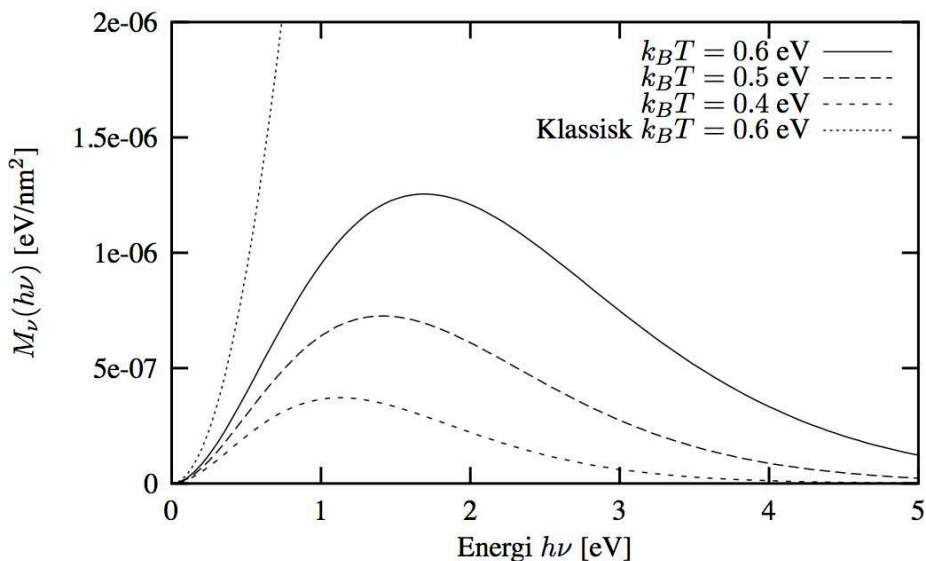
får vi totalt utstrålt energi per sekund per areal ved gitt temperatur T . Dimensjonen til $M(T)$ er da $[M(T)] = \text{J}/(\text{m}^2\text{s}) = \text{W}/\text{m}^2$. Denne størrelsen kalles radiansen.

- **Vår utfordring er å finne fram til en forklaring for den eksperimentelle formen til $M_\nu(T)$.**

Det klassiske eksempel på en slik frekvensfordeling $M_\nu(T)$ var gitt ved stråling fra et såkalt sort legeme. Et sort legeme er et idealisert objekt som ikke

eksempler på ikke-heltallige ladninger i systemer som har mindre enn tre romlige dimensjoner, men disse skal vi ikke gå inn på her.

⁴Strengt tatt så viser figuren fordelingen mhp. energi og ikke frekvens, men, for å foregripe begivenhetene litt, vi skal se at energien til et foton jo et nettopp $E = h\nu$, slik at hver verdi for energi tilsvarer en spesiell frekvens.



Figur 1.1: Figuren viser frekvensfordelingen fra Plancks kvantiseringspostulat i ligning (1.24), som er tilnærmet lik det målte resultatet, og den klassiske fordelingsfunksjonen fra ligning (1.20). Legg merke til at energi er i enhet eV og frekvensfordelingen har enheten eV/nm².

reflekterer noe av den innkommende e.m. stråling. All innkommende e.m. stråling blir absorbert. Grunnen til at det kalles sort legeme var at ved lave temperaturer (tenk igjen på en kokeplate som nettopp er satt på) så forble legemet mørkt, selv om det sendte ut termisk stråling. Den var bare ikke synlig for oss. Frekvensfordelingen til et sort legeme er uavhengig av materiale, slik at dets frekvensfordeling er en universell funksjon av frekvens ν og temperatur T .

På slutten av 1800-tallet hadde en gjennomført flere eksperimenter for å observere utstrålt e.m. energi fra en modell som skulle representere et såkalt sort legeme. Modellen var et hulrom som ble varmet opp til en bestemt temperatur. Atomene i materialet til dette hulrommet ble da satt i svingninger og sendte ut e.m. stråling (mere om dette i FYS2160). En kan tenke seg atomene som harmoniske oscillatorer ("kuler på en fjær") som vibrerer og sender ut stråling. Ved termisk likevekt — like mye stråling sendes ut og absorberes — er hulrommet fylt av e.m. stråling. **Teknisk sett vil dette svare til stående e.m. bølger** og en kan da regne ut energien til e.m. feltet i et slikt hulrom. Hulrommet hadde et hull, hvis størrelse var mye mindre enn hulrommets overflate. Elektromagnetisk stråling ble emittert fra dette hullet som ideelt sett skal representere et sort legeme. Fordelen med dette oppsettet var at det lot seg både gjennomføre eksperimentelt og at en kunne regne ut teoretisk frekvensfordelingen. Den typiske formen på frekvensfordelingene som ble målt, ser dere i figur 1.1.

Basert på måldata kom en fram til at radiansen til et sort legeme kan skrives som

$$M(T) = \sigma T^4, \quad (1.16)$$

hvor σ er en konstant. Dette uttrykket kalles Stefan-Boltzmanns lov. Det var Stefan som i 1879 foreslo, basert på data, at radiansen for et sort legeme skulle være proporsjonal med T^4 . Et annet viktig empirisk resultat var *Wiens for-*

skyvningslov som sier at det er en enkel sammenheng mellom temperaturen og bølgelengden λ_{max} der frekvensfordelingen har sitt maksimum:

$$\lambda_{max}T = 2.897 \times 10^{-3} \text{ Km} \quad (1.17)$$

Mens vi er inne på temaet målinger tar vi et par eksempler på sort stråling som er målt i naturen: sola stråler som et sort legeme med en temperatur på rundt 5800 K. Den kosmiske mikrobølge bakgrunnsstrålingen fra perioden 300.000 år etter Big Bang tilsvarer strålingen fra et sort legeme med en temperatur på 2.7 K (ca. -270 grader celsius).

La oss nå se hva som skjer når man prøver å utlede disse resultatene fra klassisk fysikk. En kan vise at

$$M_\nu(T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \langle E \rangle, \quad (1.18)$$

hvor $\langle E \rangle$ er den gjennomsnittlige energien per svingemode til e.m. feltet i hulrommet. (Når dette feltet beskrives som stående bølger i hulrommet). Dette feltet skal igjen gjenspeile svingingene til atomene i materialet til hulrommet. Utledningen av dette uttrykket er ikke pensum, men vi nevner at faktoren $2\pi\nu^2/c^2$ essensielt (opp til en multiplikativ konstant) er antall tillatte svingemoder per enhets-frekvensintervall rundt frekvensen ν . Dere kommer til å lære i FYS2160 hvordan man teller opp antall mulige stående bølger per frekvensintervall. Her merker vi oss bare at dette antallet er proporsjonalt med ν^2 .

Klassisk fysikk ga videre at

$$\langle E \rangle = k_B T, \quad (1.19)$$

hvor k_B er Boltzmanns konstant og T er temperaturen målt i Kelvin. Utledningen av dette uttrykket kommer dere igjen til å lære mer om i FYS2160, men det er kanskje ikke overraskende fra et klassisk standpunkt at den gjennomsnittlige energien er direkte proporsjonal med temperaturen (se også avsnitt 1.3.2). Bruker vi dette, får vi altså at

$$M_\nu(T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} k_B T. \quad (1.20)$$

Dersom vi integrerer det siste uttrykket for å finne radiansen

$$M(T) = \int_0^\infty \frac{2\pi\nu^2}{c^2} k_B T d\nu, \quad (1.21)$$

ser vi at radiansen divergerer (går mot uendelig), i strid med den empiriske oppførselen i Stefan-Boltzmanns lov. Dette kalles den ultrafiolette katastrofen. Problemet ligger i uttrykket for $\langle E \rangle$. For å undertrykke divergensen som kommer fra en ren telling av tillatte tilstander (det må være plass til flere stående bølger ved høyere frekvenser siden bølgelengden er mindre), måtte den gjennomsnittlige energien vært en eksplisitt funksjon av ν – nærmere bestemt må den være en funksjon som går raskt mot null for store ν , hvis den skal kunne reproducere de observerte frekvensfordelingene.

Det var akkurat dette Planck oppnådde med sin hypotese. Det Planck postulerte var at: **den elektromagnetiske strålingen i hulrommet kan representeres som bestående av et stort antall kvantiserte enheter (“energi-pakker”) som kan ha energi**

$$\epsilon_n = nh\nu \quad (1.22)$$

der h er Planck's konstant, ν er strålingens frekvens, og n er et heltall. Det er m.a.o. bare heltalls multipler av "energikvantumet" $h\nu$ som er tillatt – i analogi med kvantiseringen av elektrisk ladning.

Basert på Plancks hypotese kan en utlede et alternativt uttrykk for $\langle E \rangle$. For interesserte finnes en delvis utledningen mot slutten av dette avsnittet. Her skal vi konsentrere oss om det viktige resultatet:

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (1.23)$$

som dermed gir

$$M_\nu(T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (1.24)$$

hvilket er i samsvar med eksperiment. Dette er vårt første møte med denne viktige konstanten h , som dere kommer til å se mye til i løpet av kurset. Legg også merke til at $\langle E \rangle \rightarrow k_B T$ i grensene $T \rightarrow \infty$ eller $\lambda \rightarrow \infty$ (dvs. $\nu \rightarrow 0$), som er grensene der en forventer at klassisk fysikk skal gjelde.

Funksjonen i (1.24) har det riktige forløp for alle verdier av ν , og er plottet i figur 1.1. I denne figuren har vi valgt enheter eV og nm. Grunnen er, som dere sikkert allerede har gjettet, at dersom vi ønsker å sette naturkonstantene k_B , h og c i enheter av henholdsvis J/K, Js og m/s², får vi inn ekstremt store (eller ekstremt små) tall. Dette er nok et eksempel på at "smart" valg av enheter gir oss mer elegante og mer håndterlige tallverdier. For å konvertere til disse enhetene har multipliserer vi (1.24) med h^2 i teller og nevner:

$$M_\nu(T) = \frac{2\pi}{h^2 c^2} \frac{(h\nu)^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}, \quad (1.25)$$

og ved å sette $x = h\nu$ finner vi

$$M_x(T) = \frac{2\pi}{h^2 c^2} \frac{x^3}{e^{x/k_B T} - 1}, \quad (1.26)$$

som gir, med $hc = 1240$ eV nm,

$$M_x(T) = \frac{2\pi}{(1240)^2} \frac{x^3}{e^{x/k_B T} - 1}, \quad (1.27)$$

i enheten eV/nm² når både x og "temperaturen" $k_B T$ er uttrykt i eV. Når vi snakker om en temperatur på 1 eV (husk at 1 eV = 1.6×10^{-19} J) svarer dette derfor til

$$T = 1 \text{ eV}/k_B = 1.60 \times 10^{-19} \text{ J}/(1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}) = 11594 \text{ K}.$$

Vi kan nå utlede Stefan-Boltzmanns lov vha. Plancks uttrykk (1.23). Vi trenger da

$$M(T) = \int_0^\infty M_\nu(T) d\nu = \int_0^\infty \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu, \quad (1.28)$$

og med variabelbytte $x = h\nu/k_B T$ får vi

$$M(T) = \frac{2\pi k_B^4}{c^2 h^3} T^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \quad (1.29)$$

Dette siste integralet kan slås opp i tabeller, f.eks. i Rottmann som gir:

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}. \quad (1.30)$$

Da får vi

$$M(T) = \sigma T^4, \quad (1.31)$$

med

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} = 5.676 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4, \quad (1.32)$$

i godt samsvar med verdier fra empiriske data.

Det viktige budskapet er at Planck forlot den klassiske måten å regne ut den midlere energien $\langle E \rangle$. Istedet for å tillate alle mulige verdier av energien, krevde han at kun bestemte diskrete verdier kunne tas med i utregningen av $\langle E \rangle$. Det sorte legemet kan altså bare emitte bestemte kvanta med energi.

Mot slutten av avsnittet har vi tatt med ytterlige et eksempel som involverer bruk av frekvensfordelingen; der kommer vi til å utlede Wiens forskyvningslov.

Det er en ting som er viktig å ha klart for seg. Planck hadde måledataene foran seg! Han visste dermed hva svaret skulle være og prøvde å tilpasse dataene med ulike funksjoner. Det er på dette viset vi ofte går fram i fysikk. I mange tilfeller har vi data fra eksperiment som vi ikke kan forklare med gjeldende teorier, andre ganger har vi teoretiske prediksjoner på fenomen som ikke er målt/observert. Fysikk representerer syntesen av eksperiment og teori med den målsetting å avdekke naturens lover.

Det spesielle med e.m. stråling i et hulrom er at det gir opphav til stående e.m. bølger som utviser enkle harmoniske svingninger. Det særegne med denne type problem er at energien antar diskrete verdier⁵. Selv om Plancks hypotese opprinnelig ble formulert for hulromsstrålingen til et sort legeme, viser den seg å være mer generell enn som så. Plancks hypotese (1900) kan dermed formuleres som følger:

Enhver fysisk størrelse som utviser enkle harmoniske svingninger har energier som tilfredsstiller

$$E_n(\nu) = nh\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

hvor ν er frekvensen til svingningen og h er en universell konstant.

En idealisert pendel med lite utslag utviser også enkle harmoniske svingninger, og vi kan jo da stille spørsmålet om hvorfor kan vi beskrive en pendel vha. klassisk fysikk og se bort fra kvantiseringen av energiene?

Dette spørsmålet belyser et viktig aspekt ved vår forståelse av fysikk og framgangsmåter for å studere fysiske systemer. *Det dreier seg om energiskalaer og størrelsen på systemet.* Gang på gang vil vi komme over eksempler på det i dette kurset. Dette dikterer igjen hvorvidt vi må bruke den kvantemekaniske

⁵I tilknytning til Schrödingers ligning skal vi vise dette for en fjær som svinger.

formalismen til å beskrive systemet, eller om vi klarer oss med Newtonsk mekanikk. Merk dere at Newtonsk mekanikk ikke er en teori som er *uavhengig* av kvantemekanikken. Den bør snarere sees på som et *grensetilfelle* av kvantemekanikken. Ser vi på store nok system, er de to formalismene ekvivalente.

La oss bruke pendelen til å se nærmere på dette. Anta at vi har en idealisert pendel, vi ser bort fra luftmotstand osv. Vi gir pendelen en masse $m = 0.01$ kg, en lengde på $l = 0.1$ m og vi tillater at den kan svinge ut en vinkel på maks $\theta = 0.1$ rad.

Vi spør deretter om hvor stor energiforskjellen er mellom kvantetilstander målt i forhold til maks potensiell energi pendelen kan ha når vi anvender Plancks hypotese. Maks potensiell energi E er gitt ved

$$E = mgs = mgl(1 - \cos \theta) \simeq 5 \times 10^{-5} \text{ J}, \quad (1.33)$$

hvor s er maksimal høyde som pendelen kan oppnå ved utsving og g er tyngdeakselerasjonen. Svingefrekvensen ν finner vi også ved å anvende en velkjent traver

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{g}{l}} = 1.6 \text{ s}^{-1}. \quad (1.34)$$

Nå skal vi anvende Plancks hypotese for å regne energiforskjellen ΔE

$$\Delta E = (n + 1)h\nu - nh\nu = h\nu \sim 10^{-33} \text{ J}. \quad (1.35)$$

Forholdet

$$\frac{\Delta E}{E} \sim 10^{-29}, \quad (1.36)$$

viser at vi kunne praktisk talt satt denne energiforskjellen lik null. Det finnes ikke noe måleinstrument som kan måle en slik energiforskjell.⁶ Legg merke til at det er den lave verdien for Plancks konstant som gjør at energiforskjellen blir neglisjerbart liten. I klassisk fysikk kan vi derfor sette $h = 0$ uten at resultatet endrer seg nevneverdig.

Det blir annerledes når $\Delta E/E$ ikke er neglisjerbar. For høyfrekvent e.m. stråling er dette tilfelle, og da kunne ikke klassisk fysikk lenger forklare fenomenene. Dersom E er så liten at $\Delta E = h\nu$ er på samme størrelse, da er vi på energiskalaer som ikke lenger kunne og kan forklares uten at ny teori anvendes.

Vi skal se på mange flere slike tilfeller i dette kurset.

⁶La oss nevne for de spesielt interesserte at en klassisk svingetilstand *ikke* svarer til en bestemt n , men snarere til en kombinasjon av mange forskjellige n -verdier. Man kommer altså ikke fra en egentilstand for en kvantemekanisk oscillator til en klassisk pendel bare ved å ta grensen $n \rightarrow \infty$.

1.3.1 Utledning av Wiens Forskyvningslov

Vi runder av dette avsnittet med utledningen av Wiens forskyvningslov. På samme måte som Stefan-Boltzmanns lov kan den utledes fra Plancks uttrykk for energien, (1.23). Målet vårt er å beregne bølgelengden λ_{max} der spektralfordelingen har sitt maksimum. Til nå har vi jobbet med spektralfordelingen $M_\nu(T)$, dvs behandlet den som en funksjon av frekvensen. Vi må altså begynne med å skifte variable fra frekvensen ν til bølgelengden $\lambda = c/\nu$. Dette er ikke så enkelt som bare å erstatte ν med c/λ i funksjonsuttrykket. Teknisk sett får man inn en “Jacobideterminant”. Dette kan forstås ved å tenke på at *radiansen*, dvs. *integralet* av spektralfordelingen, som jo er en målbar størrelse, må være uavhengig av hvilken variabel vi integrerer over. Så vi må kreve at

$$\int_0^\infty M_\nu(T) d\nu = \int_0^\infty M_\lambda(T) d\lambda. \quad (1.37)$$

Variabeltransformasjonen blir da, ved bruk av kjerneregelen,

$$\int_0^\infty M_\nu(T) d\nu = \int_\infty^0 M_{\nu=c/\lambda}(T) \frac{d\nu}{d\lambda} d\lambda = - \int_0^\infty M_{\nu=c/\lambda}(T) \left(-\frac{c}{\lambda^2}\right) d\lambda \quad (1.38)$$

dvs.

$$M_\lambda(T) = \frac{c}{\lambda^2} M_{\nu=c/\lambda}(T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1}. \quad (1.39)$$

For å forenkle notasjonen, innfører vi variabelen $x = hc/(k_B T \lambda)$ og har da at

$$M_\lambda(T) = \frac{2\pi(k_B T)^5}{h^4 c^3} \frac{x^5}{e^x - 1} \equiv \frac{2\pi(k_B T)^5}{h^4 c^3} g(x). \quad (1.40)$$

Vi er ute etter å finne maksimum for $M_\lambda(T)$, dvs. punktet der dens deriverte med hensyn på λ er lik null. Merk at vår hjelpevariabel x går som *den inverse* av λ , men det kan enkelt vises at $dM_\lambda/d\lambda$ og $dg(x)/dx$ har felles nullpunkt (vis dette selv!). Vi kan altså finne maksimum ved å derivere med hensyn på x i stedet, hvilket er enklere:

$$\frac{dg}{dx} = \frac{x^4}{e^x - 1} \left(5 - \frac{x}{1 - e^{-x}} \right). \quad (1.41)$$

Dere kan selv sjekke ved innsetting at dette uttrykket er lik null for $x_{maks} \simeq 4.965$. Bruker vi at $x_{maks} = hc/(k_B T \lambda_{maks})$ og setter inn for naturkonstantene, får vi

$$\lambda_{maks} \cdot T = 2.897 \cdot 10^{-3} \text{ Km} \quad (1.42)$$

Dette er Wiens forskyvningslov. Vi ser at den teoretiske utledningen er i utmerket samsvar med de eksperimentelle målingene.

1.3.2 Utledning av gjennomsnittsenergi per svingemodus

I denne utledningen tar vi utgangspunkt i den såkalte Boltzmanfordelingen fra statistisk mekanikk. Denne sier at sannsynligheten P for å finne et system (f.eks. en e.m. oscillator) med energi E som er høyere enn minimumsenergien E_0 i et ensemble av systemer ved temperaturen T , er gitt ved

$$P(E) = P_0 e^{-(E-E_0)/k_B T}, \quad (1.43)$$

hvor P_0 er sannsynligheten for å finne systemet ved minimumsenergien og k_B er Boltzmanns konstant.

For en kontinuerlig fordelt energi er gjennomsnittsenergien definert som

$$\langle E \rangle \equiv \frac{\int_0^\infty E \cdot P(E) dE}{\int_0^\infty P(E) dE}. \quad (1.44)$$

hvor $P(E)$ er sannsynligheten for å finne svingemoden ved energi E . Ved å bruke (1.43) får vi

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty E e^{-E/k_B T} dE}{\int_0^\infty e^{-E/k_B T} dE} = k_B T, \quad (1.45)$$

som vi har brukt over. Hvis energien imidlertid er diskret fordelt — kvantisert — så er definisjonen av gjennomsnittsenergien

$$\langle E \rangle \equiv \frac{\sum_{n=0}^\infty E_n \cdot P(E_n)}{\sum_{n=0}^\infty P(E_n)}. \quad (1.46)$$

Ved å sette inn Plancks hypotese (1.22) får vi

$$\langle E \rangle \equiv \frac{\sum_{n=0}^\infty (nh\nu) e^{-nh\nu/k_B T}}{\sum_{n=0}^\infty e^{-nh\nu/k_B T}}. \quad (1.47)$$

Det viser seg at denne summen er vanskeligere å regne ut enn integralet, men ved å bruke et par triks kommer vi i mål. Det første trikset er

$$\frac{1}{1-r} = \sum_{n=0}^\infty r^n, \quad (1.48)$$

som gir

$$\sum_{n=0}^\infty e^{-nh\nu/k_B T} = \frac{1}{1 - e^{-h\nu/k_B T}}. \quad (1.49)$$

Det andre trikset setter $x = h\nu/k_B T$ og bruker

$$\sum_{n=0}^\infty n e^{-nx} = -\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^\infty e^{-nx} = -\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{1 - e^{-x}} \right) = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2}. \quad (1.50)$$

Tilsammen gir dette

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (1.51)$$

Kapittel 2

LYSETS PARTIKKELEGENSKAPER

I dette kapitlet skal vi se på tre ulike eksempler som illustrerer at elektromagnetisk stråling (lys) består av kvantiserte energipakker, kalt *fotoner*. Fotonene oppfører seg på mange måter som partikler, bl.a. ved at de kan delta i elastiske støt med f.eks. elektroner. Dere husker sikkert fra klassisk mekanikk at for å regne på elastiske støt, må man sette opp uttrykk for bevaring av energi og bevegelsesmengde. Dette kan også gjøres ved støt mellom fotoner og elektroner. Så fotoner kan tilordnes ikke bare en energi, men også bevegelsesmengde (selv om de er masseløse).

Dere husker fra forrige kapittel at Planck hadde postulert at strålingsfeltet i hulrommet bare utveksler energi i multipler av $h\nu$ med vibrerende partikler i veggene. Det var Einstein som gikk et skritt videre i tolkningen av dette, og foreslo at e.m. stråling *i seg selv* er diskret og består av de nevnte fotonene. Denne teorien, som kom med i sitt *annus mirabilis* 1905, ble mottatt med stor skepsis i samtiden, men er i ettertid blitt nøye bekreftet eksperimentelt.¹

2.1 Fotoelektrisk effekt

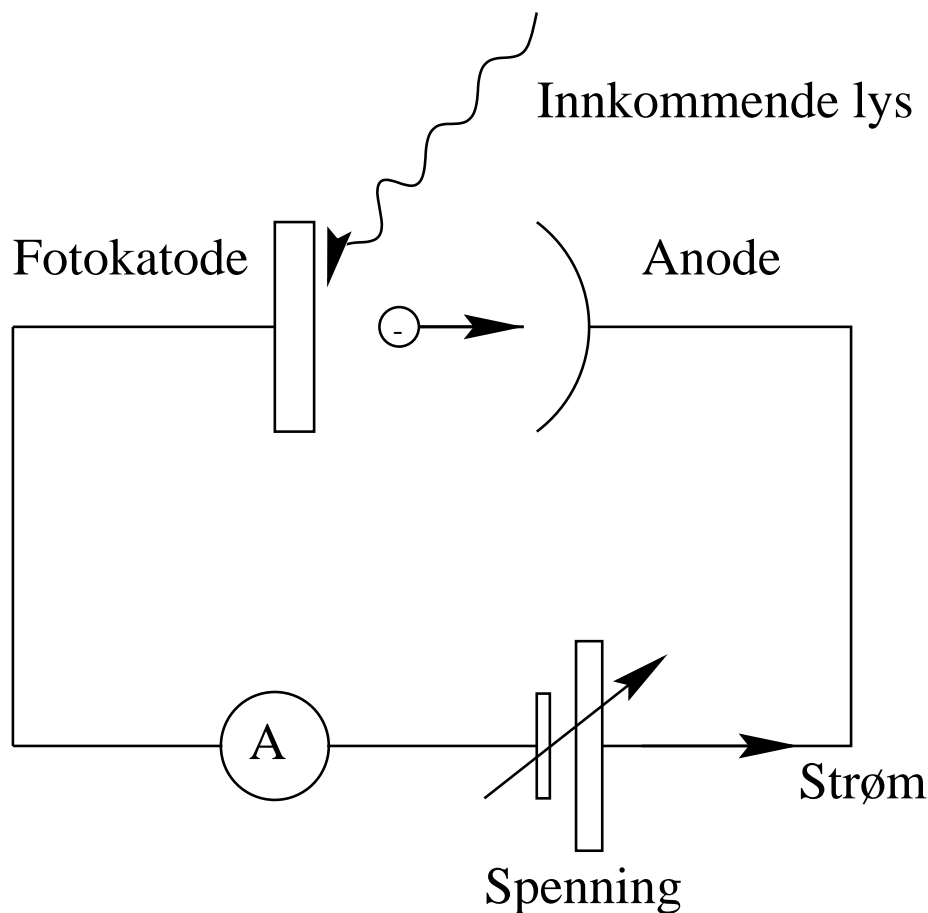
Den fotoelektriske effekt ble bl.a. studert av Hertz i 1887. Essensen i denne effekten er at lys (e.m. stråling) sendes inn mot en metallplate, og elektroner blir emittert fra platen som en følge av dette. Figur 2.1 viser et oppsett for måling av fotoelektrisk effekt. Kretsen er satt opp slik at elektronene som frigjøres fra metallplaten (fotokatoden) trekkes mot anoden (ved positive spenninger), slik at det går strøm. Snur en retningen på spenningen, bremser man ned elektronene som beveger seg mot anoden; med sterk nok motspenning (negativ spenning) kan man da *hindre* elektronene i å nå anoden.

Resultatet av målingene i et tenkt forsøk er oppsummert i figur 2.2. Første del av figuren (venstre) viser en skisse av fotostrøm som funksjon av spenning ved to ulike lysintensiteter, men med samme frekvens på lyset. Vi ser at fotostrømmen går til null ved en gitt negativ spenning $-V_0$ som er uavhengig av intensiteten.

¹Selv om Einstein i dag er mest kjent for sin relativitetsteori, var det for forklaringen av den fotoelektriske effekt han fikk sin eneste Nobelpris, i 1921.

Dette må bety at det finnes en øvre grense K_{maks} for den kinetiske energien til elektronene som slås løs fra metallplaten; når $eV_0 = K_{maks}$, er motspenningen så sterk at selv disse mest energirike elektronene bremses ned før de når anoden. Den maksimale kinetiske energien K_{maks} til de utsendte elektronene er altså uavhengig av intensiteten til strålingen.

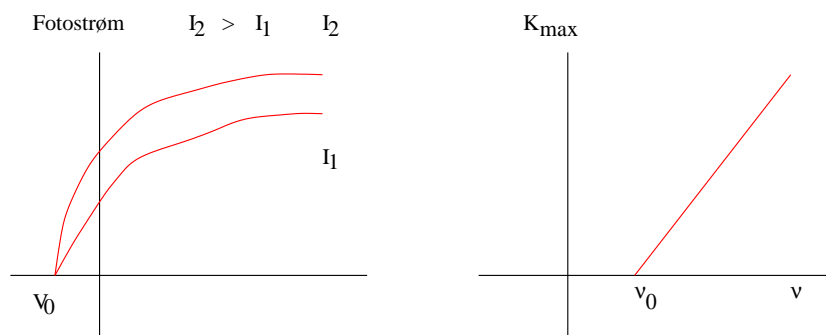
Videre ser vi av andre del av figuren (høyre) at det er minste frekvens ν_0 den innkommende e.m. strålingen må ha for at elektroner skal bli sendt ut i det hele tatt, samt at elektronenes maksimale kinetiske energi øker lineært med lysets frekvens.



Figur 2.1: Skjematisk oppsett for fotoelektrisk effekt.

Oppsumert er det tre viktige egenskaper ved den fotoelektrisk effekt som ikke kan forklares vha. e.m. bølgeteori for lys:

1. Når intensiteten til lysstrålen økes, skal også amplituden til den oscillerende elektriske vektoren \mathbf{E} øke. Siden kraften feltet utøver på et elektron er $e\mathbf{E}$, burde også den kinetiske energien til elektronene øke. Men eksperiment viste at $K_{maks} = |eV_0|$ var uavhengig av intensiteten. Dette har blitt utførlig uttestet for et intensitetssprang på 10^7 .



Figur 2.2: Fotostrøm som funksjon av påsatt spenning og kinetisk energi som funksjon av frekvensen til den innkommende e.m. stråling.

2. I henhold til klassisk e.m. teori, skal den fotoelektriske effekt forekomme for enhver frekvens, gitt at lyset er intenst nok til å gi den nødvendige energien til elektronene. Dette var ikke tilfelle, jf. oppdagelsen av en nedre frekvens ν_0 . For lavere frekvenser forekommer ikke fotoelektrisk effekt, et resultat som er uavhengig av intensiteten til lyset.
3. I henhold til klassisk teori, skulle det, når lys faller inn på et materiale, ta litt tid fra når elektronene begynner å absorbere e.m. stråling til de slipper fri fra materialet (se diskusjon nedenfor). *Heller ikke noen slik tidsforskjell er detektert.*

La oss utdype det siste punktet litt. Anta at vi har en plate av kalium som er 1 m fra en lyskilde som sender ut e.m. stråling med effekt $1 \text{ W} = 1 \text{ J/s}$. Vi antar deretter at et elektron i denne kaliumplaten beveger seg i en sfære med radius 10^{-10} m . Energien som trengs for å løsrive det svakest bundne elektron i kalium er 2.1 eV. Spørsmålet vi stiller oss da er hvor lang tid tar det før dette ene elektronet oppnår en energi på 2.1 eV når vi sender e.m. stråling fra lyskilden.

Tenker vi oss at lyskilden sender ut e.m. stråling som sfæriske bølger, vet vi at overflaten til denne lyskjeglen ved 1 m fra lyskilden er gitt ved $A = 4\pi \text{ m}^2$. Arealet som elektronet kan absorbere energi fra er $A_e = 2\pi r^2 = 2\pi \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$. Total energi R som treffer A_e per sekund er da

$$R = 1 \text{ W} \cdot \frac{2\pi \cdot 10^{-20}}{4\pi} \simeq 0.031 \text{ eV/s}, \quad (2.1)$$

som igjen betyr at vi trenger

$$t = \frac{2.1}{0.031} \text{ s} \sim 68 \text{ s}, \quad (2.2)$$

for at dette elektronet skulle få nok energi til å kunne løsrides fra metallplaten. En slik tidsforsinkelse er altså aldri observert; tvertimot, elektronene blir emittert momentant.

For å løse de ovennevnte problemene med fotoelektrisk effekt, foreslo Einstein i 1905 at den e.m. energien er kvantisert i konsentrerte deler (energibunter), som senere har blitt døpt fotoner og kan beskrives som partikler med null masse som reiser med lysets fart. Han antok at energien til et slikt foton var bestemt av frekvensen til lyset:

$$E = h\nu \quad (2.4)$$

Han antok også at i den fotoelektriske effekt blir denne energibunten (fotonet) fullstendig absorbert av elektronet. Energibalansen uttrykkes ved

$$K = h\nu - w, \quad (2.5)$$

hvor w er arbeidet som kreves for å fjerne et elektron fra metallet.

Dersom vi ser på de svakest bundne elektroner har vi

$$K_{maks} = h\nu - w_0, \quad (2.6)$$

hvor w_0 kalles arbeidsfunksjonen, den minste energi som trengs for å fjerne det svakest bundne elektron for å unnsnippe de tiltrekkende kreftene (Coulomb) som binder et elektron til et metall. Arbeidsfunksjonen w_0 er spesifikk for ethvert materiale og har typiske verdier på noen få eV.

Når det gjelder problemene med klassisk teori, så kan vi se fra de to siste ligningene at hva angår punkt 1), så er det nå samsvar mellom eksperiment og teori. Det faktum at K_{maks} er proporsjonal med $E = h\nu$ viser at den kinetiske energien elektronene har er uavhengig av intensiteten til den e.m. strålingen. Dersom vi doubler intensiteten, så påvirker ikke det energien til et foton, som er gitt ved kun $E = h\nu$. Det som derimot skjer når intensiteten økes, er at flere elektroner løsriveres, slik at fotostrømmen ved gitt spenning øker, i samsvar med figur 2.2.

Hva angår punkt 2), ser vi at vi kan bestemme den minste frekvensen ved å sette den kinetiske energien til det frigjorte elektron lik null. Da har vi

$$h\nu_0 = w_0, \quad (2.7)$$

og kan dermed forklare observasjonen av en minste tillatt frekvens. En annen måte å si dette på er at om enkeltfotonene ikke har nok energi til å sparke løs et elektron vil det ikke hjelpe hvor mange fotoner vi har (vi regner dobbelttreff som for usannsynlig).

Innvending nummer tre kan også løses dersom en tenker seg at det er et foton som treffer elektronet, og overfører det meste av sin energi til elektronet. Da trenger en ikke å bombardere metallplaten av kalium med jevnt fordelt stråling. I den forbindelse kan det også være interessant å se på hvor mange fotoner som faktisk sendes inn. En enkel betraktning kan hjelpe oss her. Anta at vi sender inn monokromatisk (ensfarget) gult lys med bølgelengde $\lambda = 5890 \text{ Å}$ hvor $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$. Effekt per arealenhet M til flaten til lyskjeglen 1 m fra lyskilden er da (dvs. e.m. energi per areal per sekund)

$$M = \frac{1 \text{ J/s}}{4\pi \text{ m}^2} \simeq 8 \times 10^{-2} \text{ J/m}^2\text{s} \simeq 5 \times 10^{17} \text{ eV/m}^2\text{s}, \quad (2.8)$$

og regner vi ut energien til hvert foton har vi

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 3.4 \times 10^{-19} \text{ J} = 2.1 \text{ eV}. \quad (2.9)$$

Totalt antall fotoner N per areal per sekund blir

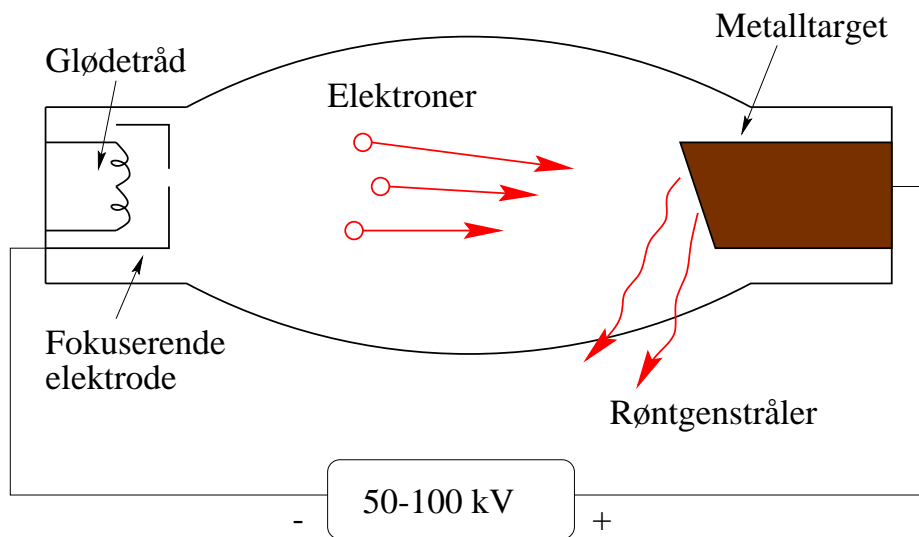
$$N = \frac{5 \times 10^{17} \text{ eV/m}^2\text{s}}{2.1 \text{ eV}} = 2.4 \times 10^{17} \text{ foton/m}^2\text{s}. \quad (2.10)$$

Dette fører til at omlag 0.02 fotoner treffer området der elektronet befinner seg hvert sekund. Så sannsynligheten for å ta ut et bestemt elektron er liten, men mengden elektroner i en bit metall (husk Avogadros tall!) gjør like vel til at mange elektroner emitteres på grunn av den fotoelektriske effekt.

Merk at fotonene blir absorbert i den fotoelektriske prosess. Det betyr at dersom vi skal bevare bevegelsesmengde og energi, så må elektronene være bundet til atomet/metallet, som da opplever en tilsvarende rekyl. Vi skal diskutere dette svært viktige poenget etter avsnittet om Compton effekten.

2.2 Röntgenstråling

Röntgenstråling svarer til det motsatte av fotoelektrisk effekt. Her sendes energirike elektroner som akselereres gjennom et potensialfall V_R på flere tusen volt, mot et metall. Figur 2.3 viser en skisse over et eksperimentelt oppsett for produksjon av Röntgenstråling.

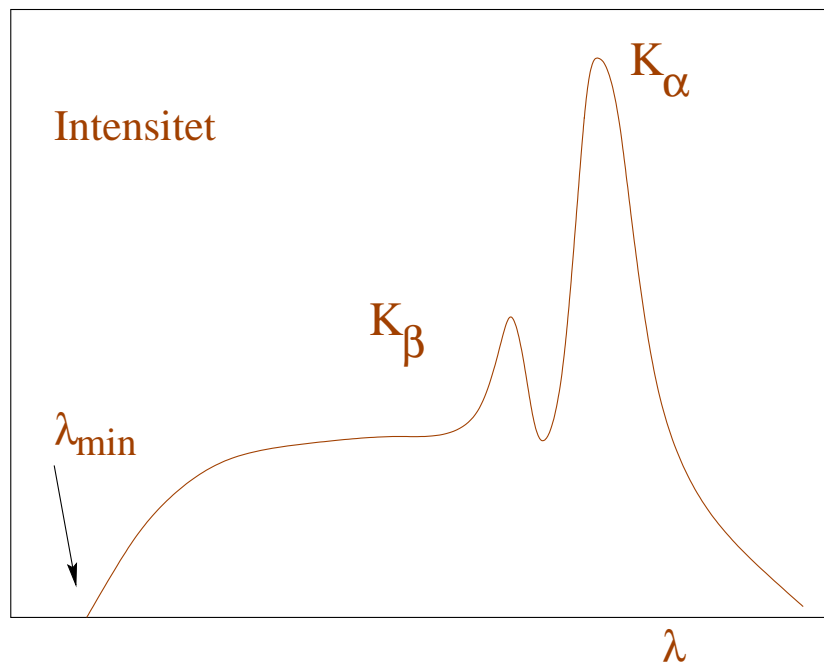


Figur 2.3: Eksperimentelt oppsett for produksjon av Röntgenstråling.

Elektronene vekselvirker med atomene i metallet via Coulomb vekselvirkningen, og overfører bevegelsesmengde til atomene. Elektronene bremses dermed ned, og i denne deakselerasjonen sendes det ut e.m. stråling i Röntgen området. Denne strålingen som skyldes nedbremsingen av elektronet kalles Bremsstrahlung fra tysk for bremsestråling. Dette svarer til e.m. stråling med frekvenser i størrelsesorden $10^{16} - 10^{20}$ Hz, bølgelengder i størrelsesorden $10^{-2} - 10$ nm og energier for fotoner i størrelsesorden $10^2 - 10^5$ eV.

Idet elektronet bremses ned, kan vi anta at det vekselvirker mange ganger med atomene i materialet og dermed får vi et kontinuerlig energispektrum for

utsendt e.m. stråling i Röntgen området, slik som vist i figur 2.4. De to toppene K_α og K_β skyldes bestemte eksiterte tilstander i metallet brukt under eksperimentet, se igjen figur 2.3. Vi kommer tilbake til dette under vår diskusjon om det periodiske systemet.



Figur 2.4: Intensitetsfordeling fra Röntgenstråling.

Dersom vi antar at atomene er mye tyngre enn det enkelte elektron, kan vi idealisere prosessen til å være gitt ved

$$e^- \rightarrow e^- + \gamma, \quad (2.11)$$

hvor vi heretter i dette kurset kommer til bruke symbolet γ for fotoner og e^- for elektroner. Kaller vi den kinetiske energien til elektronet før støtet for K_e og den etter for K'_e har vi følgende energibalanse

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = K_e - K'_e. \quad (2.12)$$

Det en observerte var at det fantes en minste bølgelengde (maksimal frekvens!) for utsending av Röntgenstråling, noe som ikke kunne forklares vha. klassisk e.m. teori. Dette svarer igjen til en maksimal energi som fotonene kan ha. Med en gitt innkommende kinetisk energi for elektronene, observerte en ulike frekvens(bølgelengde)fordelinger for den e.m. strålingen. Men, fellestrekket ved alle fordelinger var en minste bølgelengde.

Dersom vi antar at elektronet har null kinetisk energi etter støtet, dvs. at det avgir all sin energi og kommer til ro, har vi

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = K_e, \quad (2.13)$$

som igjen gir oss

$$\frac{hc}{\lambda_{\min}} = K_e, \quad (2.14)$$

og setter vi inn at $K_e = eV_R$ har vi

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eV_R}. \quad (2.15)$$

Det finnes mange eksempler på at når ladde partikler bremses ned så sendes det ut høyenergetisk e.m. stråling. Kosmisk stråling er et slikt eksempel, og hvem har ikke sett Nordlys med det blotte øye?

Et mer eksotisk eksempel er såkalte Röntgenstjerner, eller, dersom vi bruker det engelske faguttrykket, X-ray pulsars. Pulsarer er hurtigroterende nøytronstjerner i binære stjernesystemer (to stjerner nær hverandre). X-ray pulsarer er antatt å være nøytronstjerner som suger masse fra en annen stjerne i et binærsystem. Massen til den andre stjernen kan være flere solmasser. Den utsendte e.m. strålingen i Röntgenområdet antas å skyldes masse som samles enten ved polene eller over hele stjernen. Når masse slynges ned mot stjernen i det ekstremt sterke magnetfeltet vil ulike kjernefysiske reaksjoner sende ut e.m. stråling i Röntgenområdet.

2.3 Comptonspredning

I de to foregående avsnittene har vi lært at lyset er sammensatt av energikvanter. Dette var Einsteins opprinnelige antagelse og førte til den berømte forklaringen av den fotoelektriske effekt. Men Einstein videreutviklet sine ideer fram til 1917, da han foreslo at lyset, eller fotonene, også kan tilordnes en *bevegelsesmengde*. Denne ideen ble bekreftet i 1923 i et eksperiment utført av A.H. Compton. Han sendte inn høyenergetiske fotoner (Röntgenstråler) mot en grafitplate og observerte at bølgelengden til den spredte (utgående) strålingen var større enn bølgelengden til den innkommende. Siden energien er knyttet til bølgelengden via

$$E = \frac{hc}{\lambda} = h\nu,$$

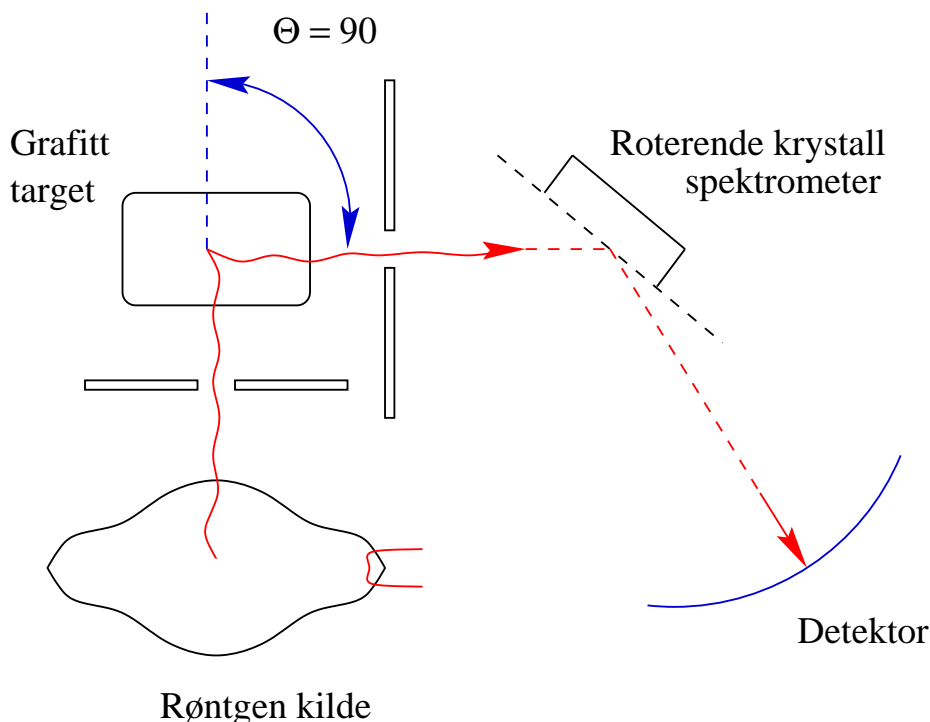
betyr en forandring i bølgelengde en energiforandring.

Figur 2.5 viser en skisse av oppsettet for Comptons forsøk. Det er i prinsippet samme oppsett som for Röntgenstråling, men etter at de høyenergetiske fotonene har truffet målet, så bestemmes bølgelengden ved hjelp av et såkalt *Bragg-krystallspektrometer*.² Dette utnytter den klassiske effekten *Bragg-diffraksjon*, hvor et krystall med kjent avstand d mellom atomlagene gir konstruktiv interferens for e.m. stråling med bølgelengde λ når

$$n\lambda = 2d \sin \phi, \quad (2.16)$$

hvor ϕ er refleksjonsvinkelen og $n = 1, 2, 3, \dots$. Vi skal ikke vise denne formelen her, men den kan enkelt finnes ved å se på forskjellen i veilengde for stråler som

²Far og sønn, William Henry Bragg og William Lawrence Bragg, fikk Nobelprisen for sine oppdagelser med denne oppfinnelsen. Resultatene ble publisert i 1913 og prisen ble gitt allerede i 1915. W.L. Bragg har også en annen rekord, som 25-åring er han den yngste som noengang har vunnet Nobelprisen.

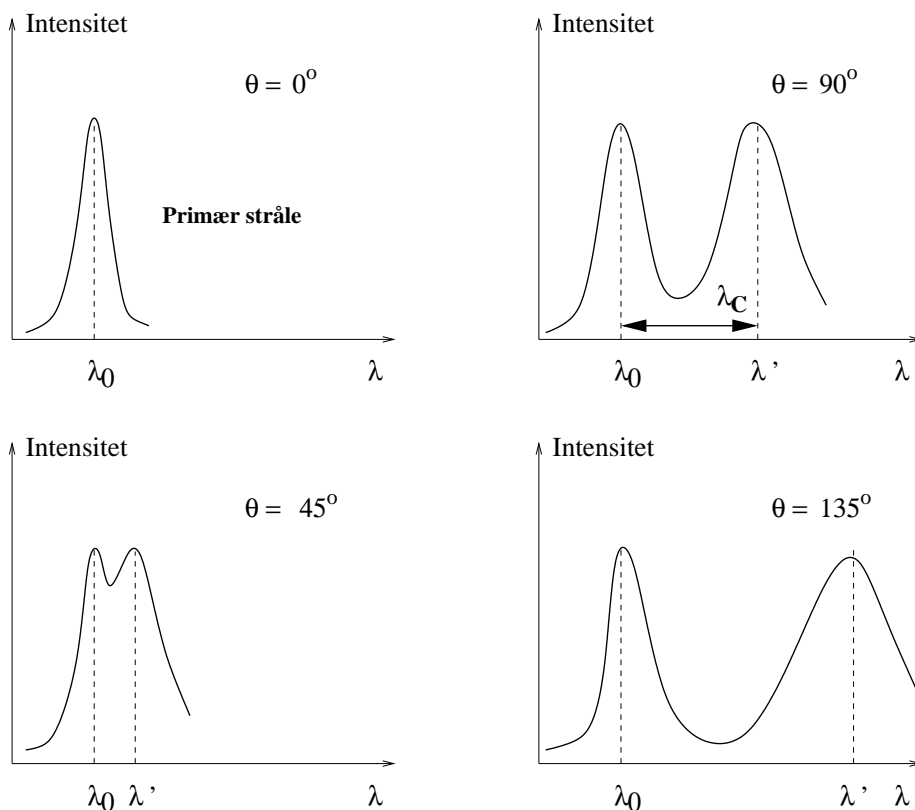


Figur 2.5: Eksperimentelt oppsett for Comptons forsøk, her med $\theta = 90$ grader.

treffer forskjellige lag i krystallen. (Se også om Bragg-diffraksjon for elektroner i avsnitt 4.2.) Ved å se på endringen i intensitet som funksjon av vinkelen kan bølgelengden så bestemmes.

Figur 2.6 viser, skjematisk, intensitetsfordelingen for ulike spredningsvinkler θ for e.m. strålingen (må ikke forveksles med refleksjonsvinkelen i Bragg-krystallspektrometeret!). Vi ser at den utgående (spredte) strålingen har to topper — en ved den opprinnelige (innkommende) bølgelengden λ_0 , og en annen ved en forskjøvet bølgelengde λ' . (Unntaket er $\theta = 0$, der de to toppene sammenfaller.) Vi tar først for oss den forskjøvete strålingen, og utsetter forklaringen av den første toppen til slutten av avsnittet. Bølgelengdeendringen $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0$ viste seg å variere som en funksjon av spredningsvinkelen θ , uavhengig av hvilket materiale man brukte i forsøket. Som vi skal se, kan prosessen beskrives som spredning av fotoner mot (tilnærmet) *frie* elektroner — den ligner altså på fotoelektrisk effekt — men strålingen som brukes i Compton-eksperimentet har mye større energi enn i fotoelektrisk effekt, slik at elektronenes bindingsenergi (arbeidsfunksjonen) blir neglisjerbar her.

Igjen hadde en her et eksperimentelt resultat som ikke kunne forklares fra klassisk teori. Klassisk ville en ikke forventet noen endring av bølgelengden ved spredning av e.m. stråling mot et elektron. Løsningen er igjen å ta hensyn til lysets partikkelegenskaper. Vi har allerede lært at fotoner tilordnes en energi $E = h\nu = hc/\lambda$. I tillegg tilordnes de altså en bevegelsesmengde



Figur 2.6: Skisse av intensitetsfordeling for e.m. stråling i Comptons forsøk. λ_0 er bølgelengden til den innkommende strålingen. Legg merke til at bølgelengden λ' for den spredte strålingen (den andre toppen) øker med økende spredningsvinkel.

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (2.18)$$

For å se hvor dette kommer fra, må vi friske opp noen enkle begreper fra relativitetsteorien i FYS-MEK1110. Vi har at energien til en fri partikkel med masse m og hastighet v er gitt ved

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (2.19)$$

Når vi kombinerer dette med det faktum at fotonene reiser med lysets hastighet c og at energien til et foton er endelig og gitt ved $E = h\nu$, så må massen til fotonet være lik null, ellers vil energien divergere i det ovennevnte uttrykk. Bruker vi også relasjonen

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} = pc = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad (2.20)$$

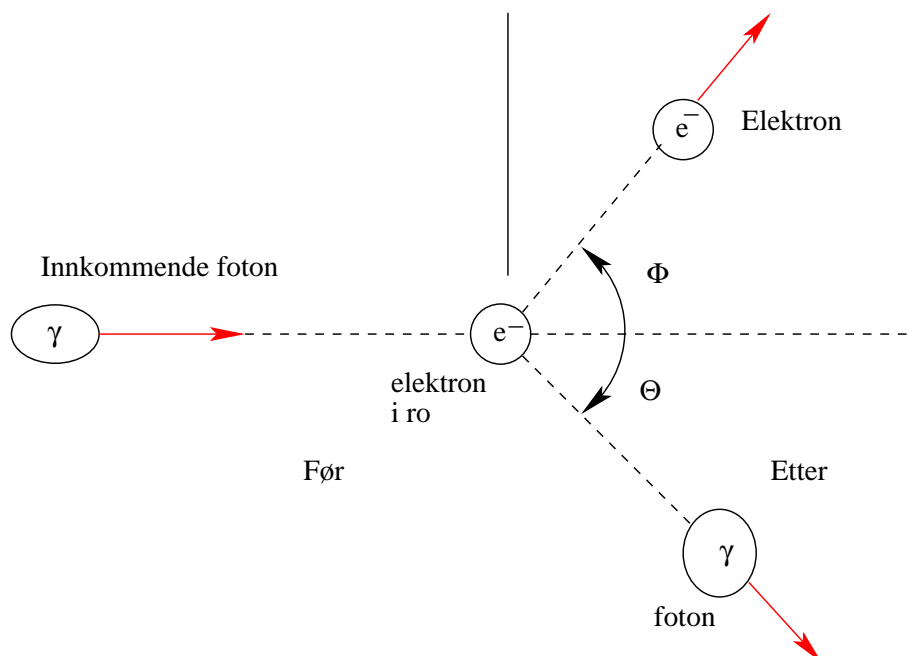
har vi at bevegelsesmengden p er gitt ved

$$p = \frac{h\nu}{c}. \quad (2.21)$$

La oss nå bruke dette og utlede bølglengdeforandringen ved å beskrive Comptonspredning som et elastisk støt mellom et foton og et fritt elektron,

$$\gamma + e^- \rightarrow \gamma + e^-. \quad (2.22)$$

Når vi skal utlede Comptons formel, trenger vi altså å ta utgangspunkt i to bevaringssatser, energi og bevegelsesmengde, før og etter støtet. Vi antar også at før støtet så er elektronet i ro, dvs. at det har null kinetisk energi og bevegelsesmengde. Vi kan da, se også figur 2.7, lage tabell 2.1 med definisjonene



Figur 2.7: Idealisering av kollisjonen mellom et foton og et elektron. Vi antar at det er et tilnærmet fritt elektron i ro som kolliderer med et foton.

av energi og bevegelsesmengde for elektroner og fotoner, hvor m_e er elektronets masse.

Energibevaring gir

$$E_\gamma + E_e = E'_\gamma + E'_e, \quad (2.23)$$

dvs.

$$\frac{hc}{\lambda_0} + m_e c^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \sqrt{(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4}. \quad (2.24)$$

Tilsvarende har vi for bevaring av bevegelsesmengde

$$\mathbf{p}_\gamma + \mathbf{0} = \mathbf{p}'_\gamma + \mathbf{p}'_e. \quad (2.25)$$

Tabell 2.1: Definisjon av energi og begelsmengde før og etter støtet.

	Før	Etter
Bevegelsesmengde		
γ	$p_\gamma = \frac{h}{\lambda_0}$	$p'_\gamma = \frac{h}{\lambda'}$
e^-	$p_e = 0$	p'_e
Energi		
γ	$E_\gamma = \frac{hc}{\lambda_0}$	$E'_\gamma = \frac{hc}{\lambda'}$
e^-	$E_e = m_e c^2$	$E'_e = \sqrt{(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4}$

Dersom vi kvadrerer roten i ligning (2.24) får vi

$$(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4 = \left(\frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda'}\right)^2 + 2m_e c^2 \left(\frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda'}\right) + m_e^2 c^4, \quad (2.26)$$

som gir

$$(p'_e c)^2 = \left(\frac{hc}{\lambda_0}\right)^2 + \left(\frac{hc}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h^2 c^2}{\lambda_0 \lambda'} + 2m_e c^2 \left(\frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda'}\right). \quad (2.27)$$

Deretter kvadrerer vi ligning (2.25) og får

$$(\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}'_\gamma)^2 = (\mathbf{p}'_e)^2, \quad (2.28)$$

som gir, når vi multipliserer begge sider med c^2 ,

$$(\mathbf{p}'_e c)^2 = \left(\frac{hc}{\lambda_0}\right)^2 + \left(\frac{hc}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h^2 c^2}{\lambda_0 \lambda'} \cos \theta. \quad (2.29)$$

Setter vi venstresidene i ligningene (2.27) og (2.29) like og multipliserer med

$$\frac{\lambda_0 \lambda'}{2hc}, \quad (2.30)$$

får vi

$$-hc + m_e c^2 (\lambda' - \lambda_0) = -hc \cos \theta, \quad (2.31)$$

som igjen gir

$$\Delta\lambda = (\lambda' - \lambda_0) = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta), \quad (2.32)$$

eller

$$\Delta\lambda = \lambda_C (1 - \cos \theta) \quad (2.34)$$

med

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2.43 \times 10^{-3} \text{ nm}, \quad (2.35)$$

og vi ser at $\Delta\lambda$ varierer fra 0 til en maksimumsverdi på $2\lambda_C$. Størrelsen λ_C kalles også Comptonbølgelengden for elektronet og ligning (2.35) er Comptons formel. Vi ser at siden bølgelengden til den e.m. strålingen etter støtet er større enn før, så innebærer det at energien til fotonet etter støtet er mindre enn før, dvs. siden

$$\lambda' > \lambda_0, \quad (2.36)$$

så har vi at

$$E'_\gamma = \frac{hc}{\lambda'} < E_\gamma = \frac{hc}{\lambda_0}, \quad (2.37)$$

altså mister som forventet fotonet energi ved støtet.

Man kan stille seg spørsmålet om det, i tillegg til spredningsprosessen vi har analysert her, finnes andre mulige prosesser. Dersom fotonet skulle kunne overføre all sin energi til elektronet, vil vi ha en prosess av typen

$$\gamma + e^- \rightarrow e^-, \quad (2.38)$$

Det kan imidlertid vises at en slik prosess ikke er tillatt fordi den strider mot bevaring av energi og bevegelsesmengde.

Det vi ennå ikke har forklart er hvorfor vi i tillegg har en topp i figur 2.6 hvor vi tilsynelatende ikke har noen forandring i bølgelengde. Dette kan forstås på følgende vis. Når vi har en forandring i bølgelengde, vekselvirker egentlig fotonet med de svakest bundne elektronene, og vi idealiserer reaksjonen som et støt mellom et foton og et elektron. Men vi kan jo tenke oss at elektronet er sterkt bundet til atomet, eller at den innfallende e.m. stråling ikke er sterk nok til å sparke ut et elektron. I dette tilfelle kan vi betrakte kollisjonen mellom fotonet og materialet som en kollisjon mellom et foton og et helt atom, og atomet får en rekyleffekt gjennom kollisjonen. Dersom vi antar at materialet består av karbon, blir reaksjonen vår

$$\gamma + C \rightarrow \gamma + C, \quad (2.39)$$

og i dette tilfelle må vi erstatte massen til elektronet med den til karbonatomet, som er 22 000 ganger tyngre enn elektronet. Da blir Comptonbølgelengden

$$\lambda_C = \frac{h}{22000 m_e c} \sim 10^{-7} \text{ nm} = 0.1 \text{ fm}, \quad (2.40)$$

og med de aktuelle bølgelengdene på Röntgenstråling ($\lambda = 0.01 - 10 \text{ nm}$) blir den relative endringen av bølgelengden λ_C/λ knapt observerbar!

Nå kan vi også forstå hvorfor det ikke var relevant å snakke om endring av bølgelengde i diskusjonen om fotoelektrisk effekt, selv prosessen i og for seg er den samme — støt av fotoner mot elektroner. Forklaringen ligger simpelthen i energistørrelsene. I fotoelektrisk effekt har vi e.m. stråling i området med synlig lys til ultrafiolett lys. Det betyr at vi har frekvenser i størrelsesorden $10^{15} - 10^{17} \text{ Hz}$, noe som tilsvarer bølgelengder i størrelsesorden $10 - 100 \text{ nm}$ og energier for fotoner i størrelsesorden $10^0 - 10^2 \text{ eV}$. Dersom vi ser på vårt tidligere eksempel med monokromatisk gult lys på 589 nm , så er forholdet

$$\frac{\lambda_C}{\lambda_0} \sim 10^{-6}, \quad (2.41)$$

og siden λ_C svarer til den største mulige $\Delta\lambda$, kan vi knapt observere en forandring i bølgelengde når vi har med fotoelektrisk effekt å gjøre. Legg også merke til at arbeidsfunksjonen for f.eks. kalium er på 2.1 eV, på størrelse med energien til fotonene.

Med Röntgenstråler derimot, har vi e.m. stråling med bølgelengder i riktig størrelsesorden. Dersom vi f.eks. ser på fotoner med en energi på $E = 41 \text{ keV}$ gir det en bølgelengde på

$$\lambda_0 = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} = \frac{hc}{E} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{41000 \text{ eV}} \simeq 0.0302 \text{ nm}. \quad (2.42)$$

Ser vi først på λ_C/λ_0 finner vi nå

$$\frac{\lambda_C}{\lambda_0} = \frac{2.43 \times 10^{-3} \text{ nm}}{3.02 \times 10^{-2} \text{ nm}} = 0.080, \quad (2.43)$$

som betyr at forskjellen i bølgelengde burde være observerbar. Øker vi frekvensen blir forholdet klart større, og dermed større sannsynlighet for å observere en forandring i bølgelengde. Ser vi deretter på energien, ser vi at 41 000 eV er mye større enn typiske energier i fotoelektrisk effekt, og arbeidsfunksjonen w_0 som er på noen få eV. Derfor kunne Compton i dette tilfelle idealisere spredningen av fotoner mot et materiale som spredning av et foton mot et fritt elektron. Det vi har antatt er at den kinetiske energien elektronet får er mye større enn w_0 , og at vi kan neglisjere w_0 . Det vil svare til en situasjon hvor elektronet ikke er bundet.

Som en oppsummering av fotoelektrisk effekt, Röntgenstråling og Comptonspredning kan vi si at *e.m. stråling viser både partikkel- og bølgeegenskaper*. I noen sammenhenger ser en partikkelegenskapene og i andre tilfeller de velkjente, rene bølgeegenskapene slik som diffraksjon og interferens. Comptons eksperiment utviser begge deler:

- Prinsippene bak målingen av den spredte e.m. strålingen bygger på standard bølgelære. (Bragg diffraksjon.)
- Spredningen påvirker bølgelengden på et vis som kun kan forstås ved å behandle Röntgenstrålene som partikler som kolliderer med elektronene i et atom.

Vi kan si at fotonet har i seg bølgebeskrivelsen ved

$$\lambda \quad \text{og} \quad \nu \quad (2.46)$$

og partikkelbeskrivelsen ved

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad \text{og} \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c}. \quad (2.47)$$

I kapitlet om materiebølger skal vi se at det motsatte også er tilfelle, dvs. at *all materie også kan tilskrives bølgeegenskaper*.

2.4 Oppgaver

Oppgave 2.1

- Energienheten 1 eV (*elektronvolt*) er definert som økningen i kinetisk energi når et elektron akselereres gjennom et potensialsprang på 1 volt. Vis at $1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$. Hva blir energiøkningen når elektronet akselereres i et potensialsprang på 10 V, 50 kV = $5 \times 10^4 \text{ V}$ og 1 MV = 10^6 V ? Beregn hastigheten elektronene får etter akselerasjon i potensialene nevnt ovenfor når utgangshastigheten $v_0 = 0$.
- Beregn den potensielle energien for to partikler med ladning $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$ som befinner seg i en avstand $0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$. Vis at enheten elektronvolt er en naturlig enhet i dette tilfelle.
- La oss anta at de to partiklene ovenfor er et proton og et elektron. Diskutér forholdet mellom gravitasjons- og elektrostatiske potensiell energi i dette tilfelle. (Gravitasjonskonstanten: $G_N = 6.67 \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$.)
- Beregn hvileenergien for elektronet og protonet. Under hvilke betingelser må vi regne med relativistiske effekter?

Oppgave 2.2 Anta at sola med radius $6.96 \times 10^8 \text{ m}$ stråler som et sort legeme. Av denne strålingen mottar vi 1370 W m^{-2} her på jorda i en avstand av $1.5 \times 10^{11} \text{ m}$. Jorda har en radius på 6378 km.

- Beregn temperaturen til sola.
- Anta at atmosfæren rundt jorda reflekterer 30 % av den innkommende stråling. Hvor mye energi fra solen absorberer den per sekund og per kvadratmeter?
- For å være i termisk likevekt må jorda emittere like mye energi som den absorberer via atmosfæren hvert sekund. Anta at den stråler som et sort legeme. Finn temperaturen. Hva betyr drivhuseffekten?

Oppgave 2.3 Definér uttrykket “sort legeme” (“blackbody”). Plancks strålingslov sier at utstrålt effekt per arealenheter og per bølgelengde, $dR/d\lambda$, fra et sort legeme er gitt ved

$$\frac{dR}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)},$$

der k er Boltzmanns konstant og T er legemets temperatur. I utledningen av ligningen over gjøres en antakelse som bryter med klassisk fysikk. Forklar kort hva denne antakelsen består i. Bruk Plancks lov til å vise Wiens forskyvningslov

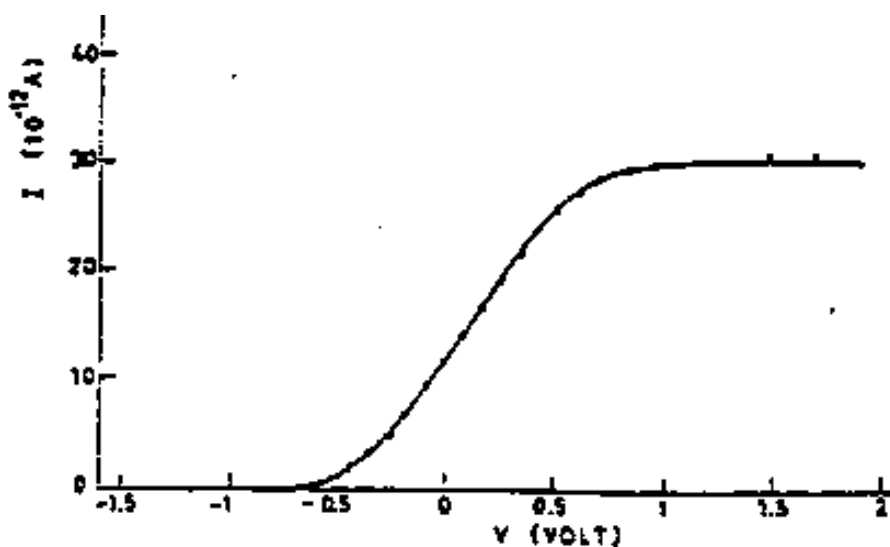
$$\lambda_m T = \text{konstant},$$

der λ_m er bølgelengden hvor $dR/d\lambda$ er maksimal (konstanten behøver ikke bestemmes, men har verdien $0.00290 \text{ K} \cdot \text{m}$). En del av de astrofysiske objekter som kalles pulsarer sender ut stråling i røntgenområdet. Ved observasjon av en slik pulsar finner man at den utstrålte effekt pr. arealenheter og pr. bølgelengde er

størst ved en bølgelengde på 5.58 nm etter å ha tatt hensyn til rødforskyvningen. Anta at pulsaren stråler som et sort legeme og regn ut overflatetemperaturen.

Oppgave 2.4 (Eksamen V-1994)

- Gjør rede for den fotoelektriske effekten. Tegn en figur som viser en eksperimentell oppstilling for å studere denne effekten.
- Anta at vi bruker denne oppstillingen til å bestråle et metall med monokromatisk lys, $\lambda = 2.58 \cdot 10^{-7}$ m. Figur 2.8 viser observerte verdier av strømmen I når spenningen varieres. Forklar forløpet av kurven. Hva skjer hvis intensiteten av lyset økes til det dobbelte?



Figur 2.8: Strøm I som funksjon av spenningen V ved fotoelektrisk effekt.

- Bruk figur 2.8 til å bestemme arbeidsfunksjonen for metallet.
- Vi bytter nå ut metallet foran med et nytt. Det bestråles med lys med forskjellig bølgelengde. Tabell 2.2 viser stoppepotensialet for noen forskjellige verdier av bølgelengden. Bestem ut fra dette arbeidsfunksjonen for det nye metallet, den lavest mulige frekvensen for prosessen og Plancks konstant h .

λ (i 10^{-7} m)	2.536	3.132	3.650	4.047
V_S (i volt)	1.95	0.98	0.50	0.14

Tabell 2.2: Stoppepotensial for forskjellige verdier av bølgelengden.

- Forklar hvorfor et foton ikke kan overføre all sin energi og bevegelsesmengde til et fritt elektron.

Oppgave 2.5 En stråle av ultrafiolett lys og med en intensitet på 1.6×10^{-12} W blitt pluselig satt på og bestråler en metallflate. Ved fotoelektrisk effekt blir elektroner sendt ut fra metallflaten. Den innkommende strålen har et tverrsnitt på 1 cm^2 og bølgelengden svarer til en fotonenergi på 10 eV. Arbeidsfunksjonen for metallet er 5 eV. Vi skal i det følgende analysere hvor lang tid det vil ta før elektroner emitteres.

- Gjør et klassisk estimat basert på den tid det vil ta før et elektron med radius $\approx 1 \text{ Å}$ har absorbert nok energi til å emitteres.
- Lord Rayleigh demonstrerte imidlertid (Phil. Mag. **32**, (1916), side 188) at dette estimatet er for pessimistisk. Absorbsjonsarealet for et elektron i et atom er av størrelsesorden λ^2 for lys av bølgelengde λ . Beregn den klassiske forsinkelsestiden for emisjon av et elektron.
- Kvantemekanisk er det mulig for et elektron å emitteres umiddelbart — så snart et foton med tilstrekkelig energi treffer metallflaten. For å få et estimat som kan sammenlignes med den klassiske verdien beregn det midlere tidsintervall mellom to fotoner i strålen.

Oppgave 2.6

- Gjør kort rede for den fotoelektriske effekten, og skissér en eksperimentell oppstilling som kan observere og måle denne effekten.
- Den fotoelektriske arbeidsfunksjonen for kalium (K) er 2.0 eV. Anta at lys med en bølgelengde på 360 nm ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) faller på kaliumet. Finn stoppepotensialet for fotoelektronene, den kinetiske energien og hastigheten for de hurtigste av de emitterte elektronene.
- En uniform monokromatisk lysstråle med bølgelengde 400 nm faller på et materiale med arbeidsfunksjon på 2.0 eV, og med en intensitet på $3.0 \times 10^{-9} \text{ W m}^{-2}$. Anta at materialet reflekterer 50% av den innfallende stråle, og at 10% av de absorberte fotoner fører til et emittert elektron. Finn antall elektroner emittert per m^2 og per sekund, den absorberte energi per m^2 og per sekund, samt den kinetiske energi for fotoelektronene.

Oppgave 2.7 I et røntgenrør lar vi en elektronstråle gjennomløpe et spenningsfall V før den treffer en anode av wolfram (W). Den resulterende strålingen fra røntgenrøret observeres. Figur 2.4 viser hvordan strålingens intensitet varierer med bølgelengden λ .

- Tegn en skjematisk skisse av et røntgenrør. Gi en kort og kvalitativ beskrivelse av hvordan røntgenstrålingen dannes og typiske trekk ved den jevne kontinuerlige delen av spekteret i figur 2.4.
- Skriv ned og begrunn sammenhengen mellom spenningen V og den minste bølgelengden λ_{\min} for røntgenstrålingen. Gjør det samme for V og den maksimale frekvensen ν_{\max} .

Oppgave 2.8

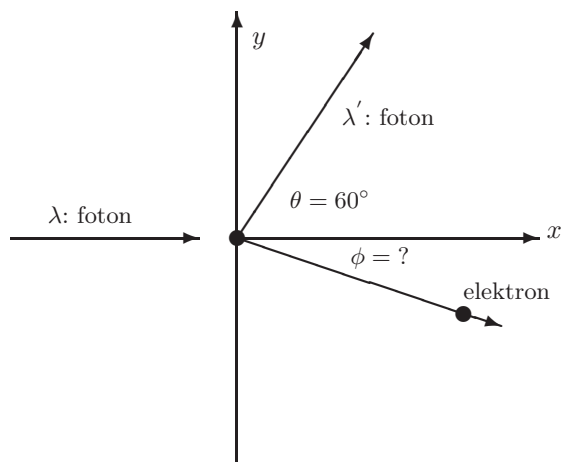
- a) Tegn en skjematisk skisse av et røntgenrør. Gi en kort og kvalitativ beskrivelse av hvordan røntgenstrålingen dannes og typiske trekk ved foton-spektret.
- b) Hvis et elektron har kinetisk energi $E_k = 10000$ eV, beregn den minste bølgelengden λ_{min} for de utsendte fotonene.
- c) Vi antar at vi har røntgenstråler med bølgelengde $\lambda = 1 \text{ nm} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}$. De faller inn mot en krystall under en vinkel på 45° med innfallsloddet. Dette gir en koherent refleksjon fra krystallen. Beskriv prosessen og beregn ut fra dette avstanden mellom de reflekterende plan i krystallen.
- d) Når et foton passerer en atomkjerne, kan det omdannes til et elektron-positron par (pardannelse). Finn den minste energien E_ν fotonet kan ha for at denne prosessen kan skje (se bort fra mulige rekyleffekter).

Oppgave 2.9 Et foton er spredt en vinkel θ i forhold til dets opprinnelige retning etter å ha vekselvirket med et fritt elektron som var i ro.

- a) Gjør rede for hvilke prinsipper som anvendes til å beregne det spredte fotonets bølgelengde og utled Comptons formel.
- b) Begrunn at bølgelengden for det spredte fotonet er større enn bølgelengden for fotonet før vekselvirkningen (spredningsvinkelen forutsettes å være større enn null).
- c) Et foton er spredt en vinkel θ etter å ha vekselvirket med et fritt elektron som før vekselvirkningen hadde en bevegelsesmengde som var like stor som fotonets bevegelsesmengde, men motsatt rettet. Hvor stor blir fotonets bølgelengdeforandring i dette tilfellet? Vi antar at elektronet kan beskrives ikke-relativistisk.
- d) Kan et foton overføre hele sin energi og bevegelsesmengde til et fritt elektron? Begrunn svaret.

Oppgave 2.10 Et foton med bølgelengde $\lambda = 1.00 \times 10^{-11} \text{ m}$ treffer et fritt elektron i ro. Fotonet blir spredt i en vinkel θ , og får en bølgelengdeforandring gitt ved Comptons formel $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta)$, hvor Comptonbølgelengden er $\lambda_c = 2.426 \times 10^{-12} \text{ m}$. I denne oppgaven skal vi bare se på det som observeres i en vinkel $\theta = 60^\circ$ (se figur 2.9). Energi og bevegelsesmengde beregningene skal uttrykkes ved enheten eV.

- a) Beregn energien og bevegelsesmengden til det innkommende fotonet.
- b) Finn bølgelengden, bevegelsesmengde og den kinetiske energien til det spredte fotonet.
- c) Finn den kinetiske energien, bevegelsesmengden og spredningsvinkelen for elektronet.

Figur 2.9: Comptonspredning i vinkel $\theta = 60^\circ$.

Oppgave 2.11 (Eksamen V-1992) Vi skal i denne oppgaven gjøre bruk av det relativistiske uttrykk for energien til en partikkel

$$E = \sqrt{E_0^2 + (pc)^2}.$$

Som energienhet bruk eV, og eV/c som enhet for bevegelsesmengde.

- Gjør kort rede for de størrelser som inngår i relasjonen ovenfor.
- Anvend relasjonen ovenfor på et foton og finn fotonets energi og bevegelsesmengde når bølgelengden er $500 \text{ nm} = 5.00 \times 10^{-7} \text{ m}$.

Et foton med energi $E = h\nu_0 = hc/\lambda_0$ spres en vinkel θ ved Comptoneffekt mot et elektron som antas å ligge i ro før spredning.

- Tegn en prinsippskisse for et Compton eksperiment og angi spredningsvinklene for fotonet og elektronet etter spredningen.
- Formulér de prinsipper som anvendes til å beregne det spredte fotonets bølgelengde λ' og bruk disse til å utlede Comptons formel

$$\lambda' - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

Røntgenstråler med en bølgelengde $\lambda_0 = 1.21 \times 10^{-1} \text{ nm}$ treffer en målskive av karbonatomer. De spredte røntgenstrålene blir observert i en vinkel på 90° .

- Beregn bølgelengden λ' for de spredte fotonene ved 90° .
- Figur 2.6 viser en topp ved bølgelengden λ_0 . Hvilken prosess skyldes denne toppen?

Kapittel 3

BOHRS ATOMMODELL

3.1 Innledning



Figur 3.1: Dansk frimerke som markerer Bohrs atomteori.

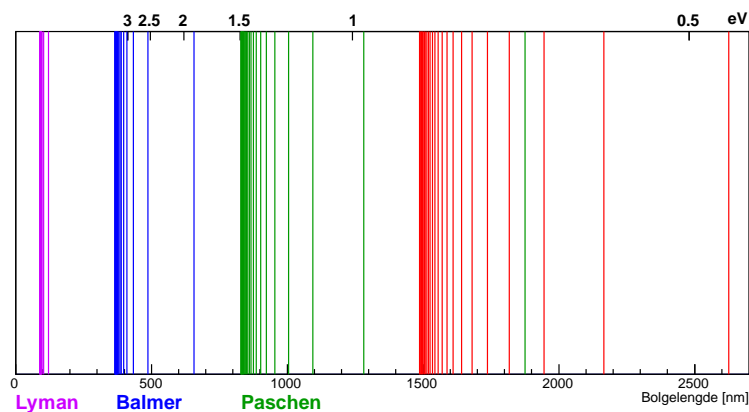
I dette kapitlet skal vi se på nok en revolusjonerende innsikt som ble drevet fram av eksperimentelle fakta som ikke kunne forklares ved klassisk fysikk. Året er 1913, og ideen er Bohrs teori om atomene. Men la oss først rekapitulere noen av de fenomenene en ikke hadde noen forklaring på. Det første er ganske grunnleggende og dramatisk: materien i verden rundt oss er stabil! Ifølge klassisk strålingsteori skulle ikke dette vært tilfelle. Problemet lå i at en hadde kommet fram til en forståelse av at elektronene går i baner rundt elektronkjernen. Klassisk svarer dette til at elektronene opplever en sentripetalakselerasjon. Men fra Maxwells teori var det kjent at ladninger som akselereres, sender ut elektromagnetisk stråling. Dette svarer igjen til et energitap for elektronet, med konsekvensen at elektronet skulle bevege seg i en spiral inn mot kjernen og til slutt falle inn i den — exit materie!

Bohr fant en vei ut av dilemmaet ved å postulere at klassisk strålingsteori ikke er gyldig på atomært nivå. I samme ånd som Planck og Einstein foreslo

han at de tillatte energiene til elektronene i atomer er *kvantisert*, i tilstander (“baner”) som betegnes med kvantetallet n . I neste avsnitt skal vi ta en titt på Bohrs teori, men la oss allerede nå påpeke at selv om *resultatet* var av enorm, fundamental betydning for kvantemekanikkens videre utvikling, så var Bohrs ideer rett og slett feil, og er i dag bare av historisk interesse.

En annen type eksperimentelle data en ikke hadde noen god forklaring på var *spektrallinjene* utsendt av grunnstoffene. Allerede mot slutten av 1800-tallet fantes det store mengder med data på bølgelengden til forskjellig slags lys. Det dreide seg i all hovedsak om utsendt (emittert) e.m. stråling fra bestemte typer atomer. Den viktige observasjonen var at slik e.m. stråling er konsentrert ved bestemte diskrete bølgelengder. Disse såkalte linjespektrene er forskjellige for hvert grunnstoff og utgjør dermed et slags “fingeravtrykk” for grunnstoffet. En nært beslektet disiplin er *absorpsjonsspektroskopi* — når lys med en kontinuerlig fordeling av bølgelengder sendes gjennom en bestemt gass, vil det opptre mørke linjer i spektret fra det transmitterte lyset; disse mørke linjene opptrer ved de samme bølgelengdene som de lyse linjene i stoffets emisjonsspektrum. Et eksempel der en ser dette er strålingen fra sola — kurven svarer stortsett til et sort-legeme strålingsspektrum med en temperatur rundt 5800 K, bortsett fra en del mørke linjer, svarende til grunnstoffene som finnes i sola.

Et gitt grunnstoff kan altså både absorbere og emitte e.m. stråling ved bestemte, diskrete bølgelengder (fotonenergier). Et av de mest studerte atomer var hydrogenatomet, som består av et proton og et elektron. Vi viser fotonspektret for hydrogen i figur 3.2.



Figur 3.2: Fotonspektret for hydrogen. Bølgelengdene er i nm. De tykke strekene betyr at linjene ligger så tett at de ikke kan skilles.

Basert på disse diskrete verdiene for bølgelengden (spektrallinjer) til den utsendte e.m. stråling fra hydrogen laget Balmer en parametrisering for de observerte spektrallinjene allerede i 1885, med bølgelengden gitt som

$$\lambda = (3645.6 \times 10^{-10} \text{ m}) \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad \text{hvor} \quad n = 3, 4, \dots, \quad (3.1)$$

som vi i dag vet svarer til overganger fra høyere eksiterte tilstander i hydrogenatomet til den første eksisterte tilstanden, dvs. $n = 2$ (se neste avsnitt). Da Balmer begynte arbeidet sitt, var bare fire spektrallinjer kjent for hydrogen. Disse lå alle i det synlige området og ble kalt H_α ($n = 3$, rødt), H_β ($n = 4$, grønt), H_γ ($n = 5$, blått) og H_δ ($n = 6$, fiolett). Men flere linjer ble oppdaget etter hvert og viste seg å være i full overensstemmelse med Balmers formel.

Balmer gjettet også at det kunne finnes flere lignende serier av spektrallinjer, og han hadde rett: i 1890 kom Rydberg med en parametrisering for alle mulige overganger i hydrogenatomet, nemlig

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (3.2)$$

med

1. $n_f = 1$ og $n_i = 2, 3, \dots$, svarende til den såkalte Lymanserien (ultrafiolett).
2. $n_f = 2$ og $n_i = 3, 4, \dots$, svarende til den såkalte Balmer-serien (synlig lys),
3. $n_f = 3$ og $n_i = 4, 5, \dots$, svarende til den såkalte Paschen-serien (infrarødt), osv.

Konstanten R_H er Rydbergkonstanten for hydrogen og gitt ved

$$R_H = 1.0967757 \times 10^7 \text{ m}^{-1}. \quad (3.3)$$

Selv om parametriseringene reproduserte dataene, så manglet en mer grunnleggende teori til beskrivelsen av atomer. Først med kvantemekanikken var en i stand til å gi en tilfredsstillende matematisk beskrivelse. Et viktig bidrag mot kvantemekanikken var Bohrs atommodell fra 1913. Bohr utviklet en teori basert på kombinasjonen av klassisk mekanikk og Plancks og Einsteins kvantiserings-teorier fra e.m. stråling.

3.2 Bohrs atommodell

Det var Bohr som klarte å konstruere en modell som ga en forklaring på noen av atomets mysterier, og som han fikk Nobelprisen for i 1922. Hva vil det så egentlig si å “konstruere en modell”? Man observerer at et fysisk system oppfører seg på en viss måte, og modellen er da en forenklet “teori” (beskrivelse),¹ basert på visse grunnleggende antagelser, som (forhåpentligvis) forklarer denne oppførselen. Antagelsene en gjør, kan være basert på erfaring, i analogi med andre systemer, eller på intuisjon. Modellens videre skjebne avgjøres av dens prediktive evner. En god modell må kunne testes ved at den forutsier noe om andre eksperimentelle resultater. Hvis den ikke stemmer overens med disse, er modellen falsifisert, og man vet at en eller flere av de grunnleggende antagelsene ikke var gyldige. Man må da gå tilbake og modifisere modellen.

Bohr utviklet altså en modell som forutsa at elektronet som er bundet til kjernen på hydrogenatomet bare kan anta visse, diskrete energier, og som samtidig reproduserte Rydbergs formel (3.2) og de andre eksperimentelle fakta omtalt

¹Legg merke til at i vitenskapelig sammenheng betyr teori noe mere enn “antakelse”, som er meningen vi ofte bruker i dagligtale. En teori er ett komplett og selvkonsistent system av grunnsetninger, lover eller regelmessigheter innenfor den aktuelle vitenskapen.

i forrige avsnitt. I ettertid vet vi at denne overensstemmelsen til en viss grad var tilfeldig, at Bohr brukte ugyldige antagelser i sin utledning, og at modellen på mange måter er ukorrekt. Dette er imidlertid ikke så rart, med tanke på at Bohr gjorde dette arbeidet i kvantemekanikkens spede barndom, lenge før denne var fullt utviklet. Han var nødt til å jobbe ut fra det som var kjent på den tiden (som er omtrent det vi har gjennomgått til nå i dette kurset), og baserte seg på datidens primitive kvantefysikk kombinert med klassisk fysikk. (Sistnevnte er kanskje den største svakheten i modellen — klassisk fysikk kan rett og slett ikke anvendes her.) Det er ingen tvil om at Bohr var ett av de aller største geniene og en av de mest sentrale personene i utviklingen av kvantemekanikken. Bohrs atomformel (se nedenfor) ansees for å være kvantemekanikkens kanskje viktigste enkeltresultat.

La oss se på Bohrs antagelser:

1. Et elektron i et atom beveger seg i sirkulære baner om en kjerne. Kreftene er gitt ved tiltrekning via Coulomb vekselvirkningen mellom elektron og kjerne.
2. Bare visse elektronbaner er stabile. I disse baner utsender ikke elektronene e.m. stråling (jf. diskusjonen om materiens stabilitet).
3. Elektromagnetisk stråling sendes ut dersom et elektron som beveger seg i en bane med energi E_i , forandrer på et diskontinuerlig vis sin bevegelse til en bane med energi E_f . Frekvensen til denne strålingen er

$$\nu = \frac{(E_i - E_f)}{h}.$$

Tilsvarende kan atomet *absorbere* stråling ved at elektronet går fra et lavere til et høyere energinivå.

4. De tillatte elektronbanene er bestemt ved at deres angulærmoment (drivmoment, banespinn) L rundt kjernen er kvantisert,

$$L \equiv mvr = n \cdot \hbar,$$

der $\hbar = h/(2\pi)$.

La oss dvele litt ved det siste postulatet. Hvor kan en slik antagelse komme fra? Hvordan “gjetter” man hva som er kvantisert? Legg merke til at igjen er det Plancks konstant som dukker opp, akkurat som i kvantiseringen av lysets energi. Plancks konstant er en slags indikator på når vi er i kvantefysikkens domene; den setter en skala som blir “liten” (neglisjerbar) når en ser på “store” (klassiske) systemer. Legg også merke til at \hbar har akkurat samme enhet som angulærmomentet, $\text{Js} = \text{kg m}^2/\text{s}$! Så hvorfor da ikke prøve seg med å anta at i kvantedomenet må angulærmomentet være av størrelsesorden \hbar , kanskje \hbar ganget med ett eller annet enkelt, ikke for stort tall. Det er akkurat dette som er tilfelle — de “enkle tallene” er rett og slett heltall n . Så lenge n er rimelig liten, er vi i kvantedomenet. Blir n veldig stor, begynner systemet å oppføre seg klassisk.²

²Legg merke til at, som for energien, $\Delta L/L = [(n+1)\hbar - n\hbar]/n\hbar = 1/n \rightarrow 0$ for store n slik at angulærmomentet da blir en *kontinuerlig* størrelse slik vi er vant til i klassisk mekanikk.

Dette er et eksempel på **korrespondanseprinsippet**, formulert av Bohr som følger:

Kvanteteoriens forutsigelser om oppførselen til et fysisk system skal svare til de for et klassisk system i grensen hvor kvantetallene som bestemmer en tilstand blir veldig store.

Uten å gå inn på detaljene, kan vi si at korrespondanseprinsippet var en viktig ledestjerne for Bohr da han utviklet sin atomteori.

La oss til slutt se på Bohrs utledning av **atomformelen** fra de fire postulatene. Coulombkraften som virker på elektronet i avstand r fra kjernen er $F_e = ke^2/r^2$ der $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$. Denne kraften skal gi elektronets nødvendige sentripetalakselerasjon i sirkelbanen, $a = v^2/r$. Newtons 2. lov gir da

$$\frac{ke^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \quad \text{eller} \quad v^2 = \frac{ke^2}{m_e} \frac{1}{r}. \quad (3.4)$$

Videre kan vi sette opp elektronets energi som summen av dets potensielle energi i Coulombfeltet og dets kinetiske energi,

$$E = -\frac{ke^2}{r} + \frac{1}{2}m_e v^2. \quad (3.5)$$

Kombinerer vi dette med (3.4), får vi

$$E = -\frac{ke^2}{2r}. \quad (3.6)$$

Så langt har vi bare brukt klassisk fysikk. Nå innføres det fjerde postulatet, kvantiseringen,

$$m_e v r = n \hbar, \quad (3.7)$$

som kan brukes til å eliminere v fra (3.4) og løse ut radien,

$$r \equiv r_n = \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} n^2 \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.8)$$

Dette skrives gjerne som

$$r_n = a_0 n^2, \quad (3.9)$$

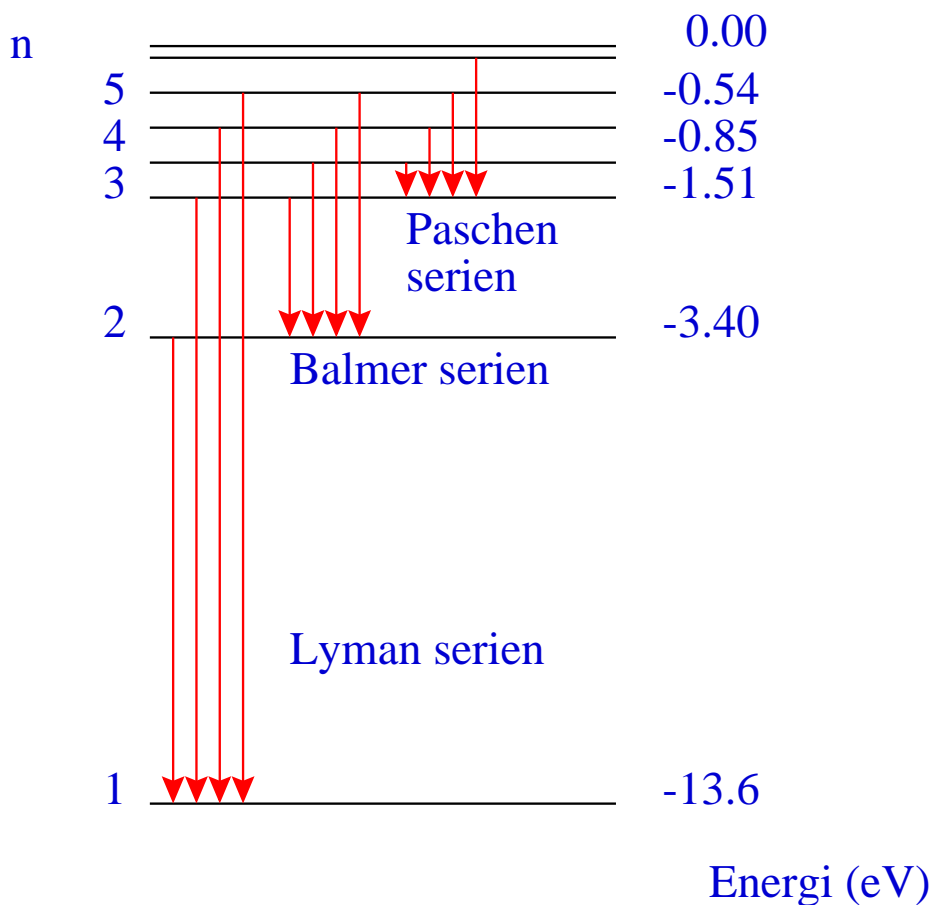
der $a_0 = \hbar^2/(m_e k e^2) \approx 0.0529$ nm kalles **Bohrradien**. Her ser vi at elektronradiene er kvantisert som kvadratiske heltallsmultipler av Bohrradien. Fra (3.6) følger nå også energiens kvantisering, som er Bohrs atomformel,

$$E_n = -\frac{k^2 m_e e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}. \quad (3.11)$$

Bruker vi det tredje postulatet og lyskvantenes (fotonenes) egenskaper $1/\lambda = \nu/c = E/(hc)$, reproduseres Rydbergs formel for strålingsoverganger mellom ulike energinivåer,

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{ke^2}{2a_0hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (3.12)$$

der kombinasjonen av naturkonstanter foran parentesen er i forbløffende overensstemmelse med Rydbergkonstanten R_H (sett inn tall og sjekk selv!). Figur 3.3 viser en skisse av noen av de mest kjente strålingsovergangerne med n_f henholdsvis lik 1, 2 og 3.



Figur 3.3: Ulike mulige overganger i hydrogenatomet. Grunntilstanden har kvantetall $n = 1$ og energi -13.6 eV, som også svarer til energien som trenge for å frigjøre et elektron i hydrogenatomet.

Som sagt var det en imponerende bragd av Bohr å konstruere sin modell utfra de forutsentningene som var gitt i 1913. La oss likevel avslutte med litt etterpåklokskap og påpeke noen av modellens svakheter:

- Utsagnet “elektronet befinner seg i en radius r fra kjernen” er meningsløst i kvantemekanikken. Elektronet må behandles som en bølge, og det eneste vi kan si noe om, er *sannsynligheten* for å finne elektronet et visst sted. Ligningen $r_n = a_0 n^2$ fremstår dermed som ytterst tvilsom, og den er tross alt fundamentet for energiformelen. Men det vil vise seg at disse r_n svarer til de *mest sannsynlige* radiene i hydrogenatomet.
- Elektronene har *ikke* bare rotasjons-kinetisk energi, men også en radiell komponent som det ikke er tatt hensyn til her.
- Bohrs modell stemmer relativt bra for hydrogenatomet. Men for atomer med flere elektroner må en ta hensyn til vekselvirkningen mellom elektronene, og da blir ting betydelig mer komplisert.
- Bohr var heldig på den måten at Coulombpotensialet er meget spesielt blant de sentralsymmetriske potensialene. For de fleste andre sentralsymmetriske potensialene vil energien ikke bare avhenge av kvantetallet n men også av angulærmomentet L .

Alt dette vil dere høre mere om når vi gjennomgår hydrogenatomet i detalj senere i kurset.

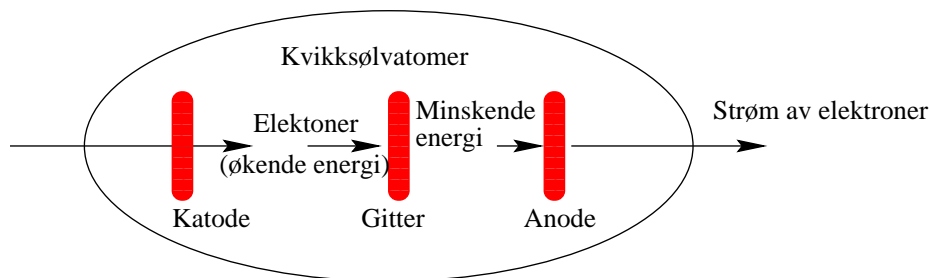
3.2.1 Franck-Hertz eksperimentet

I 1914 utførte James Franck og Gustav Hertz (nevøen til den andre Hertz) et eksperiment som var den første bekræftelse på eksistensen av stasjonære tilstander i atomer, dvs. at kun bestemte eksiterte tilstander for elektronene var tillatt, i motsetning til det kontinuerlige spekteret av tilstander som klassisk fysikk ga. For dette fikk Franck og Hertz Nobelprisen i fysikk i 1925.

Et eksperimentelt oppsett er vist i Figur 3.4. Eksperimentet ble gjennomført ved å akselerere elektroner gjennom en gass av kvikksølv vha. en påsatt spenning V_{KG} mellom katoden og gitteret. Mellom gitteret og anoden bremses så elektronene ned av en motspenning V_{GA} som er svakere enn V_{KG} . Hvis elektronene ikke taper noe energi på veien, vil de komme fram til anoden med en kinetisk energi $K_e = eV_{KA} = e(V_{KG} - |V_{GA}|)$. Hvis noen av elektronene derimot kolliderer med kvikksølvatomer underveis, vil de miste noe av sin kinetiske energi; er dette energitapet større enn eV_{KA} når de ikke fram til anoden og bidrar ikke til strømmen gjennom røret.

Økes spenningsforskjellen mellom katode og anode, vil flere og flere elektroner nå anoden. Naivt skulle man altså forvente en monotont økende strøm som funksjon av spenningen V_{KA} . Dette var ikke tilfelle eksperimentelt. Et plott av elektrisk strøm som funksjon av det akselererende potensialet viste toppe ved heltalls multipler av en spenning på ca. 4.9 V, se Figur 3.5.

Det som skjer er at ved bestemte spenninger (og dermed kinetiske energier) for elektronene, har elektronene en energi som svarer til den første eksiterte tilstanden i kvikksølvatomet. Når et elektron kolliderer og dermed overfører sin kinetiske energi til kvikksølvatomet slik at dette blir eksitert, bremses det ned og færre elektroner når anoden. Derfor faller strømmen for spenninger rundt 4.9 V, selv om noen elektroner går gjennom uten å kolliderer. Økes spenningen videre, øker strømmen igjen til elektronene har en kinetisk energi på $K_e = 2 \times 4.9 \text{ eV}$. Da har elektronet energi nok til å eksitere to kvikksølvatomer og en observerer en ny topp i elektronstrømmen.



Figur 3.4: Skjematisk oppsett for Franck og Hertz eksperiment med kvikksølv i 1914. Et rør med tre elektroder fylles med kvikksølv damp. Elektroner akselereres over et spenningsfall V_{KG} mellom katoden og et gitter. Et mindre spenningsfall med motsatt polaritet settes opp mellom gitteret og anoden. Strømmen av elektroner avhenger av hvordan de vekselvirker med kvikksølv.

Når kvikksølvatomet går tilbake til grunntilstanden, måles det en elektromagnetisk stråling med bølglengde på $\lambda = 254 \text{ nm}$. Det svarer til en energiforskjell gitt ved

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{254 \text{ nm}} = 4.88 \text{ eV}, \quad (3.13)$$

i samsvar med den målte spenningen og dermed den kinetiske energi som elektronene har.

3.3 Oppgaver

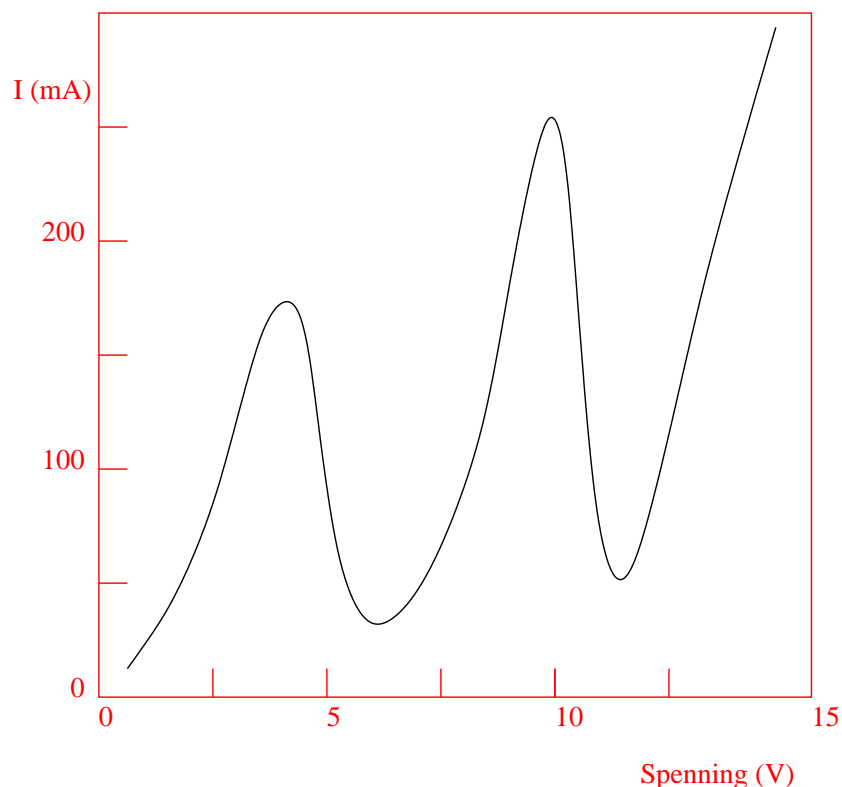
Oppgave 3.1 Synlig lys har bølglengder i området $4000\text{--}7000 \text{ \AA}$.

- Fra Bohrs formel for energinivåene i H-atomet, vis at bølglengden til det emitterte lyset vil ligge utenfor det synlige området ved alle overganger til laveste nivå (Lyman-serien).
- Hva blir den korteste og den lengste bølglengden ved overganger til det nest laveste nivået (Balmer-serien)?
- Hvor mange spektrallinjer ligger i det synlige området i denne serien?

Oppgave 3.2 I den enkleste versjonen av Bohrs atommodell antas det at elektronet beveger seg i sirkulære baner rundt en atomkjerne som ligger i ro, d.v.s. at den har en masse som regnes å være uendelig stor. Spesielt for de letteste atomene er dette ikke en særlig god antagelse. I H-atomet består kjernen kun av et enkelt proton med en masse m_p som er 1836 ganger tyngre enn elektronmassen m_e .

- Ved å ta med bevegelsen til protonet i H-atomet, vis at den totale bane-spinnet for atomet i dets massesentersystem er $L = \mu\omega r^2$, hvor r er avstanden mellom elektronet og protonet, ω er vinkelfrekvensen til deres sirkulære bevegelse og μ er deres reduserte masse

$$\mu \equiv \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}.$$



Figur 3.5: Strømmen av elektroner gjennom røret som funksjon av det akselererende potensialet V . Flere og flere elektroner når anoden ettersom spenningen økes. Ved $V \approx 4.9$ V, 2×4.9 V, 3×4.9 V osv. avtar strømmen. Det svarer til at elektronene taper 4.9 eV per kollisjon.

- b) Finn energiene til de stasjonære tilstandene til atomet ved bruk av Bohrs kvantiseringsbetingelse $L = n\hbar$, og vis at dette mer nøyaktige resultatet er identisk med Bohrs energiformel med det unntak at den reduserte massen μ nå inngår i stedet for elektronmassen m_e .
- c) Hvor mye forandres den lengste bølgelengden H_α ($n = 3 \rightarrow n = 2$) i Balmer-serien ifølge denne mer korrekte formelen?
- d) Spektrallinjen H_α fra deuterium (tungt hydrogen) har bølgelengden $\lambda = 656.029$ Å. Finn massen til atomkjernen i deuterium.

Oppgave 3.3 Et atom med masse M , opprinnelig i ro, emitterer et foton ved en overgang fra et energinivå E_1 til et annet nivå E_2 . Det sies vanligvis at det emitterte fotonets energi er gitt ved $h\nu = E_1 - E_2$, der ν er fotonets frekvens og h er Plancks konstant. Imidlertid vil en liten del av energien overføres til atomet som kinetisk energi (rekylvirkning), og fotonet får derfor en tilsvarende mindre energi: $h\nu = E_1 - E_2 - \Delta E$.

- a) Finn et uttrykk for denne korreksjonen ΔE . Gå ut fra at fotonet har en bevegelsesmengde lik $h\nu/c$.
- b) Gjennomfør en tilsvarende diskusjon for det tilfellet at atomet absorberer et foton.
- c) Regn ut den numeriske verdien av $\Delta E/h\nu$ for en overgang $E_1 - E_2 = 4.86$ eV i et kvikksølvatom som har masse lik $200 \times$ massen til et proton.

Oppgave 3.4

- a) Hvilke energier har lyskvant som faller i den synlige delen av spektret, $4000 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 7000 \text{ \AA}$?
- b) Oppgi noen spektrallinjer av atomært hydrogen og enkeltionisert helium som tilsvarer synlig lys.
- c) Finn størrelsesorden av effekten på disse dersom man tar hensyn til rekyl av atomet under emisjonen, og vis at denne effekten er langt mindre enn isotopeffekten (effekt p.g.a. redusert masse).

Oppgave 3.5 Bruk Bohrs kvantiseringsbetingelse $L = n\hbar$ til å kvantisere energien av en partikkel i et sentral potensial $V(r) = V_0(r/a)^k$. Beregn den kvantiserte energien som funksjon av kvantetallet n . Kontrollér n -avhengigheten for $k = -1$ som svarer til Bohrs atom modell for hydrogen. Lag en figur som viser $V(r)$ for store verdier av k . Forklar ut fra figuren verdien av elektronets bane-radius for $k \rightarrow \infty$.

Kapittel 4

MATERIEBØLGER

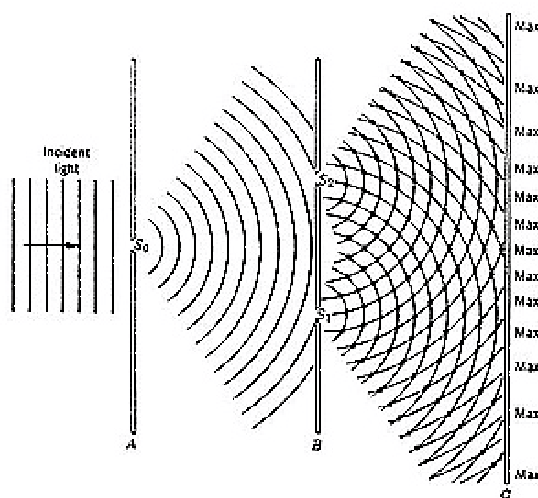
I kapitlet om fotoner lærte vi at elektromagnetisk stråling (lys), som vi er vant til å tenke på som bølger, også utviser partikkelegenskaper. Nå skal vi se noe som kanskje er enda mer sjokkerende: all materie utviser, ved siden av de velkjente partikkelegenskapene, også bølgeegenskaper! Grunnen til at vi ikke ser dette i hverdagen, er at de typiske bølgelengdene for makroskopiske objekter er veldig små — jo større masse, jo mindre bølgelengde. Grovt sagt trenger man nemlig et måleapparat med samme dimensjon som bølgelengden for å avsløre bølgenaturen. Imidlertid er f.eks. elektroner små og lette nok til at man kan gjøre interferensforsøk med dem, som vi skal se straks. En viktig konsekvens av innsikten at materien har bølgeegenskaper, er at disse ikke kan beskrives av klassisk mekanikk (Newtons lover), slik at vi trenger en ny bølgeligning for å beskrive materien! Denne bølgeligningen heter Schrödingerligningen, og vi kommer til å stifte vårt første bekjentskap med den rett etter dette kapitlet.

4.1 Dobbeltpalteeksperimentet

Figur 4.1 viser en skisse av et interferensforsøk (dobbeltpalteeksperiment) med lys. Interferens er et bølgefænomen dere kjenner til, både fra videregående og fra FYS2130, hvor det blir beskrevet for klassiske bølger (f.eks. på vann) og for e.m. stråling (f.eks. laserlys). Tenk dere nå at vi bytter ut den innkommende e.m. strålingen med en jevn strøm av monoenergetiske elektroner og gjør et tilsvarende eksperiment. Skjermen bak er da gjerne være fluorescerende, slik at den produserer et lysglimt hver gang den treffes av et elektron. Hva skjer?

For det første, hvis vi sender elektronene gjennom én enkelt, bred spalte,¹ oppstår det bare en stripe på skjermen, like bred som spalten, etter hvert som elektronene treffer skjermen. Det er hva vi skulle forvente for klassiske partikler. Men gjør vi denne ene spalten smal nok, vil elektronene begynne å treffe punkter på skjermen over et område (en stripe) som er mye *bredere* enn spalten, og etter hvert lage en jevn fordeling i dette området! Og verre skal det bli: legger vi til en spalte til, slik at vi nå har to smale spalter, vil vi plutselig få områder på skjermen som *aldri* blir truffet av noe elektron lenger. Figur 4.2 illustrerer hvordan mønsteret på skjermen utvikler seg etter hvert som flere og flere elektroner

¹Nøyaktig hva vi mener med “bred” eller “smal” spalte, vil vi komme tilbake til senere i kapitlet.



Figur 4.1: Dobbeltspalteeksperiment I. Relativt nylig, se Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 2868, klarte fysikere å observere interferensfenomen mellom bølgepakker som besto av kun to fotoner.

treffer i dette tilfellet

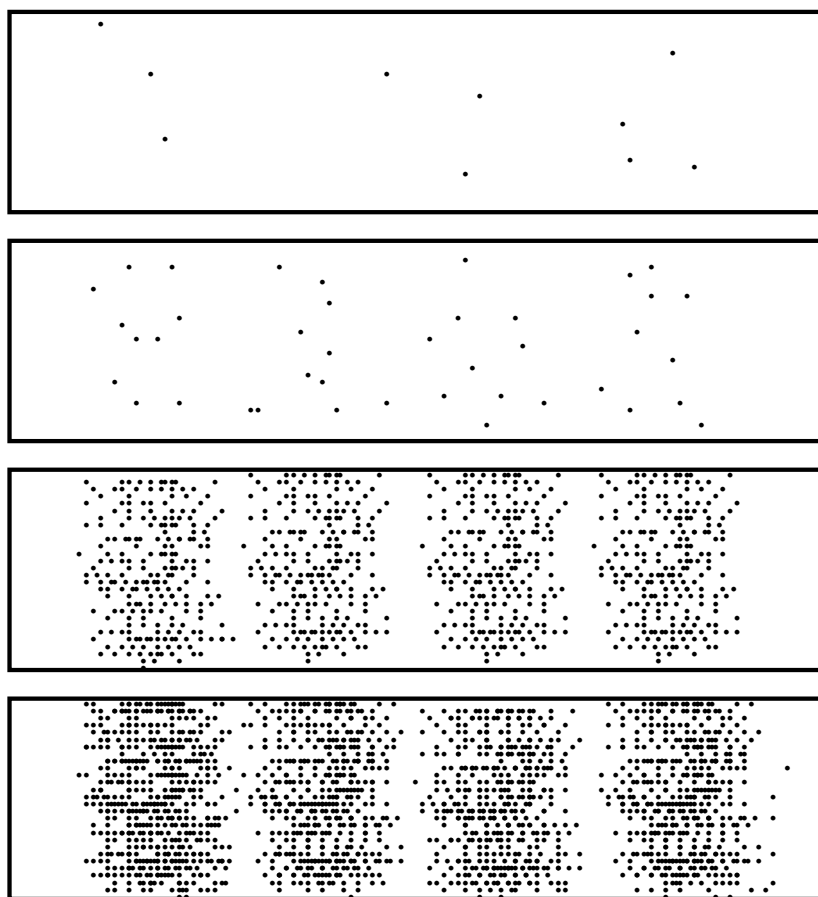
Tenk på hva som skjer her: det at elektronene får en ekstra spalte de kan gå igjennom, gjør at det oppstår områder bak spaltene der de ikke lenger kan treffe. Dekker vi til en av spaltene, får vi tilbake den jevne fordelingen av prikker. Dette kan ikke forklares hvis vi ser på elektronene som partikler, for hvorfor i all verden skulle de begynne å unngå visse områder bak spaltene, bare fordi de har fått en ekstra åpning de kan gå igjennom?

Vi har allerede røpet at dette henger sammen med at elektronene oppfører seg som bølger. Den brede stripen en får for én spalte svarer til det første (sentrale) diffraksjonsmaksimum, mens stripene som oppstår på skjermen i to-spalte-tilfellet, er et interferensmønster.² Legg imidlertid merke til en ting til som er merkelig: elektronene går gjennom spaltene én og én. Interferensmønsteret oppstår *etter hvert* (jf. figur 4.2), uansett hvor lenge vi lar det gå mellom hvert elektron som sendes. Vi er altså tvunget til å konkludere med at hvert elektron oppfører seg som en bølge, går gjennom begge spaltene samtidig og interfererer med seg selv!

Når elektronet treffer skjermen, oppfører det seg som en partikkel igjen. Det treffer et bestemt punkt og lys sendes ut fra den fluorescerende skjermen. Derimot vet vi ikke med sikkerhet på forhånd *hvilket* punkt som blir truffet.³ Som dere ser i figur 4.2, virker dette helt tilfeldig til å begynne med. Men etter hvert ser man at det danner seg noen områder som blir truffet oftere enn andre, dvs. områder *der det er større sannsynlighet for at elektronet skal befinne seg*. Som dere kjenner til fra bølgelæren, er intensiteten i et interferensmønster relatert til kvadratet av amplituden til den innkommende bølgen. Med andre ord:

²Vi ser her bort fra høyere diffraksjonsmaksima, siden de er betydelig svakere

³Fortsatt noen som ikke synes kvantefysikk er rart?



Figur 4.2: Dobbeltspalteeksperiment II. Elektroner treffer skjermen, *én partikkel ad gangen*, og produserer etter hvert et interferensmønster.

Hvert elektron kan beskrives som en bølge. Det som “oscillerer” i denne bølgen er relatert til sannsynligheten for å påvise elektronet *som partikkel*. Nærmere bestemt er sannsynligheten for å finne *partikkelen*, proporsjonal med kvadratet av *bølgens amplitude*. Dette er partikkel-bølgedualiteten i et nøtteskall.

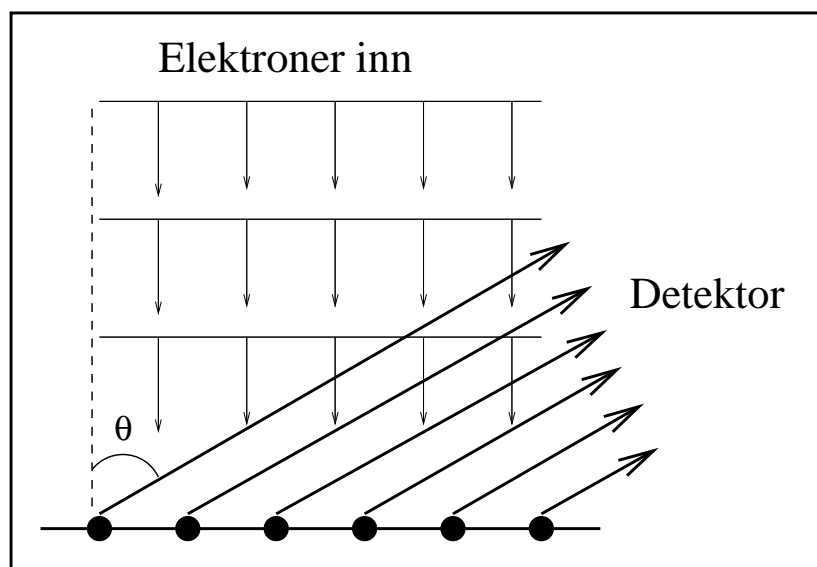
Forvirret? Dere lurar kanskje på hva dette elektronet “egentlig” er. Bølge eller partikkel? Eller om vi nå aksepterer det faktum at det er *både og* — hvorfor viser det seg da iblant som bølge (interfererer med seg selv) og iblant som partikkel (treffer skjermen i ett punkt)? Svaret er at dette er bestemt, grovt sett, av størrelsen på “måleapparatet” i forhold til elektronets bølgelengde. Hva vi mener med elektronets bølgelengde, er tema for avsnitt 4.3 og 4.4. Vi utsetter derfor “bølge eller partikkel”-diskusjonen og en presisering av hva vi mener med “størrelsen på måleapparatet” til slutten av kapitlet, i avsnitt 4.5. Sannsynlighetstolkningen av materiebølgen kommer vi utførlig tilbake til når vi går i gang

med Schrödingerligningen.

En liten advarsel til slutt: vi har demonstrert at e.m. stråling og materie har det til felles at de utviser både bølge- og partikkelegenskaper. Man skal være klar over at det likevel er forskjell på materiebølger og elektromagnetiske bølger. I e.m. stråling er den “tilhørende” bølgen det oscillerende elektriske feltet, samtidig som bølgen koder sannsynligheten for å observere den “tilhørende” partikkelen, fotonet. Materiebølger er annerledes — her er det *bare* sannsynligheten for å observere partikkelen som oscillerer. En konsekvens av dette er at materiebølger kan ikke observeres *direkte*, mens det (oscillerende) elektriske feltet kan detekteres direkte, f.eks. ved at det utøver en kraft på ladede partikler.

4.2 Davisson-Germer eksperimentet og Bragg diffraksjon

Dobbeltspalteeksperimentet er kanskje det konseptuelt enkleste eksemplet på interferens med materiebølger, men historisk var det et annet eksperiment som ble gjort først, av Davisson og Germer i 1927. De sendte elektroner mot et nikkelkrystall, se figur 4.3. Den inkommande elektronbølgen spres mot atomene



Figur 4.3: Davisson-Germer-eksperimentet.

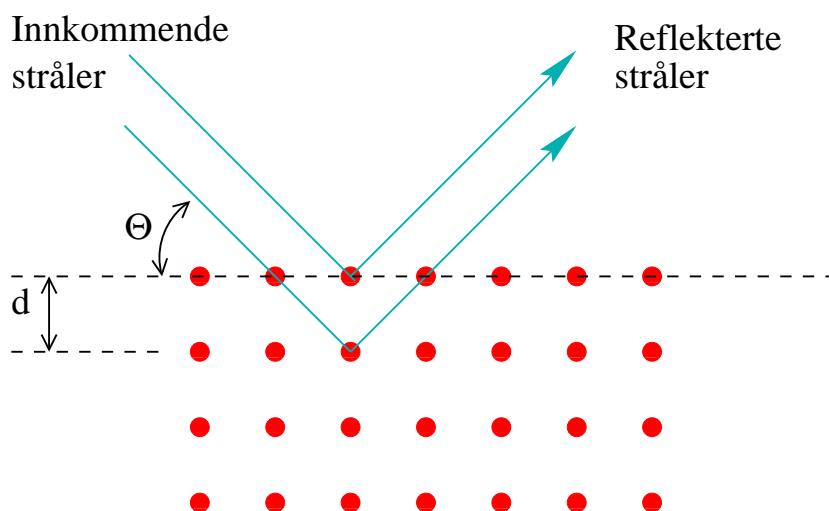
i krystallets gitteroverflate, slik at hvert atom effektivt sett fungerer som en punktkilde som sender ut bølgen igjen. Detektoren vil da registrere et interferensmønster, med konstruktiv interferens for vinkler der

$$d \sin \theta = m\lambda, \quad (4.1)$$

der d er avstanden mellom atomene og m er et heltall. Dette tilsvarer at forskjellen i veilengde for de deler av bølgen som treffer forskjellige atomer er et helt

antall bølgelengder. Igjen vil interferensmønsteret oppstå selv om elektronene sendes inn ett og ett, dvs. elektronbølgen interfererer med seg selv, akkurat som i forrige avsnitt. Vi har enda ikke sagt hva elektronenes bølgelengde λ egentlig er. Det får dere vite mere om i neste avsnitt.

Et lignende eksperiment er Bragg-diffraksjon med elektroner.⁴ Her brukes elektroner med høyere energi enn i Davisson–Germers forsøk, slik at elektronene trenger lengre inn i krystallen og også spres mot dypereliggende lag av atomer, se figur 4.4. Legg merke til at elektronene nå sendes inn i en vinkel θ i forhold til overflaten, og detektoren plasseres i samme vinkel på den andre siden av normalen. Vi ser nå at strålen som spres fra atomlag nummer 2, går en strekning



Figur 4.4: Bragg-diffraksjon. Avstanden mellom atomene i krystallet er d . Spredningsvinkelen for innkommende og utgående elektroner er θ .

som er $2d \sin \theta$ lengre enn strålen som spres i overflaten osv. Her har vi altså interferens mellom *lagene* av atomer i krystallen, og kriteriet for konstruktiv interferens er nå

$$2d \sin \theta = m\lambda. \quad (4.2)$$

Denne ligningen er kjent som **Bragg's lov**. Diffraksjonseksperiment av denne typen kan utføres ikke bare med elektroner men også med f.eks. nøytroner eller røntgenstråling, og er et viktig verktøy i forskningen på faste stoffer/krystaller.

4.3 De Broglies hypotese

Nå som vi har overbevist oss selv om at materie, som f.eks. elektroner, har både partikkel- og bølgeegenskaper, er det på tide å se nærmere på disse bølgeegenskapene.

La oss minne om skillet mellom partikler og bølger i klassisk fysikk: klassisk har en partikkel egenskaper som posisjon, bevegelsesmengde, kinetisk energi,

⁴Vi nevnte såvidt Bragg-diffraksjon for e.m. bølger i avsnitt 2.3. Det var et klassisk resultat fordi det bare bygde på det elektromagnetiske feltets bølgenatur. Bragg-diffraksjon med elektroner er en kvantefysisk effekt som hviler på elektronets bølgenatur.

masse og elektrisk ladning. En klassisk bølge derimot beskrives ved størrelser som bølgelengde, frekvens, hastighet, amplitude, intensitet og energi. Den viktigste forskjellen mellom en klassisk partikkel og bølge er at partikkelen kan *lokaliseres*, dvs. har en skarpt definert posisjon, mens en bølge er spredt utover rommet. Vi skal komme tilbake til dette når vi tar for oss Heisenbergs uskarphetsrelasjon i vår diskusjon av kvantemekanikken.

Det var Louis Victor de Broglie som i 1923 først foreslo at også materie, dvs. partikler med endelig masse som f.eks. elektroner, protoner, atomer m.m., utviser både partikkel- og bølgeegenskaper. For fotoner har vi relasjonene mellom bølge- og partikkelegenskaper gitt ved $E = h\nu$ og $p = h/\lambda$, med Plancks konstant som knytter sammen de to egenskapene. De Broglie foreslo at lignende relasjoner også skulle gjelde for materie og postulerte at f.eks. elektroner kunne tilordnes en bølgelengde

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (4.3)$$

hvor p er elektronets bevegelsesmengde.

Dette er de Broglies hypotese som han fikk Nobelprisen for i 1929. Bølgelengden λ kalles ofte de Broglie-bølgelengden. Legg merke til at relasjonen (4.3) gjelder både for relativistiske og ikke-relativistiske partikler. For ikke-relativistiske partikler (dvs. partikler med hastighet mye mindre enn lyshastigheten) bruker vi den vanlige relasjonen $p = mv$. Har partiklene for stor hastighet, kan ikke denne brukes, og vi må regne relativistisk, med $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$.

Tilsvarende må materiebølger ha en frekvens. Den er gitt ved

$$\nu = \frac{E}{h}. \quad (4.4)$$

Det er en ting som er viktig å merke seg her, som vi også kommer tilbake i neste avsnitt: for et foton har vi en enkel relasjon som gir oss både bølgelengde og frekvens, nemlig $\lambda\nu = c$, fra en gitt energi eller bevegelsesmengde. For massive partikler derimot, trenger vi separate relasjoner for bølgelengde $\lambda = h/p$ og frekvens $\nu = E/h$. Produktet $\nu\lambda$ er *ikke* lik partikkelens hastighet. Hvordan en identifiserer partikkelens hastighet for en materiebølge, får dere se i neste avsnitt.

Før vi går videre, vil jeg omskrive de to ligningene over til en form som er mye brukt og ofte mer praktisk. La oss innføre **bølgetallet** k , med definisjonen

$$k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (4.5)$$

og **vinkelfrekvensen** ω som

$$\omega \equiv 2\pi\nu. \quad (4.6)$$

Videre får vi bruk for den mest populære varianten av Plancks konstant,

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}. \quad (4.7)$$

Med disse kan de Broglies bølge-partikkel relasjoner uttrykkes som

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k, \quad (4.9)$$

og

$$E = h\nu = \hbar\omega. \quad (4.11)$$

Lær dere disse formlene! De er de fundamentale uttrykkene for sammenhengen mellom bølge- og partikkelegenskaper for alle fenomener og spiller en sentral rolle i kvantefysikken.

Dere lurer kanskje på hva vi har vunnet med vår lille omskriving? For det første har vi fått ting på en mer enhetlig og symmetrisk form som vil lette beregninger. Som dere vet, går frekvensen som en over perioden. Bølgetallet k på sin side kan sees på som en slags “romlig frekvens”, siden den går som en over den “romlige perioden” λ . Det er spesielt kjekt i relativistisk kvantemekanikk og kvantefeltteori, som vi ikke skal gå inn på i dette kurset. Det finnes også en annen praktisk grunn: mens bølgelengden alltid er en skalar, kan bølgetallet generaliseres til en *vektor* som peker i den retningen bølgen beveger seg akkurat som bevegelsesmengden.

4.4 Gruppe- og fasehastighet

Vi har snakket mye om at partikler også er bølger, og omvendt. I dette avsnittet skal vi prøve å koble de to begrepene sammen og bl.a. finne ut hvordan vi kan identifisere *partikkelens* hastighet utfra en gitt bølgeløsning. La oss først minne om et par begreper fra bølgelæren. I elektromagnetismen har dere sett at Maxwells ligninger gir bølgeligninger på formen

$$v^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2}, \quad (4.12)$$

hvor ψ kan representere det elektriske (\mathcal{E}) eller magnetiske feltet (\mathcal{B}) og hvor

$$v^2 = c^2 = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}, \quad (4.13)$$

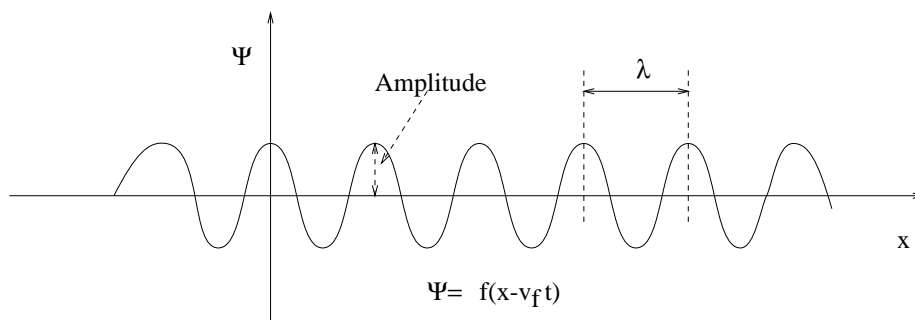
er kvadratet av hastigheten til lyset for det e.m. tilfellet. Det ligger ingen dypere mening i at vi her har innført symbolet ψ som en betegnelse for bølgeløsningen, annet enn at det er dette symbolet vi kommer til å bruke for materiebølger (løsninger av Schrödingerligningen).

Slik ligning (4.12) står kan den representere bølgeligningen for flere systemer, alt fra e.m. felt til trykkbølger i en gass eller en vibrerende streng. Løsningen til ligning (4.12) kan skrives på generell form som

$$\psi(x, t) = f(x \mp v_f t), \quad (4.14)$$

som skal representere en bølge som propagerer som funksjon av tid og posisjon med en hastighet v_f . Sistenevnte kalles fasehastigheten og er hastigheten bølgen reiser med. Minustegnet svarer til en forover (i x -retning) reisende bølge, mens plusstegnet svarer til en bølge som brer seg bakover. Figur 4.5 illustrerer noe av dette. Planbølgeløsninger til bølgeligningen over er gitt ved funksjoner på formen

$$\psi(x, t) = A \sin[k(x - v_f t)]. \quad (4.15)$$



Figur 4.5: Bølge som propagerer forover med fasehastighet v_f og bølgelengde λ .

eller

$$\psi(x, t) = A \cos[k(x - v_f t)], \quad (4.16)$$

der A kalles amplituden. (Den generelle løsningen er en lineær kombinasjon av sinus- og cosinusløsningen.)

La oss foregripe begivenhetene litt igjen og vise dere enkleste variant av bølgeligningen for materiebølger. Den har nemlig en litt annen form:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}. \quad (4.17)$$

Dette er *Schrödingerligningen* for *frie* partikler. Legg merke til at den inneholder en *første* derivert mhp. tiden. Planbølgeuttrykkene (4.15) og (4.16) er derfor *ikke* løsninger av (4.17). (Test selv ved innsetting!) Derimot kan en planbølgeløsning for Schrödingerligningen skrives som den komplekse eksponensialfunksjonen (igjen, test selv!)

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= Ae^{ik(x - v_f t)} \\ &= Ae^{i(kx - \omega t)} \\ &= A \cos(kx - \omega t) + iA \sin(kx - \omega t), \end{aligned} \quad (4.18)$$

der vi i den første overgangen har brukt at⁵

$$kv_f = \frac{2\pi v_f}{\lambda} = 2\pi\nu = \omega. \quad (4.19)$$

Legg merke til at innsetting av denne løsningen i (4.17) krever at

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.20)$$

dvs. at for en fri ikke-relativistisk partikkel må $E = p^2/2m$ som forventet, når konstanten k tolkes som bølgetallet (som vi har gjort over).

Vi ser altså at **fasehastigheten**, som er **bølgens hastighet**, i Schrödingerligningen for en fri ikke-relativistisk partikkel er gitt ved

⁵Siden frekvensen ν er antall bølgetopper som passerer i et tidsintervall er den gitt fra fasehastigheten som $\nu = v_f/\lambda$.

$$v_f = \lambda\nu = \frac{\omega}{k}, \quad (4.22)$$

i sterk analogi med hastigheten for e.m. stråling.

Men kan vi assosiere denne med *partikkelens* hastighet? Nei, da får vi problemer. Dette ser vi fra

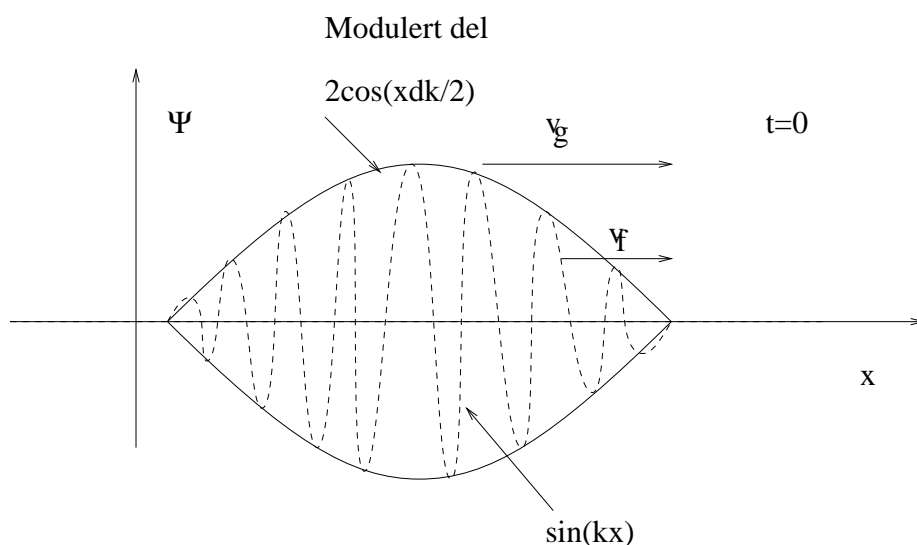
$$v_f = \lambda\nu = \frac{h}{p} \cdot \frac{E}{h} = \frac{E}{p}, \quad (4.23)$$

hvor vi har brukt de Broglies hypotese. Antar vi at vi har ikke-relativistiske partikler med energi $E = \frac{1}{2}mv^2$ og bevegelsesmengde $p = mv$, finner vi at

$$v_f = \frac{E}{p} = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{mv} = \frac{v}{2}. \quad (4.24)$$

Dersom en planbølgeløsning skulle representert en partikkel, burde bølgehastigheten (fasehastigheten) også svart til partikkelens hastighet. Dette stemmer ikke helt i siste ligning — vi får en faktor 2 for lite. Merk også at planbølgen svarer til en kontinuerlig (kompleks) harmonisk bølge av uendelig utstrekning, med en gitt bølgelengde og frekvens. En slik bølge kan ikke representere en partikkel som befinner seg på et bestemt sted i rommet.

Det vi ønsker oss for å representere en lokalisert partikkel er noe som ligner mer på skissen i figur 4.6. For å få til en slik *bølgepakke*, må vi addere (eller *superponere*) flere planbølger (sin/cos-løsninger) med ulike verdier på k og ω .



Figur 4.6: Eksempel på superponering av to bølger ved tiden $t = 0$ og $dk = k_1 - k_2$.

Som et enkelt eksempel for å belyse dette velger vi å se på superponering av to bølger med ulik vinkelfrekvens ω_1 og ω_2 og bølgetall k_1 og k_2 men med

samme amplitude A ,⁶

$$\psi(x, t) = Ae^{i(k_1x - \omega_1t)} + Ae^{i(k_2x - \omega_2t)}. \quad (4.25)$$

Siden vi ønsker oss en bølgepakke som har relativt veldefinert frekvens og bølgetall, velger vi bølgetall og frekvenser som bare skiller seg ved små differanser, henholdsvis dk og $d\omega$:

$$k_1 = k_0 + dk, \quad k_2 = k_0 - dk \quad (4.26)$$

$$\omega_1 = \omega_0 + d\omega, \quad \omega_2 = \omega_0 - d\omega. \quad (4.27)$$

Dette gir oss

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= A \left[e^{i[(k_0+dk)x - (\omega_0+d\omega)t]} + e^{i[(k_0-dk)x - (\omega_0-d\omega)t]} \right] \\ &= Ae^{i(k_0x - \omega_0t)} \left[e^{i[(dk)x - (d\omega)t]} + e^{-i[(dk)x - (d\omega)t]} \right] \\ &= Ae^{i(k_0x - \omega_0t)} \cdot 2 \cos[(dk)x - (d\omega)t]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Vi har altså konstruert en planbølge som beveger seg med fasehastighet ω_0/k_0 , *modulert* av en cosinusbølge som beveger seg med hastighet $d\omega/dk$. Sistnevnte er altså hastigheten til *omhyllingskurven*. Den kalles **gruppehastighet**, og det er denne som identifiseres med **partikkelens hastighet**. I det generelle tilfellet, for en realistisk partikkel, hvor bølgepakken (pulsen) konstrueres fra uendelig mange bølger med en kontinuerlig fordeling av bølgelengder *defineres* gruppehastigheten som differensialet:

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0}, \quad (4.30)$$

som evalueres ved det sentrale bølgetallet k_0 .

La oss sjekke at dette er meningsfylt ved å se på vår ikke-relativistiske partikkel igjen. Vi har fra ligning (4.20) at

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v, \quad (4.31)$$

dvs. gruppehastigheten svarer til partikkelens hastighet. Gruppehastigheten til en materiebølge er altså lik hastigheten til partikkelen hvis bevegelse den skal representere, og de Broglies postulat er dermed konsistent. Vi får samme resultat dersom vi hadde antatt en relativistisk beskrivelse. Dersom $dv_f/dk \neq 0$ kan vi nå bruke $\omega = kv_f$ til å relatere gruppe- og fasehastigheten til hverandre,

$$v_g = v_f + k \frac{dv_f}{dk}. \quad (4.32)$$

(Vis dette!)

⁶ Dette eksemplet er forenklet. Addisjon av bare to planbølger vil *ikke* gi en enkelt puls som i figur 4.6, men snarere en periodisk bølgegruppe. For å få en enkelt puls, må man addere uendelig mange planbølger. Likevel, denne beregningen illustrerer prinsippet.

Oppskriften for å bestemme gruppehastigheten til en generell materiebølge er å sette opp partikkelens *totale* energi E som funksjon av bevegelsesmengden p . Bruker en så at $E = \hbar\omega$ og $p = \hbar k$, finner en funksjonen $\omega(k)$. Et slikt uttrykk for frekvensen som funksjon av bølgetallet kalles for *dispersjonsrelasjon*. Gruppehastigheten er da den deriverte $d\omega/dk$. I ukeoppgavene kommer dere til å se noen enkle eksempler på dette.

4.5 Bølge eller partikkel?

Vi avslutter kapitlet med å svare litt mer inngående på spørsmålet vi stilte tidligere: hvorfor oppfører materien (og lyset) seg iblant som bølger (interferens osv.), og iblant som partikler? Svaret er at det er *eksperimentet* som avgjør. Før vi observerer, er det meningsløst å spørre om objektet er bølge eller partikkel. En kan kanskje uttrykke det som at det har begge mulighetene i seg. Det er først når vi “forstyrrer” det, ved f.eks. å legge en spalte i veien for det, at det avgjøres om det er partikkel- eller bølgenaturen som observeres. Kriteriet er objektets (elektronets eller lysets eller hva det nå er) bølgelengde i forhold til måleapparatets “størrelse” D . Hvis $\lambda \ll D$, vil objektet se ut som en partikkel. Er derimot bølgelengden omtrent lik eller større enn D , fremkommer bølgenaturen. (Tenk på en båt på havet. Blir den truffet av en “bratt” bølge, dvs. en bølge med liten bølgelengde, vil dette føles mer som en kollisjon med et massivt objekt.)

La oss ta spalten som et eksempel: sender vi lys eller elektroner gjennom en spalte, må bredden på spalten være liten i forhold til lysets eller elektrone-nes (de Broglie) bølgelengde. Er spalten for bred, kan vi ikke skille bølge- og partikkeloppførsel — begge går bare rett igjennom spalten. Dette forklarer også hvorfor vi ikke ser bølgeoppførsel hos dagligdagse objekter. Anta for eksempel at vi ser på en stein som veier 1 kg og beveger seg med en hastighet på 10 m/s. Den vil da ha en de Broglie-bølgelengde

$$\lambda_{\text{stein}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = 6.6 \times 10^{-35} \text{ m}. \quad (4.33)$$

For å observere et diffraksjonsmønster for denne steinen, måtte man hatt en spalteåpning på 10^{-35} m, 25 størrelsesordener mindre enn et atom! Hvis vi derimot sender elektroner med kinetisk energi på $E_{\text{kin}} = 100$ eV mot en nikkellkrystall, hvor $d = 0.91$ Å har vi

$$\lambda_{e^-} = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{2m_e c^2 E_{\text{kin}}}} = 1.2 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad (4.34)$$

og vi vil være i stand til å observere et diffraksjonsmønster.

Når vi skal angi en “størrelse” for eksperimentet må vi imidlertid tenke oss litt forsiktig om. I fotoelektrisk effekt er det selvfølgelig ikke størrelsen på det rent konkrete eksperimentet, dvs. den elektroniske kretsen, som er tellende. Det er imidlertid heller ikke størrelsen på atomene, eller det området i metallet elektronene er bundet til som er viktig, den er ganske mye mindre enn bølgelengden på lyset. Det som teller her er den frekvensen, og i tur bølgelengden, som svarer til bindingsenergien (arbeidsfunksjonen) til elektronene — målingen er jo nettopp det at elektronene observeres løsrevet.

4.6 Oppgaver

Oppgave 4.1 I et elektronmikroskop får elektronene stor kinetisk energi ved at de akselereres i et elektrostatisk potensial V .

- a) Vis at de Broglie bølgelengden for et slikt ikke-relativistisk elektron er gitt ved formelen

$$\lambda = \frac{1.23}{\sqrt{V}} \text{ nm}$$

når V er antall volt (uten enheter!)

- b) Hva blir den tilsvarende formelen hvis elektronet er relativistisk?
 c) For hvilken spenning V gir den ikke-relativistiske formelen et svar som er 5% feil?

Oppgave 4.2 En partikkel med ladning e og masse m_0 akselereres av et elektrisk potensial V til en relativistisk hastighet.

- a) Vis at de Broglie bølgelengden for partikkelen er gitt ved

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eV}} \left(1 + \frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2}$$

- b) Vis at dette gir $\lambda = h/m_0v$ i den ikke-relativistiske grensen.
 c) Vis at for en relativistisk partikkel med hvileenergi E_0 er de Broglie bølgelengden gitt ved

$$\lambda = \frac{1.24 \times 10^{-2}}{E_0(\text{MeV})} \cdot \frac{\sqrt{(1 - \beta^2)}}{\beta} \text{ Å},$$

hvor $\beta = v/c$ og $E_0(\text{MeV})$ er hvileenergien målt i MeV.

Oppgave 4.3 Fra optikken vet vi at for å observere små objekter med lys, må bølgelengden maksimalt være av samme størrelsesorden som objektets utstrekning.

- a) Hva er den laveste frekvensen på lys som kan benyttes til å undersøke et objekt med radius 0.3 nm i et mikroskop?
 b) Hva er den tilsvarende energien?
 c) Hvis man i stedet ville bruke et elektronmikroskop, hva er da den laveste energien elektronene kan ha for at objektet skal kunne studeres i detalj?
 d) Er lys- eller elektronmikroskop å foretrekke for denne typen arbeid?

Oppgave 4.4 Lyd med frekvens 440 Hz og hastighet 340 ms^{-1} sendes vinkelrett på en smal spalte i en vegg. Spalten har en slik bredde at lydintensiteten har avtatt til det halve i en retning på 45° fra innfallsvinkelen bak veggen. Hvor bred er spalten?

Oppgave 4.5 Et fysisk system beskrevet ved hjelp av bølgeligninger som tillater $y = A \cos(kx - \omega t)$ som løsninger, der sirkelfrekvensen ω er en reell funksjon av bølgetallet k , kalles for et lineært, dispersivt system. Funksjonen $\omega(k)$ kalles for *dispersjonsrelasjonen* til systemet.

- a) Vis at dispersjonsrelasjonen for frie, relativistiske elektronbølger er gitt ved

$$\omega(k) = c \cdot \sqrt{k^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2},$$

der m er elektronets hvilemasse.

- b) Finn et uttrykk for fasehastigheten $v_f(k)$ og gruppehastigheten $v_g(k)$ til disse bølgene, og vis at produktet $v_f(k) \cdot v_g(k)$ er en konstant (uavhengig av k).
- c) Fra uttrykket for v_f ser vi at $v_f > c$! Kommenter dette fenomenet og hva det har å si for tolkningene av v_f og v_g ut fra den spesielle relativitetsteorien.

Oppgave 4.6 I denne oppgaven skal vi finne estimater for noen typiske uskarpheter, både for mikroskopiske og makroskopiske objekter. Vi antar at tilstandene til partiklene i oppgaven er gitt ved gaussiske bølgepakker.

- a) En partikkel med masse 1 g har en uskarphet i hastigheten på $\Delta v = 10^{-6} \text{ ms}^{-1}$. Hva blir den kvantemekaniske uskarpheten i posisjonen? Kommenter svaret.
- b) Et elektron med energi 10 keV er lokalisert i et område med utstrekning 0.1 nm. Hva blir uskarpheten i bevegelsesmengden til elektronet?
- c) Hva blir uskarpheten i elektronets energi?
- d) Et proton i en atomkjerne kan bevege seg i et område med en utstrekning av størrelsesorden 10^{-15} m . Hvis vi antar at protonet er "fanget" i et uendelig potensial, hva er den minste kinetiske energien det kan ha? Anslå en størrelsesorden for styrken av potensialet hvis dette likevel kan antas å være endelig.

Oppgave 4.7 Eksamen H-1995 Den relativistiske sammenhengen mellom en partikkels bevegelsesmengde p og energi E er gitt ved

$$E = \sqrt{E_0^2 + (pc)^2},$$

hvor c er lyshastigheten.

- a) Forklar hva $E_k = E - E_0$ står for. Hva er E_0 og E_k for et foton? Finn sammenhengen mellom bølgelengden λ og bevegelsesmengden p for et foton.
- b) Gjør kort rede for de Broglies ideer om materiebølger og sett opp uttrykket for de Broglie bølgelengden for en materiell partikkel med bevegelsesmengde p .

- c) Finn de Broglie bølgelengden for et elektron som funksjon av elektronets kinetiske energi. Bruk i dette tilfelle det ikke-relativistiske uttrykk for den kinetiske energien.

En mono-energetisk elektronstråle blir sendt skrått inn mot overflaten på et krystall, og spres i visse retninger fra krystallen. Under behandlingen av et slikt spredningsproblem gjør en bruk av den såkalte Braggbetingelsen

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

- d) Forklar de størrelsene som inngår og lag en enkel skisse av det eksperimentelle oppsettet.

Del II

KVANTEMEKANIKK

Kapittel 5

Kvantemekanikkens formalisme

Quantum mechanics: Real black magic calculus. *Albert Einstein*

Dette avsnittet er en oppsummering av kapittel 3 i Griffiths om den ikke-relativistiske kvantemekanikkens formelle basis som dekker noe videre enn det som er nødvendig å kunne på eksamen i FYS2140. I det som følger vil vi formulere kvantemekanikken gjennom fem postulater — med kommentarer — som danner et formelt grunnlag for alt vi gjør. Man bør merke seg at disse postulatene ikke lar seg bevise fra noe mere grunnleggende (i alle fall ikke i alle mulige tilfeller), og at de er, som f.eks. aksiomatiseringen av de reelle tall er i analysen, de grunnleggende byggestener som vi utleder det matematiske systemet som kvantemekanikken er fra. Hvorvidt dette har noe med virkeligheten å gjøre kan man bare finne ved å sammenligne målinger med kvantemekanikkens forutsigelser.

5.1 Tilstander

Postulat 1: Tilstanden til et system bestemmes av en **bølgefunksjon** $\Psi(x, t)$ som er en løsning av Schrödingerligningen (SL):

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi, \quad (5.2)$$

hvor \hat{H} er systemets Hamiltonoperator. $\Psi(x, t)$ inneholder *all informasjon* om systemet.

Vi vil så gi et par kommentarer til dette utsagnet:

1. Vi står fritt til å multiplisere $\Psi(x, t)$ med et vilkårlig, (generelt) komplekst tall, uten at dette endrer fysikken for systemet, gjerne for å normere slik at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = 1. \quad (5.3)$$

2. Løsningene av SL, tilstandene $\Psi(x, t)$, kan beskrives som abstrakte vektorer i et kompleks (uendeligdimensjonalt) indreproduktrom, med indreprodukt definert ved

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx. \quad (5.4)$$

Notasjonen for indreproduktet stammer fra Paul Dirac, og de to involverte vektorene kalles henholdsvis for “bra” ($\langle \psi |$) og “ket” ($|\psi \rangle$). Vi bruker gjerne denne notasjonen når vi vil vektlegge vektoregenskapene til tilstandene. Vårt valg av basis for dette vektorrommet når vi bruker bølgefunksjonsbeskrivelsen er den såkalte **koordinatbasisen**, $x = \delta(x - y)$, en uendelig og kontinuerlig basis hvor bølgefunksjonen er gitt som

$$\Psi(x, t) = \langle x | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y) \Psi(y, t) dy. \quad (5.5)$$

Det finnes alternativer til denne basisen som vi ikke skal gå nærmere inn på i dette kurset: f.eks. den såkalte bevegelsesmengdebasisen eller energibasisen.

5.2 Operatorer

Postulat 2: Til enhver **observabel** Q svarer det en **Hermitisk operator** \hat{Q} .

La oss igjen komme med noen klargjørende kommentarer:

1. Slike operatorer er lineære, dvs. at de virker på følgende måte:

$$\hat{Q}(a|\psi_i\rangle + b|\psi_j\rangle) = a\hat{Q}|\psi_i\rangle + b\hat{Q}|\psi_j\rangle. \quad (5.6)$$

2. At operatorene er Hermitiske betyr at

$$\langle \psi_i | \hat{Q} \psi_i \rangle = \langle \hat{Q} \psi_i | \psi_i \rangle. \quad (5.7)$$

Merk at dette er ekvivalent med at

$$\langle \psi_i | \hat{Q} \psi_j \rangle = \langle \hat{Q} \psi_i | \psi_j \rangle. \quad (5.8)$$

3. De **kanoniske variable** x og p har operatorer $\hat{x} = x$ og $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Operatoren til en observabel $Q(x, p)$ er $Q(\hat{x}, \hat{p})$.
4. Operatorer er lineærtransformasjoner på vektorene (tilstandene), i en diskret basis kan de skrives som matriser.

Det erketypiske eksemplet på operatorer henter vi fra selve Schrödingerligningen i Postulat 1:

$$\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi, \quad (5.9)$$

som er en operatorligning hvor $\hat{H} = H(x, p) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ er Hamiltonoperatoren og $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ energioperatoren.

5.3 Målinger

Postulat 3: De eneste mulige resultatene av en måling av observabelen Q er **egenverdiene** q_n til operatoren \hat{Q} :

$$\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle, \quad (5.11)$$

hvor $|\psi_n\rangle$ er **egentilstandene**.

Her må man legge merke til følgende:

1. Umiddelbart etter en slik måling vil systemet befinne seg i tilstanden $|\psi_n\rangle$. Dette kalles gjerne litt upresist for *kollaps av bølgefunksjonen*.
2. Settet $\{q_n\}$ kalles operatorens **spektrum** og kan være endelig, diskret uendelig, eller kontinuerlig.
3. Hvis flere egentilstander har samme egenverdi er egenverdien **degenerert**. Antall tilstander med samme egenverdi kalles **degenerasjonsgraden**,
4. **Sannsynligheten** for å måle den n -te egenverdien for en superposisjon av tilstander $|\psi\rangle = \sum c_n|\psi_n\rangle$ er $|c_n|^2$, hvor c_n kan bestemmes ved hjelp av Fouriers triks:

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi \, dx. \quad (5.12)$$

For et kontinuerlig spektrum så er de tilsvarende relasjonene:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) |\psi(k)\rangle \, dk \quad (5.13)$$

og

$$\phi(k) = \langle \psi(k) | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(k) \psi \, dx, \quad (5.14)$$

hvor **sannsynlighetstettheten** er $|\phi(k)|^2$. Selv om vi over har brukt *notasjonen* for energiegenverdier for bundne tilstander (diskret spektrum) og bølgetall for spredningstilstander (kontinuerlig spektrum), så gjelder disse relasjonene generelt for alle spektra.

5. Operatorer som kommuterer, dvs. $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, har felles egenfunksjoner og kalles **kompatible observable**.
6. To operatorer \hat{A} og \hat{B} som ikke kommuterer kalles **inkompatible observable** og har en **uskarphetsrelasjon** for de observable:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} [\hat{A}, \hat{B}] \right)^2. \quad (5.15)$$

La oss se på operatorene for de kanoniske variable som et eksempel, og la tilstanden være fri-partikkel tilstanden $\psi(x) = e^{ikx}$. Da er

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx} = p\psi. \quad (5.16)$$

Altså ψ en egenfunksjon for bevegelsesmengde, med kontinuerlige egenverdier $p = \hbar k$. Vi har videre at

$$\hat{x}\psi = xe^{ikx}, \quad (5.17)$$

slik at ψ ikke er en egenfunksjon for posisjon. Dette er ingen overraskelse da \hat{x} og \hat{p} er inkompatible operatorer med $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Hadde de hatt felles egenfunksjoner ville disse brutt med uskarphetsrelasjonen (se under om skarpe verdier).

5.4 Forventningsverdier

Postulat 4: Et **ensemble** (samling) av systemer preparert i tilstanden $|\psi\rangle$ vil ha forventningsverdi (gjennomsnitt av mange målinger) for observabelen Q på:

$$\langle Q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q} \psi dx. \quad (5.19)$$

1. **Variansen** til Q defineres som

$$\sigma_Q^2 \equiv \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2. \quad (5.20)$$

2. Dersom $\sigma_Q = 0$ er størrelsen Q **skarpt bestemt** for tilstanden $|\psi\rangle$. Q er skarpt bestemt hvis og bare hvis $|\psi\rangle$ er en egentilstand til Q .

Stasjonære tilstander $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$, altså separable løsninger av SL, har skarpt bestemt energi fordi disse tilstandene er egentilstander til energiooperatoren (Hamiltonoperatoren):

$$\hat{H}\Psi(x, t) = \hat{E}\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right) = E\Psi(x, t) \quad (5.21)$$

Denne egenverdiligningen, $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, kalles den tidsuavhengige SL (TUSL).

5.5 Kompletthet

Postulat 5: Hvis \hat{Q} er en Hermitisk operator til en observabel Q og $\{|\psi_n\rangle\}$ er settet av alle egentilstander til \hat{Q} så er dette settet **komplett** (fullstendig), dvs. en vilkårlig tilstand $|\psi\rangle$ kan skrives

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle. \quad (5.23)$$

1. Summasjonstegnet må tolkes symbolsk. For et kontinuerlig spektrum erstattes det av en integrasjon over spektrumet (såkalt Dirac-kompletthet)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k) |\psi(k)\rangle dk. \quad (5.24)$$

2. For diskret egenverdier er settet av egentilstander **ortonormalt**

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm} \quad (5.25)$$

hvor

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{for } n = m \\ 0 & \text{for } n \neq m \end{cases}, \quad (5.26)$$

er det såkalte Kronecker deltaet, for kontinuerlige egeverdier er settet **Dirac-ortonormalt**, dvs.

$$\langle \psi(k) | \psi(k') \rangle = \delta(k - k'). \quad (5.27)$$

Kapittel 6

Spinn

Dette avsnittet sammenfatter forelesningene om elektronets egenspinn. Det erstatter dermed avsnitt 4.4 i Griffiths—som ligger på et mere abstrakt nivå—med en mere eksamensrettet oppsummering.

6.1 Stern–Gerlach eksperimentet (1922)

Eksperimentet var ment å teste Bohrs hypotese om at angulærmomentet L var kvantisert. Sølvatomer ble sendt gjennom en inhomogent magnetfelt. Sølv ble brukt fordi dette atomet har et ytre elektron som oppfører seg (er i en tilstand) som om det er i et slags hydrogenatom, med kjernen og de 46 andre elektronene innenfor som har en totalladning på $+e$. Forsøket ble senere gjentatt med hydrogenatomer i 1927.

Som vi så da vi løste Schrödingerligningen for sentralsymmetriske potensial i tre dimensjoner, følger det naturlig av formalismen at angulærmomentet må være kvantisert, med føringene

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad (6.1)$$

og

$$L_z = m\hbar, \quad (6.2)$$

der $l = 0, 1, \dots$, og $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Det en da kan spørre seg, er om denne kvantiseringen kan observeres direkte i et eksperiment, og det var akkurat det som var motivasjonen for Stern-Gerlach-eksperimentet. Ideen var at f.eks. et hydrogenatom må kunne tilordnes et magnetisk dipolmoment som er direkte relatert til elektronets angulærmoment, og dermed kvantisert. Siden en magnetisk dipol påvirkes av en kraft i et inhomogent magnetfelt, regnet man derfor med å observere en forskjellig grad av avbøyning, avhengig av verdien på L_z , når man sendte atomene gjennom et slikt felt. Vi kan allerede røpe at eksperimentet ikke oppførte seg helt som forventet, noe som skyldtes eksistensen av en til da ukjent fysisk størrelse: Elektronets **egenspinn** (som ofte bare kalles spinn). Oppdagelsen av dette kom altså som en uventet bi-effekt av eksperimentet.

La oss se på en enkel klassisk utledning som gir et uttrykk for det magnetiske dipolmomentet til en ladet partikkel med ladning q som går i en sirkelbevegelse i xy -planet, med periode T og hastighet $v = 2\pi r/T$, der r er sirkelens radius.

Dipolmomentet peker da langs z -aksen, med verdi

$$\mu = IA = \frac{q}{T}\pi r^2 = \frac{q}{2\pi r/v}\pi r^2 = \frac{qvr}{2} = \frac{q}{2m}L, \quad (6.3)$$

der $L = mvr$ er det klassiske angulærmomentet. I er her strømmen rundt z -aksen, og A er sirkelens areal. Selv om denne utledningen var rent klassisk, viser det seg at et helt analogt uttrykk er gyldig kvantemekanisk. Vi kan derfor skrive det magnetiske dipolmoment for et elektron i et hydrogenatom som

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}. \quad (6.4)$$

Den potensielle energien for en magnetisk dipol i et eksternt magnetfelt kan skrives som

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (6.5)$$

Er feltet inhomogent (dvs. har forskjellig styrke ulike steder i rommet), påvirkes dipolen av en kraft

$$\vec{F} = -\nabla U. \quad (6.6)$$

Før vi går videre med selve Stern-Gerlach-eksperimentet, skal vi se hvilken innvirkning ligning (6.5) har på hydrogenatomets energispektrum. Dette kalles den normale Zeeman-effekten.

6.2 Den normale Zeeman-effekt

Ligning (6.5) gir et uttrykk for den potensielle energien til en magnetisk dipol i et ytre B -felt. La oss her anta at dette feltet er konstant og rettet langs z -retningen. I vår kvantemekaniske formalisme får vi inn denne energien som et ekstra ledd i Hamiltonoperatoren:

$$\hat{H}_0 \rightarrow \hat{H}_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e}\hat{L} \cdot \vec{B} = \hat{H}_0 + \frac{eB_z}{2m_e}\hat{L}_z, \quad (6.7)$$

der $\hat{H}_0 = (-\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r)$ er Hamiltonoperatoren uten ytre magnetfelt. Hva er så egenfunksjonene til denne utvidede Hamiltonoperatoren? Svaret er enkelt—de samme som for \hat{H}_0 , dvs.

$$\psi_{nlm}(r, \phi, \theta) = R(r)Y_{lm}(\phi, \theta), \quad (6.8)$$

der $Y_{lm}(\phi, \theta)$ er de sfærisk harmoniske. Grunnen er at løsningene (6.8) bl.a. var egenfunksjoner for z -komponenten av angulærmomentet, L_z . Siden tilleggsleddet bare går som \hat{L}_z , “fungerer” disse egenfunksjonene fortsatt. Den teknisk korrekte måten å si dette på, er å se på kommutatorene. Husk: For at to operatører skal kunne ha felles egenfunksjoner, dvs være “kompatible” med hverandre, må de kommutere. For det opprinnelige problemet med hydrogenatomet uten ytre felt hadde vi

$$[\hat{H}_0, \hat{L}_z] = [\hat{H}_0, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0, \quad (6.9)$$

og vi fant felles egenfunksjoner for alle disse tre operatorene, (6.8). Det er lett å se at den utvidede Hamiltonoperatoren (6.7) fortsatt kommuterer med alle disse, men energi-egenverdiene vil selvsagt endre seg. De får et L_z -avhengig tillegg,

$$E_{nm} = -\frac{E_0}{n^2} + \frac{eB}{2m_e}m\hbar \quad (6.10)$$

der $E_0 = 13.6 \text{ eV}$.

Legg merke til det nye som har skjedd her: Tidligere var energien bare avhengig av kvantetallet n , og for en gitt n hadde derfor alle tilstander med de forskjellige tillatte verdiene på l og m samme energi. Vi viste på en tidligere forelesning at degenerasjonen til nivå n var $d(n) = n^2$. Det som har skjedd her, er at energien også avhenger av kvantetallet m : Det ytre magnetfeltet splitter opp degenerasjonen. F.eks. vil en p -tilstand, dvs. $l = 1$, nå splittes opp i tre, med tre forskjellige energier tilsvarende henholdsvis $m = -1$, $m = 0$ og $m = 1$. Tilsvarende forventer en også en oppsplitting av spektrallinjene for strålingsoverganger i det aktuelle atomet; f.eks. har vi nå tre litt forskjellige muligheter for overganger mellom $2p$ og $1s$, dvs. tre spektrallinjer i stedet for en.¹ I praksis viser det seg at oppsplittingen av spektrallinjene blir litt mer komplisert enn en skulle forvente utfra dette enkle bildet. Dette skyldes elektronets **egenspinn** som vi skal høre mer om straks.

6.3 Stern-Gerlach-eksperimentet og oppdagelsen av spinn

Ideen bak Stern-Gerlach-eksperimentet var som sagt å benytte seg av avbøyningen en magnetisk dipol opplever i et inhomogent magnetfelt for å skille de ulike m -tilstandene og observere kvantiseringen av angulærmoment. Antar vi at feltet er parallelt med z -aksen (dvs. $B_x = B_y = 0$) og at det er inhomogent bare i z -retningen (dvs. $\partial B_z / \partial x = \partial B_z / \partial y = 0$), blir kraften (6.6)

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\mu_x B_x + \mu_y B_y + \mu_z B_z) = -\frac{e}{2m_e} L_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \hat{z}, \quad (6.11)$$

der L_z tar verdiene $m\hbar$ og \hat{z} er enhetsvektoren langs z -aksen. Med andre ord,

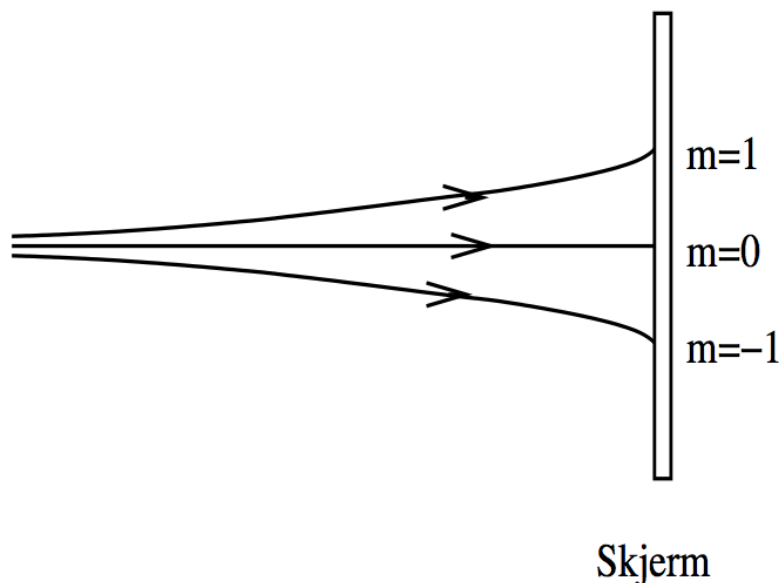
$$F_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} \frac{\partial B_z}{\partial z} m. \quad (6.12)$$

Vi ser her at kraften er proporsjonal med kvantetallet m . Anta nå at en stråle med atomer passerer gjennom et område med et slikt magnetfelt og treffer en skjerm bak, som antydnet på figur 6.1.

Figur 6.2 antyder hva slags fordeling av “treff” man ville forvente for henholdsvis klassiske partikler (ingen kvantisering av L , $L \neq 0$), en s -tilstand (bare $m = 0$ tillatt, dvs. en linje) og en p -tilstand (tre verdier på m , dvs. tre linjer). Tilsvarende $2l + 1$ linjer for høyere l . Bruker man hydrogenatomer i grunntilstanden i dette forsøket, vet vi at de befinner seg i $1s$ -tilstanden, og man skulle derfor få en linje. Men, som antydnet i figuren, *det en faktisk observerer er to linjer!* Hvor kommer nå denne oppsplittingen fra? Ikke bare er det for mange linjer, men det er også et like antall, så det passer ikke en gang inn i vårt mønster med $2l + 1$ stykker. Dere har sikkert gjetten det: Dette har å gjøre med en ny fysisk egenskap som kalles **(egen)spinn**:

Elektronet (og alle andre elementærpartikler) har et “innebygd” magnetisk dipolmoment og dermed et egenspinn. Denne egenskapen er

¹Generelt er det bare tillatt med overganger der endringen i m er 0 eller ± 1 . Disse **utvalgsreglene** skyldes at man må ta hensyn til bevaring av egenspinn i denne prosessen, inkludert spinn til det utsendte fotonet. Utledningen er ikke pensum i vårt kurs.



Figur 6.1: Skisse av Stern-Gerlach-eksperimentet. Atomene avbøyes når de kommer inn i området med inhomogent magnetfelt. Kraften de påvirkes av, avhenger av verdien på L_z .

uløselig knyttet til partikkelen, på samme måte som dens ladning eller masse.

Eksistensen av spinn kan ikke utledes fra ikke-relativistisk kvantemekanikk — vi må bare postulere den. Derimot dukker spinn opp på en naturlig måte i relativistisk kvantemekanikk. Formelt sett har spinn en rekke analogier til angulærmoment, men forskjellen er at egenspinnet er en ren kvantemekanisk effekt som ikke har noen analogi i klassisk mekanikk.

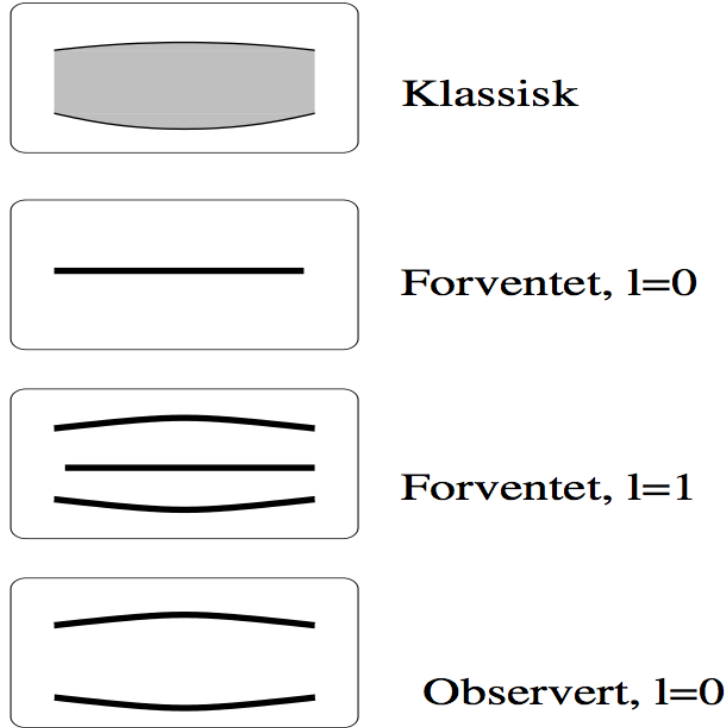
Som klassisk analogi for å forestille seg egenspinnet, brukes iblant en kuleformet partikkel som snurrer om sin egen akse. Men husk at dette er en dårlig analogi. Elektronet antas f.eks. å være punktformet (uten utstrekning), slik at hele konseptet blir meningsløst. Dessuten kan spinnet som sagt ikke “bremses ned” eller forandres på annen måte. Det er en fast fysisk egenskap som karakteriserer partikkelen.

6.4 Viktige fakta om spinn

Elektronets innebygde dipolmoment er gitt ved

$$\vec{\mu}_s = -g_e \frac{e}{2m_e} \vec{S}, \quad (6.13)$$

der konstanten g_e kalles elektronets **gyromagnetiske faktor** og er nesten nøyaktig lik 2. Dette ligner veldig på uttrykket vi hadde for angulærmoment, bortsett fra at g_e dukker opp. Det finnes som sagt ingen klassisk forklaring på denne forskjellen.



Figur 6.2: Skisse av forventet fordeling av treff på skjermen i Stern-Gerlach-eksperimentet. Øverst: Klassisk, ingen kvantisering av L . De to neste viser forventet resultat for henholdsvis $l = 0$ ($m = 0$) og $l = 1$ ($m = 1, 0, 1$). Den nederste boksen viser hva man faktisk observerte for $l = 0$.

For alle partikler med spinn har vi kvantiseringsbetingelsen

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar. \quad (6.14)$$

Igjen ligner dette veldig på uttrykket vi hadde for L . Generelt har de ulike elementærpartiklene enten heltallige eller halvtallige verdier på s . Spesielt har elektronet $s = 1/2$, dvs. $S = \sqrt{3}\hbar/2$. Vanlig (om enn litt sloppy) språkbruk er å si at “elektronet har spinn en halv”. Legg merke til at det er verdien på “ s ”, ikke “ S ”, en refererer til da. Et annet viktig eksempel er fotonet, som har “spinn en” dvs. $s = 1$ og $S = \sqrt{2}\hbar$.

I analogimed $L_z = m\hbar$ har vi at

$$S_z = m_s\hbar, \quad (6.15)$$

der m_s generelt løper fra $-s$ til s i heltallssteg: $m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$. For elektronet betyr dette

$$m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (6.16)$$

(For fotoner har vi at $m_s = -1, 0, 1$ siden fotonet har spinn 1.) Så her har vi fått inn et nytt kvantetall m_s som karakteriserer elektronets tilstand sammen med kvantetallene nlm .

Nå kan vi også forklare oppsplittingen av $l = 0$ -linjen i Stern-Gerlach-eksperimentet: Inkluderer vi spinn, har elektronet nå et totalt magnetisk moment

$$\vec{\mu}_{\text{tot}} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{e}{2m_e}(\vec{L} + g_e\vec{S}). \quad (6.17)$$

I avsnittet om Stern-Gerlach-eksperimentet diskuterte vi spesielt tilfellet $l = 0$, slik at den avbøyende kraften ikke fikk noe bidrag fra angulærmomentet. Derimot har vi nå et bidrag, i analogi med ligning (6.12),

$$F_z = -\frac{g_e e}{2m_e} \frac{\partial B_z}{\partial z} S_z = -\frac{g_e e \hbar}{2m_e} \frac{\partial B_z}{\partial z} m_s. \quad (6.18)$$

Siden m_s tar verdiene $\pm 1/2$, får vi to linjer!

Legg også merke til at degenerasjonen for hvert energinivå i hydrogenatomet, som vi tidligere sa var lik n^2 , blir dobbelt så stor, $d(n) = 2n^2$ hvis vi tar hensyn til elektronets spinn. For hver tillatte kombinasjon nlm har vi to muligheter for m_s .

6.5 Den anomale Zeemaneffekt (dvs. med spinn)

Bruker vi det totale magnetiske moment (6.17) i uttrykket (6.5) for den potensielle energien, blir denne

$$U = -\vec{\mu}_{\text{tot}} \cdot \vec{B} = \frac{eB}{2m_e}(L_z + g_e S_z) = \frac{eB\hbar}{2m_e}(m + g_e m_s). \quad (6.19)$$

Vi ser at oppsplittingen av nivåer i Zeeman-effekten er litt mer komplisert enn vi antok tidligere. For eksempel vil $1s$ -nivået splittes i to i et ytre magnetfelt pga. de to mulighetene for m_s , selv om altså $m = 0$.

6.6 Bølgefunksjon med spinn

Den bølgefunksjonen vi fikk ved å løse Schrödingerligningen i 3 dimensjoner, var karakterisert av tre kvantetall nlm . Siden vi nå har lært at vi i tillegg må ta hensyn til spinn (som *ikke* følger fra Schrödingerligningen men må postuleres i tillegg), har vi nå fått et fjerde kvantetall som må spesifiseres for å beskrive en tilstand i for eksempel hydrogenatomet: m_s (husk at s er en fast egenskap ved partikkelen, så den trenger vi ikke oppgi eksplisitt hver gang). En vanlig notasjon er å skrive

$$\psi_{nlmm_s} = \psi_{nlm}(r, \phi, \theta) \chi_{m_s}. \quad (6.20)$$

Første del omtaler vi som romdelen av bølgefunksjonen. Andre del er spinn-delen. De "romlige" operatorene (\hat{H} , \hat{p} , \hat{L} , ...) virker kun på romdelen, mens spinnoperatorene bare virker på spinndelen,

$$\hat{S}^2 \chi = s(s+1)\hbar^2 \chi \quad \text{og} \quad \hat{S}_z \chi = m_s \hbar \chi. \quad (6.21)$$

6.7 Spinn-bane-kobling

Til nå har vi snakket om elektronets angulærmoment \vec{L} og dets egenspin \vec{S} som to uavhengige størrelser. Det vi nå skal se er at disse to faktisk vekselvirker med

hverandre, noe som gir opphav til den såkalte **spinn-bane-koblingen**, også kalt LS-kobling. Denne fører til en korreksjon (oppsplitting) av atomets energinivåer, selv uten ytre magnetfelt til stede. Denne korreksjonen er imidlertid veldig liten.

En måte å anskueliggjøre koblingen mellom \vec{L} og \vec{S} er følgende halvklassiske resonnement:² Vi tenker oss en klassisk variant av hydrogenatomet der elektronet går i sirkelbane rundt kjernen med en angulærmoment L . Men sett fra elektronets ståsted er det *kjernen* som går rundt elektronet. Elektronet “opp-lever” altså kjernen som en sirkulær strømsløyfe som da setter opp et *internt magnetfelt*

$$B_z = \frac{\mu_0 I}{2r} \quad (6.22)$$

Bruker vi samme resonnement som i ligning (6.3), ser vi at strømmen kan uttrykkes som

$$I = \frac{e}{2\pi m_e r^2} L_z \quad (6.23)$$

slik at det interne magnetfeltet, indusert av kjernens bevegelse rundt elektronet, er gitt ved

$$\vec{B}_{\text{int}} = \frac{\mu_0 e}{4\pi m_e r^3} \vec{L}. \quad (6.24)$$

Igjen viser det seg at et tilsvarende uttrykk kan brukes kvantemekanisk, dvs. $\vec{B}_{\text{int}} \propto \vec{L}$. Dette *interne* magnetfeltet vekselvirker da med elektronets innebygde magnetiske dipol (spinnet), og ifølge (5) blir den potensielle energien

$$U_{LS} = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}_{\text{int}} = \alpha \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (6.25)$$

der α er en konstant. Dette fører som nevnt til en oppsplitting av energinivåene som gjerne omtales som “finstruktur”. Størrelsen på denne korreksjonen ligger imidlertid på promillenivå eller mindre, og vi skal ikke legge videre vekt på denne effekten i vårt kurs.

6.8 Addisjon av angulærmoment

Siden, som vi så i forrige avsnitt, \vec{L} og \vec{S} er koblet (vekselvirker med hverandre), er disse to størrelsene strengt tatt ikke bevart/kvantisert hver for seg. Det som derimot er kvantisert, er det totale angulærmoment, dvs. summen av dem,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (6.26)$$

Addisjon av angulærmoment følger helt bestemte kvantemekaniske regler. Det er viktig å merke seg at disse reglene er de samme enten vi legger sammen to spinn, to angulærmoment, eller et spinn og et angulærmoment. Det reglene sier noe om, er at det er begrensninger for hvilke “vinkler” (retninger) vi kan legge sammen de to vektorene i. En har følgende betingelser:

$$J = |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad j = |l-s|, |l-s|+1, \dots, l+s \quad (6.27)$$

og

$$J_z = \hbar m_j, \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j. \quad (6.28)$$

²Spinn-bane-koblingen er en relativistisk korreksjon og kan utledes formelt vha. relativistisk kvantemekanikk. Men dette er utenfor pensum i FYS2140.

Kvantiseringen av det totale angulærmoment J tar altså samme form som vi er vant til, men med visse begrensninger hva gjelder dets tillatte lengder, ligning (6.27).

Vi har her bare satt opp reglene for addisjon av angulærmoment, slik at dere har sett dem og kan bruke dem. En mer formell gjennomgang av dette overlates til videregående kurs.

6.9 Kombinasjoner av to spinn: Singlet- og triplet

Vi skal senere undersøke den kvantemekaniske oppførselen til systemer med mer enn en partikkel til stede; i den sammenhengen kommer vi til å oppdage at det er viktig å holde rede på symmetriegenskapene til systemets bølgefunksjon når en lar partiklene bytte plass. Med henblikk på dette vil vi her diskutere mulige kombinasjoner av to spinn- $1/2$ partikler. Hvis definisjonene her virker litt mystiske og umotiverte på så vend tilbake til dem etter at vi har gjennomgått to-partikkel-bølgefunksjoner. Da skjønner dere (forhåpentligvis) hensikten med det hele.

La meg først innføre en ny notasjon: Som dere vet, har en $s = 1/2$ partikkel to mulige spinntilstander, nemlig $m_s = \pm 1/2$. Disse to mulighetene kalles gjerne for henholdsvis “spinn opp” (symbol: \uparrow) og “spinn ned” (symbol: \downarrow). Har vi to spinn, finnes da følgende fire kombinasjoner:

$$\{\downarrow\downarrow\}, \{\downarrow\uparrow\}, \{\uparrow\downarrow\}, \{\uparrow\uparrow\} \quad (6.29)$$

der venstre pil symboliserer den første partikkelen, høyre pil den andre. Av årsaker som forhåpentligvis blir klare senere i kurset, ønsker vi å gruppere disse i symmetriske og antisymmetriske kombinasjoner. Med en symmetrisk kombinasjon mener vi at uttrykket forblir uforandret om vi lar de to pilene (partiklene) i hvert par bytte plass; en antisymmetrisk kombinasjon skifter fortegn når pilene (partiklene) bytter plass. Ser vi på kombinasjonene i (6.29), så legger vi merke til at den første og den siste allerede er symmetriske. De to midterste derimot er verken symmetriske eller antisymmetriske: Bytter vi om pilene, blir $\{\downarrow\uparrow\}$ til $\{\uparrow\downarrow\}$ og omvendt. Derimot er summen av disse to slik at ombytte av pilene gir tilbake samme uttrykk, så vi har følgende tre mulige symmetriske kombinasjoner:

$$\begin{aligned} &\{\downarrow\downarrow\} \\ &\{\downarrow\uparrow\} + \{\uparrow\downarrow\} \\ &\{\uparrow\uparrow\} \end{aligned} \quad (6.30)$$

Dette settet med symmetriske kombinasjoner av to spinn, (6.30), kalles gjerne for en **triplet**. På lignende måte kan vi lage oss en antisymmetrisk kombinasjon,

$$\{\downarrow\uparrow\} - \{\uparrow\downarrow\}. \quad (6.31)$$

Denne kalles **singlet**. Sjekk gjerne selv at ombytte av pilene i hvert av de to parentesene resulterer i samme uttrykk, men med motsatt fortegn. Dere mistenker kanskje at det finnes en sammenheng mellom det vi har gjort her, og addisjonsreglene i forrige avsnitt, og det gjør det: adderer vi to spinn- $1/2$ partikler, har vi ifølge ligning (6.27) to muligheter, $j = 0, 1$. Tripletten tilsvarer $j = 1$, dvs. de tre tilstandene er henholdsvis $m_j = -1, 0, 1$. Singletten tilsvarer $j = m_j = 0$.

Del III

ANVENDELSER

Kapittel 7

Molekyler

De fleste grunnstoffer (med unntak av edelgassene) deltar i formeringen av molekyler. Molekyler er sammensatt av enkeltatomer som holdes sammen av kjemiske bindinger. Det finnes flere forskjellige slags bindingsmekanismer, som vi skal si litt mer om i neste avsnitt. Det disse mekanismene har til felles, er imidlertid at det er elektrostatiske krefter som sørger for å holde atomene sammen.

Molekylers fysiske og kjemiske egenskaper er bestemt både av egenskapene til enkeltatomene som inngår og hvordan disse vekselvirker med hverandre i molekylet. En god måte å studere disse egenskapene på er spektroskopi. Dere husker fra atomteorien at man kunne observere tillatte overganger mellom elektrone-nes energinivåer ved hjelp av emittert eller absorbert elektromagnetisk stråling, og at et slikt strålingsspektrum var et slags fingeravtrykk for grunnstoffet. Det samme gjelder molekyler, men situasjonen blir litt mer sammensatt: I tillegg til slike elektronoverganger kan molekyler emitte/absorbere stråling ved overganger mellom andre slags energinivåer; molekyler kan nemlig rotere og vibrere, og som vi skal se, er både rotasjonsenergien og vibrasjonsenergien kvantisert. Emisjons- eller absorpsjonsspektra for molekyler er derfor mer kompliserte enn vi er vant til fra atomene, men de inneholder også mye mer informasjon. De kan blant annet fortelle om styrken til de kjemiske bindingene, og om geometrien i atomene, det vil si, hvordan atomene er plassert i forhold til hverandre. Vi begynner som sagt med en kort diskusjon av de vanligste bindingene som forekommer i og mellom molekyler. Deretter vil vi utlede uttrykkene for de kvantiserte rotasjons- og vibrasjonsenergiene, og se på hva slags strålingsoverganger en kan ha mellom disse. Til slutt blir det en liten diskusjon av de fysiske egenskapene en kan lese ut av slike molekylspektra.

7.1 Bindingsmekanismer

Vi begynner med bindinger internt i molekyler.

Kovalente bindinger

Den vanligste kjemiske bindingen kalles kovalent og består av at to atomer “deler” elektroner med hverandre. Ett standardeksempel er H_2 hvor de to elektronene fra H-atomene befinner seg i en felles såkalt molekyl-orbital der begge

er i en 1s-tilstand. De må da ha motsatt spinn, det vil si være i singlettilstanden, på grunn av Pauliprinsippet. Elektrontettheten er da størst mellom de to H-atomene. Andre eksempler på kjente molekyler som holdes sammen av kovalente bindinger er CH_4 , H_2O og CO_2 .

Ionebinding

I en kovalent binding mellom to ulike atomer vil elektrontettheten ikke fordele seg jevnt mellom atomene. Det er fordi de to kjernene trekker ulikt på elektronene. Den skjeve ladningsfordelingen gjør at molekylet blir *polart*: den ene siden har mer negativ ladning mens den andre har mer positiv ladning. I ekstremtilfeller vil det ene atomet i praksis gi fra seg sitt elektron til naboen slik at det blir et positivt ladet ion. Mottageren vil da bli et negativt ladet ion, og bindingen kalles en ionebinding. Det er en glidende overgang mellom polare kovalente bindinger og ionebindinger.

Et standardeksempel er vanlig bordsalt: NaCl. Natrium har elektronkonfigurasjon $1s^2 2s^2 2p^6 3s$, det vil si ett elektron i ytterste skall. Det vil derfor lett gi fra seg dette enslige valenselektronet. Ved å tilføre en energi på 5.14 eV ioniserer vi Na, og vi får Na^+ med fullt ytre skall, som edelgassene. På tilsvarende måte har klor elektronkonfigurasjon $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$, og mangler ett elektron for å få et komplett ytre skall; det avgir en energi på 3.61 eV når det tar opp et elektrone og danne en ionisert form, Cl^- . Vi kan regne litt på dette: bindingsenergien mellom Na^+ og Cl^- i NaCl er 7.9 eV, og skyldes potensialet fra Coulombtiltrekningen mellom ionene som har en avstand på $r = 2.81 \text{ \AA}$. Den totale energien som frigjøres ved å forme NaCl fra grunnstoffene er da $(7.9 - 5.14 + 3.61) \text{ eV} = 6.4 \text{ eV}$.

Metallbindinger

I metaller sitter de ytterste elektronene løst, det vil si at det kreves lite energi for å ionisere atomene, og atomene deler sine ytterste elektroner med hverandre. Dette gir en svakere binding enn kovalente og ionebindinger, men god elektrisk ledningsevne.

Vi skal så se på bindinger mellom molekyler:

Hydrogenbindinger

Når hydrogen inngår i en kovalent binding med for eksempel oksygen, fluor eller nitrogen, vil bindingen bli polar, elektrontettheten er størst nærmest det tunge atomet. Da får hydrogenatomet en liten positiv ladning og O, F eller N en tilsvarende negativ ladning. For eksempel i vann, H_2O , vil de litt positive H-atomene tiltrekkes av de litt negative O-atomene på nabomolekylene, og det dannes bindinger mellom molekylene. Dette gjør at vann har et relativt høyt kokepunkt fordi det trengs energi for å rive molekylene fra hverandre og danne damp. Det er også dette som gjør at vann har en høy overflatespenning. Hydrogenbindinger kan også oppstå mellom ulike deler av samme molekyl i store molekyler, da kan de bidra til å gjøre at molekylet folder seg på en bestemt måte. Det er for eksempel hydrogenbindinger som holder de to trådene i DNA sammen. Imidlertid er bindingsenergien i hydrogenbindinger ganske liten sammenlignet med for eksempel ionebindinger (av størrelsesorden 0.1 eV) og bindingen sårbar.

Van der Waals-bindinger

Andre atomer enn hydrogen kan også danne polare bindinger. Van der Waals-krefter er krefter basert på Coulombtiltrekning som virker mellom molekyler med dipolmoment, og gjør at de tiltrekkes av hverandre. Van der Waals-kreftene er ansvarlige for at gasser blir til væske og etter hvert til et fast stoff når temperaturen senkes. Egentlig kunne vi plassert hydrogenbindingene inn under van der Waals-krefter, men de er mye sterkere enn alle andre, så vi pleier å skille dem ut. Van der Waals-krefter kan virke mellom to molekyler med permanente dipolmoment, men et polart molekyl kan også indusere et dipolmoment i et ellers ikke-polart molekyl, hvilket igjen fører til en elektrostatisk tiltrekning. En tredje type van der Waals-krefter forekommer faktisk mellom ikke-polare molekyler. I dette tilfellet er det ladningsfluktuasjoner som gir opphav til effektive dipolmoment; vi går ikke nærmere inn på detaljene her.

7.2 Rotasjon og vibrasjon

Det er tre bidrag til et molekyls “indre” energi, dvs. den energien som assosieres med strålingsoverganger: Elektroniske, som de vi er vant til fra atomer, samt rotasjon og vibrasjon.¹ Førstnevnte er komplisert fordi hvert elektron vekselvirker med alle andre, samt med alle atomkjernene i molekylet. Vi går ikke inn på dette her. Derimot skal vi ta for oss de to andre, og vi begynner med rotasjon: Vi ser for enkelhets skyld på et diatomisk molekyl, f.eks. CO, se figur 7.1. Siden vi er interessert i ren rotasjonsenergi, ønsker vi å studere rotasjon rundt massesenteret (all annen rotasjon ville i tillegg inkludere translasjonsenergi). Vi starter med en klassisk utledning av rotasjonsenergien, uttrykt ved molekylets angulærmoment. Dette oversettes så til kvantemekanikk ved at angulærmomentet blir kvantisert på vanlig måte.

Vi ønsker altså å sette opp et klassisk uttrykk for den rotasjonskinetiske energien, uttrykt ved angulærmomentet L . Siden hastigheten til atom 1 er $v_1 = \omega r_1$, og tilsvarende $v_2 = \omega r_2$, blir angulærmomentet rundt z -aksen

$$L = m_1 v_1 r_1 + m_2 v_2 r_2 = (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega \equiv I \omega, \quad (7.1)$$

der I er treghetsmomentet rundt z -aksen. Dermed kan den kinetiske energien uttrykkes som

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}. \quad (7.2)$$

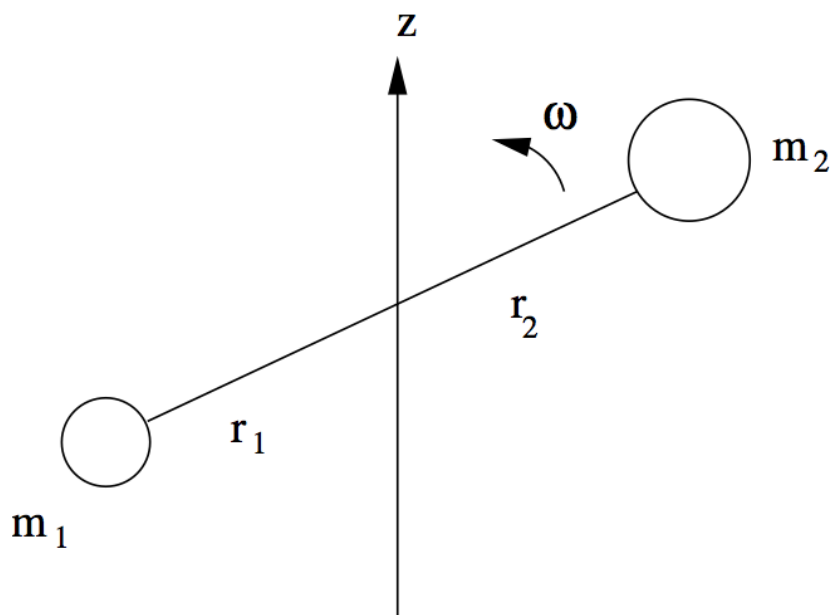
La oss også utlede et uttrykk for I_{CM} , dvs. treghetsmomentet rundt massesenteret (CM er en vanlig indeks og står for “Center of Mass”). Siden massesenteret er gitt ved at $m_1 r_1 = m_2 r_2$, kan avstanden mellom atomene, $R_0 = r_1 + r_2$, skrives som

$$R_0 = \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right) r_1 = \left(\frac{m_2}{m_1} + 1\right) r_2, \quad (7.3)$$

slik at treghetsmomentet blir

$$I_{\text{CM}} = m_1 \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right)^{-2} R_0^2 + m_2 \left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right)^{-2} R_0^2$$

¹I tillegg kommer massesenterbevegelse som ikke er relevant i denne sammenhengen.



Figur 7.1: Skisse av diatomisk molekyl som roterer rundt z -aksen med vinkel-frekvens ω .

$$\begin{aligned}
 &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} R_0^2 \\
 &\equiv \mu R_0^2,
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

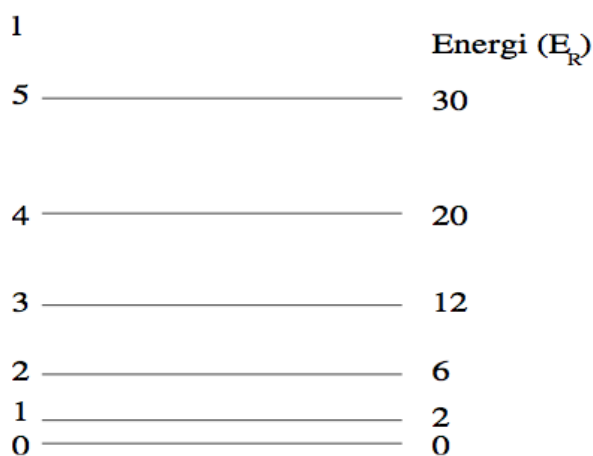
der μ er den reduserte massen.

Som tidligere viser det seg at ligning (7.2) kan oversettes til et tilsvarende kvantemekanisk uttrykk ved å erstatte det klassiske angulærmomentet med det kvantiserte, dvs. $L^2 = l(l+1)\hbar^2$. Vi får derfor følgende resultat for den kvantiserte rotasjonsenergien,

$$E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I_{\text{CM}}} l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \tag{7.6}$$

Ikke overraskende kalles l ofte *rotasjonskvantetallet*. Figur 7.2 viser en skisse av disse energinivåene.² Til slutt en kommentar om rotasjonsakser. Et diatomisk molekyl har *to* uavhengige rotasjonsakser, ikke tre, som man kanskje skulle tro: Tenker vi oss at molekylet i figur 7.1 ligger langs x -aksen, har vi to mulige rotasjonsmoder: Rotasjon rundt y -aksen og rundt z -aksen, men ikke rundt molekylets akse. Grunnen til dette er at treghetsmomentet rundt x -aksen er

²Energiniivåene vist her, gjelder for diatomiske molekyler der de to atomene er *forskjellige*, som CO. Er de to atomene identiske, som i f.eks. O₂, viser det seg at bare *like* verdier på l er tillatt, mens de odde faller ut av spektret. Begrunnelsen for dette ligger utenfor pensum i FYS2140.



Figur 7.2: Tillatte rotasjonsenergien for et diatomisk molekyl, i enheter av $E_R = \hbar^2/(2I_{CM})$.

forsvinnende lite, siden atomenes utstrekning er så liten. Man sier da ofte at molekylet har to rotasjonsfrihetsgrader. Telling av frihetsgrader spiller en viktig rolle i termodynamikken, så de av dere som skal ta FYS2160 vil komme bort i dette der.

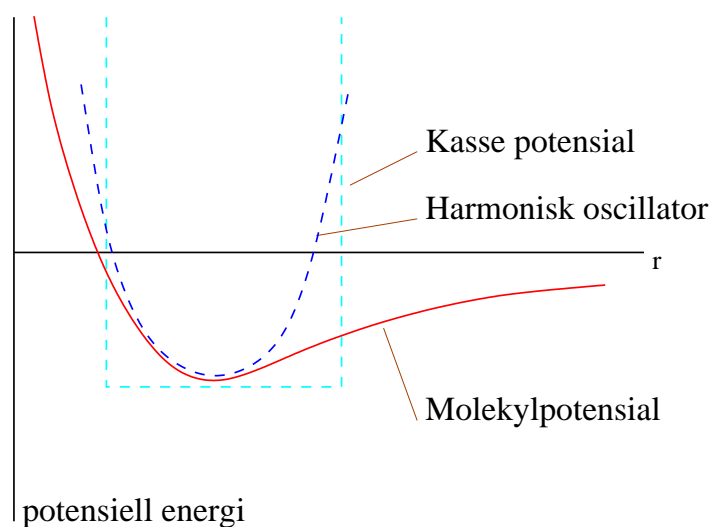
La oss nå se på vibrasjon. Figur 7.3 viser den typiske formen på det effektive potensialet mellom atomene i et diatomisk molekyl, dvs. den totale energien som funksjon av avstanden mellom atomkjernene. Vi ser at denne energien går mot uendelig for små avstander, dvs. at atomene opplever en sterk frastøtning når de kommer for nær hverandre. Dette skyldes at de to positivt ladde kjernene vil oppleve Coulombfrastøtning når de nærmer seg hverandre. Vi ser også at potensialet har et minimum, som svarer til likevektsavstanden R_0 . For r nær R_0 , kan $V(r)$ skrives som en Taylorutvikling,

$$V(r) = V(R_0) + V'(R_0)(r - R_0) + \frac{1}{2}V''(R_0)(r - R_0)^2 + \dots \quad (7.7)$$

Første ledd er bare en konstant, mens andre ledd er null fordi potensialet har et minimum i R_0 . For små $(r - R_0)$ kan potensialet derfor tilnærmes med en harmonisk oscillator med fjærkonstant $k = V''(R_0)$ —atomene oppfører seg som de var forbundet med en fjær, og de kan vibrere langs molekyllaksen. Ser vi bort fra konstantleddet, har vi altså et effektivt potensial

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2, \quad (7.8)$$

der $\rho = r - R_0$ er utslaget fra likevektsposisjonen, μ er den reduserte massen og $\omega = \sqrt{k/\mu}$. “Fjærkonstanten” k er et mål på molekylets stivhet dvs. bindingsstyrke. Fra gjennomgangen av den harmoniske oscillator tidligere i semesteret vet vi at de tilhørende energinivåene er kvantisert,



Figur 7.3: Skisse av effektivt potensial mellom atomene i et diatomisk molekyl.

$$E_{\text{vib}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.10)$$

der n gjerne kalles *vibrasjonskvantetallet*. Vi merker oss at grunntilstandsenergien (for $n = 0$) ikke er lik null. Dette er en kvantemekanisk effekt: Nullpunktsvibrasjoner er alltid til stede.

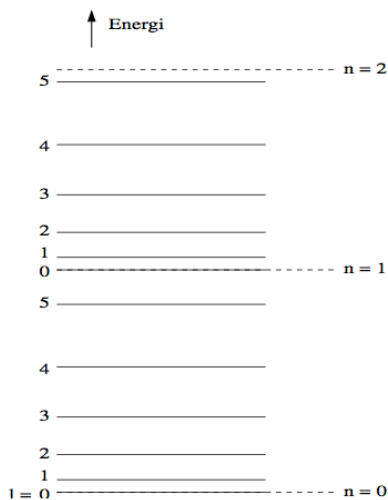
For å få et begrep om energiskalaen her, nevner jeg at $\hbar\omega$, dvs. energiforskjellen mellom to nabonivåer i oscillatorens spektrum, typisk er rundt 0.25 eV. Dette er mye større enn avstandene mellom de laveste rotasjonsnivåene i figur 7.2. Det skal altså mye mindre energi til for å eksitere rotasjonsmoden enn vibrasjonsmoden. Dette er også noe dere vil komme bort i dersom dere tar FYS2160.

7.3 Molekylspektra og strålingsoverganger

Det som gjenstår nå er å sette sammen rotasjons- og vibrasjonsspektrene og studere mulige strålingsoverganger mellom disse. Kombinerer vi (7.6) og (7.10), får vi det fulle *Rotasjons-vibrasjons-spektrum*,

$$E_{\text{rot-vib}} = \frac{\hbar^2}{2I_{\text{CM}}} l(l+1) + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad (7.12)$$

En skisse av dette spektret er vist i figur 7.4. Legg merke til energiskalene her: Det er plass til ganske mange (i denne skissen 6) rotasjonsnivåer mellom hvert



Figur 7.4: Skisse av rotasjons-vibrasjonsspektrum

par av vibrasjonsnivåer. Vi ser at grunntilstanden svarer til at både n og l er lik null. At ikke alle molekyler i naturen befinner seg i denne grunntilstanden, skyldes både temperatur (høy temperatur betyr høy kinetisk energi, og frihetsgradene kan eksiteres) og vekselvirkning med elektromagnetisk stråling (eksitasjoner ved absorpsjon av fotoner). Vi skal her konsentrere oss om strålingsoverganger, også kalt optiske overganger. Som i atomer kan en ha emisjon eller absorpsjon av fotoner med frekvens $\nu = |E_1 - E_2|/h$ der E_1 og E_2 er to energinivåer i spekteret. Men ikke alle overganger er tillatt. Begrensningene skyldes at spinn/angulærmoment må være bevart i prosessen, og det kan vises at tillatte strålingsoverganger må oppfylle

$$|l_1 - l_2| = 1 \quad \text{dvs.} \quad \Delta l = 1 \quad (7.13)$$

og *samtidig*

$$|n_1 - n_2| = 1 \quad \text{dvs.} \quad \Delta n = 1. \quad (7.14)$$

Vi ser da spesielt at det ikke er mulig å ha rene vibrasjonsoverganger eller rene rotasjonsoverganger — både vibrasjonskvantetallet og rotasjonskvantetallet må endres i overgangen.

For å få et konkret bilde av spektrallinjene i absorpsjonsspektret, ser vi nå på mulige overganger mellom de to laveste vibrasjonsnivåene, dvs. mellom $n = 0$ og $n = 1$, hvilket er tillatt ifølge (7.14). Ifølge regelen (7.13) må kvantetallet l enten øke med 1 eller avta med 1 i overgangen. Ser vi først på tilfellet $\Delta l = +1$ dvs. overgang fra en vilkårlig l til $l + 1$, blir energien til det absorberte fotonet

$$\begin{aligned} \Delta E &= \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2I_{\text{CM}}} [(l+2)(l+1) - l(l+1)] \\ &= \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2I_{\text{CM}}} \cdot 2(l+1), \end{aligned} \quad (7.15)$$

der $\hbar\omega$ er energigapet mellom vibrasjonsnivåene. I motsatt tilfelle, $\Delta l = -1$ dvs. overgang fra en vilkårlig l til $l - 1$, blir energien til det absorberte fotonet

$$\begin{aligned}\Delta E &= \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2I_{\text{CM}}} [(l-1)l - l(l+1)] \\ &= \hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2I_{\text{CM}}} \cdot 2l.\end{aligned}\quad (7.16)$$

Figur 7.5 illustrerer disse overgangene, sammen med en skisse av de tilsvarende spektrallinjene. Vi ser at vi får to sett med spektrallinjer, ett med fotonenergier litt over $\hbar\omega$, og ett litt under. Avstanden mellom spektrallinjene er konstant, \hbar^2/I_{CM} .

Det nyttige med absorpsjonsspektrene er at de kan brukes til å bestemme noen av molekylens fysiske egenskaper, f.eks.

- Siden den konstante energiavstanden mellom spektrallinjene f.eks. på oversiden av $\hbar\omega$ er \hbar^2/I_{CM} kan man, ved å lese av denne, bestemme molekylets treghetsmoment I_{CM} .
- Dersom man vet hvilket stoff det dreier seg om, dvs. kjenner massene til atomene i molekylet, kan man fra dette estimere avstanden R_0 mellom atomene, siden $I_{\text{CM}} = \mu R_0^2$ der μ er den reduserte massen.
- En kan også lese av verdien på $\hbar\omega$ som er midt imellom de to seriene av spektrallinjer (se fig.). Fra dette kan vi få informasjon om bindingsstyrken k til molekylet via $k = \mu\omega^2$.

Eksempler

- 1) Avstanden δE mellom to spektrallinjer for CO-molekylet er lik 4.76×10^{-4} eV. Finn molekylets treghetsmoment og avstanden R_0 (dvs. lengden på bindingen). **Svar:** Treghetsmomentet er $I_{\text{CM}} = \hbar^2/\delta E = 9.09 \times 10^{-28}$ eV s² = 1.46×10^{-46} kg m². Siden $I_{\text{CM}} = \mu R_0^2$, må vi beregne den reduserte massen. Den er

$$\mu = \frac{m_O m_C}{m_O + m_C} = \frac{(16u)(12u)}{(16+12)u} = 6.857u = 1.13 \times 10^{-26} \text{ kg} \quad (7.17)$$

der vi har brukt at den atomære masseenheden er $1u = 1.66 \times 10^{-27}$ kg. Finner da at bindingslengden er

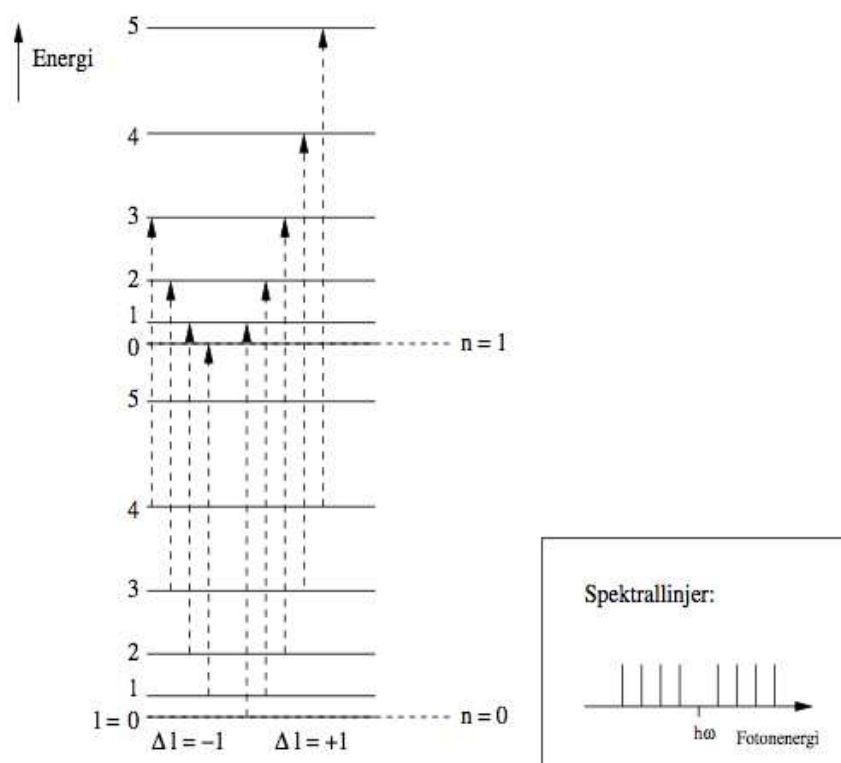
$$R_0 = \sqrt{\frac{I_{\text{CM}}}{\mu}} = 0.113 \text{ nm.} \quad (7.18)$$

Så bare ved å titte på spektrallinjene (og i det periodiske system), har vi klart å finne ut størrelsen på CO-atomet. Ikke verst, eller hva. . .

- 2) For CO finner vi, igjen fra absorpsjonsspektret, at gapet mellom vibrasjonsmodene er $\hbar\omega = 0.266$ eV. Hva er fjærkonstanten k for molekylets svingninger? **Svar:** $\omega = 0.266 \text{ eV}/\hbar = 4.03 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$. Får derfor

$$K = \mu\omega^2 = 1.86 \times 10^3 \text{ N/m,} \quad (7.19)$$

der vi har brukt verdien på μ fra forrige eksempel.



Figur 7.5: Noen mulige overganger mellom $n = 0$ og $n = 1$, samt en skisse av tilsvarende spektrallinjer.

Kapittel 8

NMR

Kjernemagnetisk resonans, eller Nuclear Magnetic Resonance (NMR)¹ på engelsk, er en metode som er mye brukt for å undersøke molekylstrukturen til stoffer og oppbyggingen av en gjenstand, f.eks. et menneske. Mest kjent er det kanskje som et utmerket “Röntgenapparat”, med svært detaljerte bilder av det indre av menneskekroppen. Prinsippet bak NMR bygger på det vi har lært om spinn i dette kurset.

Vi har tidligere sett at den potensielle energien til en dipol i et magnetfelt er gitt ved ligning (6.5). I vår diskusjon av spinn har vi også sett at elektroner har en “innebygd” dipol på grunn av sitt egenspin. Se kapittel 6, avsnitt 6.4. Dette gjelder selvsagt for alle partikler med egenspin, også for protoner og nøytroner i atomkjernen, som begge har spinn-1/2. La oss ta det aller enkleste eksemplet med hydrogenkjernen, som bare er et proton, og som det finnes svært mange av i kroppene våre, f.eks. i form av vann og organiske molekyler med C–H bindinger.

Med et sterkt konstant magnetfelt $\vec{B} = B_0 \hat{z}$ i z -retningen (vi står fritt til å velge akser) vil de to spinn-tilstandene til protonet med kvantetall $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ha en forskjell i energi avhengig av hvilken retning spinnet er orientert i forhold til magnetfeltet, med “+” eller mot “-”. Denne forskjellen er gitt ved dipolmomentene fra egenspinnet,²

$$\vec{\mu}_- = g_p \frac{e}{2m_p} \vec{S}_- \quad \text{og} \quad \vec{\mu}_+ = g_p \frac{e}{2m_p} \vec{S}_+, \quad (8.1)$$

hvor m_p er protonets masse og g_p dets gyromagnetiske faktor, satt inn i ligning (6.5)

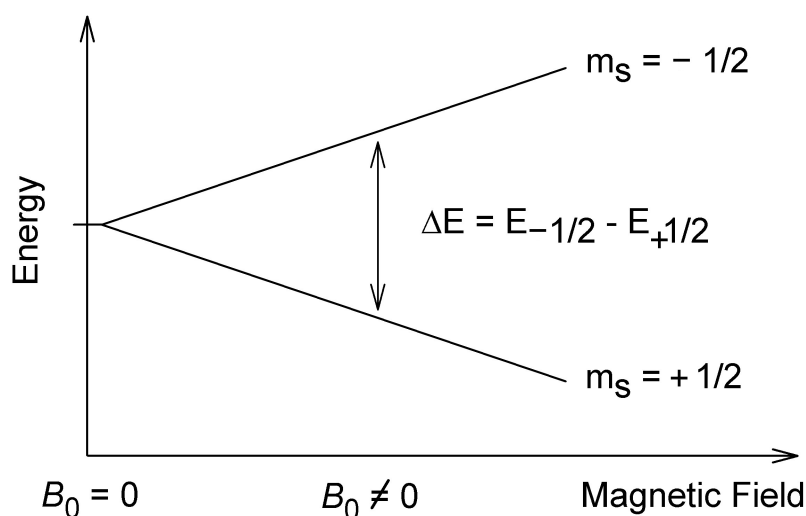
$$\Delta E = -\vec{\mu}_- \cdot \vec{B} - (-\vec{\mu}_+ \cdot \vec{B}) = \frac{g_p e}{2m_p} S_{+z} B_0 - \frac{g_p e}{2m_p} S_{-z} B_0 = \frac{g_p e \hbar}{2m_p} B_0 \quad (8.2)$$

Protoner med spinnet rettet mot magnetfeltet har altså høyest potensiell energi og splittingen er proporsjonal med styrken på magnetfeltet. Dette er illustrert i figur 8.1.

Denne energisplittingen er imidlertid liten av størrelse med de stabile magnetfelter vi kan produsere på jorden. Konstanten $\mu_N = e\hbar/2m_p$ er det såkalte

¹Sensitive sjeler har blitt skremt av ordet “Nuclear” i dette begrepet, og det refereres ofte til som MR i stedet.

²Merk at dipolmomentet har motsatt fortegn i forhold til elektronets (6.13) da protonets ladning har motsatt fortegn.



Figur 8.1: Energisplittingen mellom de to spinn-tilstandene til et proton i et eksternt magnetfelt B_0 . Tatt fra [1].

kjernemagnetonet med verdi $\mu_N = 3.152 \times 10^{-14}$ MeV/T. Med et realistisk magnetfelt på $B_0 = 1$ T (Tesla) og en gyromagnetisk faktor for protonet som er målt til $g_p = 2.793$ så får vi

$$\Delta E = g_p \mu_N B_0 = 2.793 \cdot 3.152 \times 10^{-14} \text{ MeV/T} \cdot 1 \text{ T} \simeq 8.646 \times 10^{-8} \text{ eV}. \quad (8.3)$$

Dette er en av hovedfordelene med NMR brukt til medisinsk avbildning av kroppen: energiene involvert er små i forhold til for eksempel Röntgenenergier på $10^4 - 10^6$ eV og i forhold til energien som skal til for å ødelegge molekylære bindinger, på rundt 1 eV.

Men hvordan kan man bruke denne splittingen til å ta bilder? Hvis vi setter på et sekundært, mye svakere, og oscillerende magnetfelt med vinkelfrekvens ω slik at $\omega = \Delta E/\hbar$, så har fotonene i dette feltet akkurat nok energi til å flippe spinn-retningen til protonet. Når det sekundære feltet så skrues av vil de eksiterte tilstandene eksponentielt fort falle tilbake til en likevekt med tilstandene med lavest energi. Samtidig sendes det ut stråling med samme frekvens ω , og denne strålingen måles. Dette er i utgangspunktet helt likt atomspektroskopien som er beskrevet tidligere.

Hvor fort spinnene faller tilbake til likevekt avhenger av vekselvirkninger mellom spinnene og mellom spinnene og omgivelsene. Gjennom disse vekselvirkningene går noe energi tapt til vibrasjons-, rotasjons- og translasjonsenergi, slik at likevekt mellom spinn-tilstandene oppnås fortere. En typisk tidskonstant (halveringstid) for denne prosessen er på 1000 ms, men avhenger sterkt av typen stoff protonene befinner seg i. Fra tiden det tar å oppnå likevekt, *relaksasjonstiden*, utledes det hva slags stoff man ser på.

Det konstante magnetfeltet i MR-maskinen har en gradient (varierer) over utstrekningen til det man skal studere, for eksempel en kropp, slik at eksitasjonsenergien er forskjellig fra sted til sted. Da kan også posisjonen til forskjellige stoffer utledes. Det sekundære feltet struktureres også som pulser fra forskjelli-

ge retninger og med forskjellig tidsintervaller. Etter avansert databehandling av signalene ved hjelp av Fouriertransformasjoner gjør alt dette at man kan skape et bilde av menneskekroppen med god oppløsning.

I tillegg til avbildning brukes NMR av kjemikere til strukturbestemmelse av kjemiske stoffer. Da benytter de seg av at protoner bundet i forskjellige molekyler har forskjellig effektivt dipolmoment, og derfor forskjellig eksitasjonsenergi. Dette skyldes at magnetfeltet som protonet ser til en viss grad blir utlignet av magnetfelt fra elektroner bundet i det samme molekylet, som igjen stammer fra deres egenspinn og angulærmoment, såkalt *kjemisk skift*. Dette argumentet har vi tidligere sett i avsnitt 6.7 om spinn-bane-kobling.

Kapittel 9

Elementærpartikler

Hva mener vi egentlig med en *elementærpartikkel*? En fundamental og udelelig partikkel, i den forstand at den ikke er sammensatt av andre partikler. Likevel, en massiv elementærpartikkel kan godt henfalle til lettere partikler, gitt at alle de bevaringslover vi kjenner er oppfylt. Vi kan selvsagt ikke vite med sikkerhet om noe faktisk er en elementærpartikkel. En gang i tiden har både atomer¹ og protoner/nøytroner vært sett på som udelelige, men undersøkelser har vist at de er sammensatt av enda mindre bestanddeler. Vi må derfor relativisere begrepet til vår nåværende forståelse av fysikken.

I dette kapittelet skal vi se litt på hvilke elementærpartikler som finnes og hva slags egenskaper de har, og så skal vi leke oss litt med den kvantemekanikken vi har lært for å beskrive noen av de fenomenene vi kan observere, slik som henfall av partikler (massive partikler omvandles spontant til lettere partikler) og det underlige fenomenet som kalles mesonoscillasjon, hvor partikler blir til anti-partikler og vise versa, alt i en svimlende fart.

9.1 Partikkelzoo

I den såkalte standardmodellen i partikkelfysikk regner vi med partiklene i figur 9.1 som elementærpartikler. Vi grupperer de kjente elementærpartiklene i materiepartikler (fiolett og grønt),² som alle er fermioner med $\text{spin}=\frac{1}{2}$, og kraftbærende partikler (rødt), som er bosoner med $\text{spin}=1$. For fermionene eksisterer det også anti-partikler med, så vidt vi vet, identiske egenskaper bortsett fra motsatt ladning(er).³

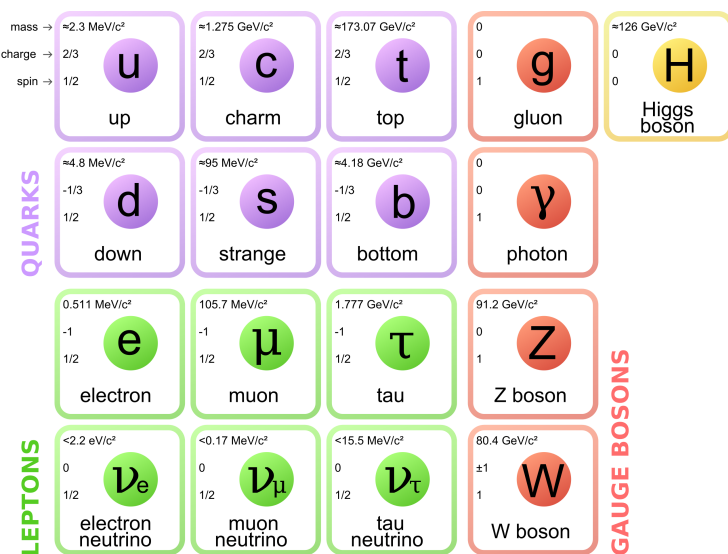
I tillegg til materiepartiklene og de kraftbærende partiklene forutsier standardmodellen også eksistensen av det såkalte Higgsbosonet, et $\text{spin}=0$ boson uten elektrisk ladning som er en konsekvens av Higgsmekanismen: opphavet til massen til elementærpartiklene i standardmodellen. Oppdagelsen av Higgspartikkelen ble annonser 4. juli 2012 ved Large Hadron Collider eksperimentet ved CERN [3, 4].

Selv om vi kjenner et stort antall elementærpartikler, er det bare et fåtall av

¹Fra gresk *atomos*, udelelig.

²Den siste av disse, toppkvarken, ble funnet ved Fermilab så sent som i 1995.

³Også nøytrinoene som ikke har elektrisk ladning har anti-partikler, da snakker vi om en mer abstrakt form for ladning.



Figur 9.1: Elementærpartikler i standardmodellen med tilhørende masse (med konvensjonen $c = 1$), elektrisk ladning i forhold til størrelsen på elektronets ladning e , og spinn. Merk at verdiene for massene er oppdatert 2012. For nøytrinoer kjenner vi bare en øvre grense for massene, men vi vet at minst to nøytrinoer har masse. Tatt fra [2].

disse som er virksomme ved de energier, eller temperaturer om du vil, vi lever ved. Dette betyr at kunnskap om mange av elementærpartiklene er kunnskap om universets bestanddeler ved svært høye energier, eller sagt på en annen måte: om tiden rett etter Big Bang. Det universet vi observerer i dag består for det meste av elektromagnetisk stråling, hydrogen og helium, ispedt noen tyngre grunnstoffer her og der, hvilket vil si at universet for det meste består av protoner, nøytroner, elektroner, fotoner og, kanskje litt mer overraskende, en helt utrolig mengde med nøytrinoer. Protonene og nøytronene er i sin tur bygd opp av kvarker, protonet av kombinasjonen uud og nøytronet udd .

I tillegg til disse velkjente komponentene vet vi i dag at det finnes mer materie som ikke har elektromagnetiske vekselvirkninger, og som derfor kalles *mørk materie*. Vi kan ikke observere dette stoffet direkte, men vi kjenner til dets gravitasjonspåvirkning på galakseskala, og vi vet at det ikke består av noe som finnes i standardmodellen. Det finnes altså flere elementærpartikler å jakte på!

9.2 Henfall

Vi har tidligere sagt at ikke-relativistisk kvantemekanikk med Schrödingerligningen (SL) ikke håndterer henfall eller produksjon av partikler. I det følgende skal vi gjøre en overraskende modifikasjon av Hamiltonoperatoren som likevel gjør oss i stand til å beskrive henfall ved hjelp av en bølgefunksjon. Prisen vi må betale er at Hamiltonoperatoren ikke lenger er operatoren til en obsevable.

Vi tar utgangspunkt i en partikkel med masse m i et gitt potensial V med

SL

$$\hat{H}_0 \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi, \quad (9.1)$$

hvor \hat{H}_0 er den vanlige Hamiltonoperatoren i en dimensjon:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (9.2)$$

Vi definer nå en ny Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{i\hbar}{2}\Gamma$, hvor Γ er et reelt tall slik at det vi adderer til Hamiltonoperatoren er et rent imaginært tall. Merk at dette ikke er en gyldig Hamiltonoperator i den forstand vi har snakket om slike operatører tidligere, den er f.eks. ikke *hermitisk*, men den resulterende bølgefunksjonen vil fortsatt vise seg å være nyttig.⁴

Vi vil nå, som vanlig, anta en separabel løsning av SL, $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$. Dette gir:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \\ \hat{H}_0\Psi &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2} \right) \Psi \\ \phi(t) \cdot \hat{H}_0\psi(x) &= \psi(x) \cdot i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2} \right) \phi(t) \\ \frac{1}{\psi(x)} \hat{H}_0\psi(x) &= \frac{i\hbar}{\phi(t)} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2} \right) \phi(t). \end{aligned} \quad (9.3)$$

De to sidene av likhetstegnet avhenger nå av to forskjellige uavhengige variable x og t , hvilket betyr at de begge må være konstante. Hvis ikke kunne vi endret bare den ene siden ved å endre på bare en av variablene. Vi kaller denne konstanten E_0 . Dette gir

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{i\hbar}{\phi(t)} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2} \right) \phi(t) \\ -\frac{i}{\hbar} E_0 \phi(t) &= \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2} \phi(t) \\ \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} &= \left(-\frac{i}{\hbar} E_0 - \frac{\Gamma}{2} \right) \phi(t), \end{aligned} \quad (9.4)$$

hvor denne første-ordens differensialligningen har løsningen

$$\phi(t) = A e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t - \frac{\Gamma}{2} t} = A e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} e^{-\frac{\Gamma}{2} t}. \quad (9.5)$$

Integrasjonskonstanten A kan vi absorbere inn i normaliseringen til rom-delen $\psi(x)$ av den separable bølgefunksjonen. Om vi nå antar at rom-delen er normalisert, så kan vi finne sannsynligheten for å observere partikkelen på et vilkårlig sted på x -aksen:

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 |\phi(t)|^2 dx$$

⁴Man kan se denne utvidelsen av hva vi kaller en Hamiltonoperator som et forsøk på å nærme seg en relativistisk kvantemekanikk, men den fulle beskrivelsen får man først gjennom den såkalte Dirac-ligningen som erstatter Schrödinger-ligningen.

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \cdot |e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} e^{-\frac{\Gamma}{2} t}|^2 \\
&= |e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t}|^2 |e^{-\frac{\Gamma}{2} t}|^2 = e^{-\Gamma t}.
\end{aligned} \tag{9.6}$$

Sannsynligheten for å finne partikkelen er altså ikke lenger bevart, den minker med tiden og partikkelen kan forsvinne (henfalle til andre lettere partikler). Vår bølgebeskrivelse reproducerer et eksponentielt henfall, slik som vi finner ved radiaktiv stråling, med en sannsynlighet for at partikkelen fortsatt finnes ved en tid t på $P(t) = e^{-t/\tau}$, hvor *levetiden* τ er gitt ved

$$\tau = \frac{1}{\Gamma}. \tag{9.7}$$

En alternativ formulering av utledningen over for eksponentielt henfall er å tillate komplekse egenverdier for energien til en ordinær Hamiltonoperator.

Denne løsningen av SL har også andre interessante egenskaper. Vi kan nemlig vise at tids-delen i bølgefunksjonen gitt i (9.5) kan skrives som et integral over tids-delen $\phi_{H_0}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$ i løsninger av den originale SL med \hat{H}_0 som Hamiltonoperator og E som energi:

$$\phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} e^{-\frac{\Gamma}{2} t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - E_0 + \frac{i\hbar}{2}\Gamma} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dE. \tag{9.8}$$

Dette ser vi enklest ved å gjøre en omskrivning

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - E_0 + \frac{i\hbar}{2}\Gamma} e^{-\frac{i}{\hbar} (E - E_0) t} dE &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i}{\hbar x + \frac{i\hbar}{2}\Gamma} e^{-ixt} \hbar dx \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i}{x + \frac{i}{2}\Gamma} e^{-ixt} dx \\
&= e^{-\frac{\Gamma}{2} t},
\end{aligned} \tag{9.9}$$

hvor vi har brukt variabelbyttet $x = (E - E_0)/\hbar$, og hvor den siste likheten er en Fouriertransformasjon, se f.eks. Rottmann.

Fysisk betyr det at en partikkel som henfaller har en fordeling av energier, hvor sannsynligheten for å måle en bestemt energi svarer til absolutverdikvadratet av faktoren før eksponentialfunksjonen i integralet (9.8). Selv egentilstander av \hat{H} har ikke lenger skarp energi når vi manipulerer Hamiltonfunksjonen på denne måten. For en partikkel i ro er energien gitt ved hvilemassen. Det betyr at massen m også har en sannsynlighetsfordeling rundt en sentralverdi m_0 . Vi skal ikke vise det her, men den kan finnes fra (9.8), og er gitt ved den såkalte *ikke-relativistiske Breit-Wigner fordelingen*:

$$P(m) = \frac{\hbar\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(m - m_0)^2 + \left(\frac{\hbar\Gamma}{2}\right)^2}. \tag{9.10}$$

Størrelsen $\hbar\Gamma$ kalles ofte *bredden* til en partikkel som kan henfalle, og angir da en iboende spredning av de målte massene som ikke skyldes imperfeksjoner i den eksperimentelle rekonstruksjonen av partikkelen. For eksempel er massen til Z -bosonet målt til å være $m_Z = 91.1876 \pm 0.0021 \text{ GeV}/c^2$, mens bredden er målt til $2.4952 \pm 0.0023 \text{ GeV}/c^2$ [5].

9.3 Oscillasjon av nøytrale mesoner

På grunn av egenskaper ved den sterke kjernekraften kan kvarker ikke opptre alene i naturen. Vi finner de i kombinasjoner av tre kvarker, såkalte *baryoner*, slik som protonet og nøytronet, og i kombinasjoner av en kvark og en anti-kvark, såkalte *mesoner*. Fire av disse mesonene, som utgjør alle de mulige ladningsnøytrale kombinasjonene av to forskjellige typer kvarker, har en meget spesiell egenskap: de oscillerer meget hurtig mellom en partikkel- og en anti-partikkeltilstand. De fire er $K^0 (d\bar{s})$, $D^0 (c\bar{u})$, $B_d^0 (b\bar{d})$ og $B_s^0 (b\bar{s})$, hvor vi har angitt kvarkinnholdet i parentes (anti-kvarker skrives med et strek eller "bar" på toppen). Disse oscillerer da frem og tilbake til anti-mesonene $\bar{K}^0 (\bar{d}s)$, $\bar{D}^0 (\bar{c}u)$, $\bar{B}_d^0 (\bar{b}d)$ og $\bar{B}_s^0 (\bar{b}s)$.

Disse oscillasjonene har fått mye oppmerksomhet fordi det ved observasjon av denne prosessen er mulig å bestemme graden av såkalt CP-brudd. CP er en (brutt) symmetri som sier at om vi i en prosess bytter ut partikler med anti-partikler (C), og speilvender koordinatsystemet vårt (P), så skal vi få samme sannsynlighet for at prosessen skal skje. Dette bruddet på CP-symmetrien som mesonene utviser er en av ingrediensene vi vet må finnes i enhver forklaring på hvorfor det finnes mer materie enn anti-materie i universet. De beregninger som er gjort avslører for lite CP-brudd i standardmodellen, det spekuleres derfor i at det finnes utvidelser av standardmodellen som gir mer CP-brudd, noe som også burde kunne påvises i målinger av CP-brudd for de oscillerende nøytrale mesonene.

Med denne motivasjonen i hende skal vi nå beskrive fenomenet ved hjelp av SL

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi, \quad (9.11)$$

hvor vi istedet for bølgefunksjonen innfører en bølgefunksjonsvektor

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} K^0(t) \\ \bar{K}^0(t) \end{pmatrix}, \quad (9.12)$$

hvor komponentene angir bølgefunksjonen for K^0 og \bar{K}^0 partiklene i oscillasjonen mellom de to tilstandene.⁵ For å beskrive både oscillasjonen og henfallet av mesonene antar vi en Hamiltonoperator på formen

$$\hat{H} = M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma, \quad (9.13)$$

hvor M og Γ er *hermitiske* 2×2 -matriser,⁶ altså

$$M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12}^* & M_{22} \end{bmatrix} \quad \text{og} \quad \Gamma = \begin{bmatrix} \Gamma_{11} & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{12}^* & \Gamma_{22} \end{bmatrix}, \quad (9.14)$$

hvor de diagonale elementene M_{11} , M_{22} , Γ_{11} og Γ_{22} er reelle tall og de ikke-diagonale elementene generelt kan være komplekse. At matrisene må være hermitiske har en ikke-triviell sammenheng med at vi tidligere krevde av operatorer som skulle tilsvare observable at de måtte være hermitiske. Det viser seg at

⁵Vi kunne selvsagt valgt en av de andre oscillerende mesonene som eksempel, men historisk ble K^0 -oscillasjon oppdaget først.

⁶Vi minner om at en hermitisk matrise A er en matrise hvor $A^\dagger = (A^T)^* = A$, altså en matrise som er uendret etter transponering og komplekskonjugering av alle elementene.

hermitiske Hamiltonoperatorer som kan skrive som matriser, kan skrives som hermitiske matriser.

Fra diskusjonen rundt ustabile partikler kan vi kanskje mistenke at Γ -matrisen er ansvarlig for henfall, og det er tilfelle, med $\Gamma = 0$ vil vi kun få oscillerende mesoner, som ikke henfaller. Matrisen M henger, som forventet for en Hamilton-operator, sammen med energien til partiklen. Vi vil arbeide i et hvilesystem hvor den ligger i ro. Energien er altså hvileenergien, som forklarer symbolbruken.

I tillegg til kravet om at \hat{H} må være hermitisk så vil vi innføre to andre krav til \hat{H} . Først det såkalte CPT-kravet, nemlig at diagonalelementene er like,

$$M_{11} = M_{22} = M \quad \text{og} \quad \Gamma_{11} = \Gamma_{22} = \Gamma. \quad (9.15)$$

M og Γ må her ikke forveksles med matrisene, de er bare reelle tall og en tradisjonell, men forvirrende, konvensjon i notasjon. CPT-symmetrien er en utvidelse av CP-symmetrien hvor retningen på tiden snus (T). Det at alle prosesser skal være identiske om du bytter partikler og anti-partikler, speilvender koordinatsystemet og snur tidsretningen har blant fysikere mye av den samme statusen som energibevarelse og bevarelse av bevegelsesmengde har.⁷ Vårt krav til matrisene innebærer at CPT-symmetrien automatisk bevares.

Den andre tilleggskravet vil vi gjøre her, for å forenkle den kommende regningen, er å kreve at CP-symmetrien er bevart. Dette gjøres ved å kreve at M_{12} og Γ_{12} er reelle tall. Det kan virke litt underlig å gjøre dette til et krav, når poenget var å undersøke CP-brudd. Da bør vi tenke på at eventuelle avvik fra den modellen vi nå skal lage, nettopp kan tolkes som mulige CP-brudd, og kan brukes til å kvantisere størrelsen på CP-brudd i naturen.

Tilsammen så gir våre krav følgende Hamiltonoperator skrevet som en matrise:

$$H = \begin{bmatrix} M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma & M_{12} - \frac{i\hbar}{2}\Gamma_{12} \\ M_{12} + \frac{i\hbar}{2}\Gamma_{12} & M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma \end{bmatrix}. \quad (9.16)$$

Vi kan med en gang skrive ned de stasjonære tilstandene som er løsningen av SL:

$$\psi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_n t} \psi_n(0), \quad (9.17)$$

hvor λ_n er egenverdiene til Hamiltonoperatoren⁸

$$H\psi_n(0) = \lambda_n\psi_n(0), \quad (9.18)$$

og $\psi_n(0)$ er de tilhørende egentilstandene.

Fordi (9.18) er en egenverdiligning for en matrise, så finner vi egenverdiene ved hjelp av standardteknikker fra lineæralgebra. Ligningen kan skrives som $(H - \lambda I)\psi_n(0) = 0$, og vi finner den tilhørende karakteristiske ligningen ved å kreve at determinanten til $H - \lambda I$ er null:

$$\begin{aligned} & \det(H - \lambda I) \\ &= \begin{vmatrix} M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma - \lambda & M_{12} - \frac{i\hbar}{2}\Gamma_{12} \\ M_{12} + \frac{i\hbar}{2}\Gamma_{12} & M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma - \lambda \end{vmatrix} \end{aligned}$$

⁷Til å begynne med virker kanskje all denne byttingen å være litt som avansert voodoo for viderekomne, den har likevel en dypereleggende årsak som finnes i Lorentzinvarians, altså det at Einsteins spesielle relativitetsteori skal gjelde.

⁸Merk at vi her unngår å kalle disse egenverdiene for E_n som vi vanligvis har gjort i dette kurset. På grunn av muligheten for henfall er ikke egenverdien et reelt tall.

$$\begin{aligned}
&= \left(M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma - \lambda \right) \left(M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma - \lambda \right) \\
&\quad - \left(M_{12} + \frac{i\hbar}{2}\Gamma_{12} \right) \left(M_{12} - \frac{i\hbar}{2}\Gamma_{12} \right) \\
&= \lambda^2 - 2\lambda \left(M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma \right) + \left(M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma \right)^2 - \left(M_{12}^2 - \frac{\hbar^2}{4}\Gamma_{12}^2 \right), \quad (9.19)
\end{aligned}$$

som gir en kvadratisk ligning, det $(H - \lambda I) = 0$, med to løsninger for egenverdien

$$\lambda_{1,2} = M - \frac{i\hbar}{2}\Gamma \pm \left(M_{12} - \frac{i\hbar}{2}\Gamma_{12} \right) = M \pm M_{12} - \frac{i\hbar}{2}(\Gamma \pm \Gamma_{12}). \quad (9.20)$$

De tilhørende egenvektorene (egentilstandene) kan skrives som

$$\psi_1(0) \equiv K_1^0(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} K^0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{K}^0 \end{pmatrix} \right], \quad (9.21)$$

$$= K_2^0(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} K^0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{\psi}_2(0) \equiv K^0 \end{pmatrix} \right]. \quad (9.22)$$

I litteraturen kalles ofte K_1^0 for K_L ("K-long") og K_2^0 for K_S ("K-short"). Vi har altså to stasjonære tilstander for vår Schrödingerligning

$$\psi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_n t} K_n^0(0), \quad (9.23)$$

hvor $n = 1, 2$.

Vi har løst Schrödingerligningen for vår modell av K -meson oscillasjon. For å se det fysiske innholdet i løsningen så kan vi anta at vi begynner med et K^0 -meson ved tiden $t = 0$. Starttilstanden kan da skrives som den følgende summen av de to egentilstandene

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (K_1^0 + K_2^0) = \begin{pmatrix} K^0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.24)$$

Ved hjelp av de stasjonære tilstandene kan vi skrive ned tidsutviklingen til starttilstanden:

$$\begin{aligned}
\psi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_1 t} K_1^0 + e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_2 t} K_2^0 \right) \\
&= \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_1 t} + e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_2 t} \right) \begin{pmatrix} K^0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&\quad + \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_1 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_2 t} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ K^0 \end{pmatrix} \quad (9.25)
\end{aligned}$$

Sannsynligheten $P_{K^0}(t)$ for å finne et K^0 -meson, og ikke \bar{K}^0 , ved en målingen ved tiden t er da som vanlig gitt ved absoluttverdikvadratet av den numeriske faktoren før tilstanden $(K^0, 0)$. Vi regner ut absoluttverdikvadratet:

$$\begin{aligned}
&P_{K^0}(t) \\
&= \frac{1}{4} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_1 t} + e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_2 t} \right) \left(e^{\frac{i}{\hbar}\lambda_1^* t} + e^{\frac{i}{\hbar}\lambda_2^* t} \right) \\
&= \frac{1}{4} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(\lambda_1 - \lambda_1^*)t} + e^{-\frac{i}{\hbar}(\lambda_2 - \lambda_1^*)t} + e^{-\frac{i}{\hbar}(\lambda_1 - \lambda_2^*)t} + e^{-\frac{i}{\hbar}(\lambda_2 - \lambda_2^*)t} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4} \left(e^{-(\Gamma+\Gamma_{12})t} + e^{\frac{i}{\hbar}(2M_{12})t} e^{-\Gamma t} + e^{-\frac{i}{\hbar}(2M_{12})t} e^{-\Gamma t} + e^{-(\Gamma-\Gamma_{12})t} \right) \\
&= \frac{1}{4} \left[e^{-(\Gamma+\Gamma_{12})t} + e^{-(\Gamma-\Gamma_{12})t} + e^{-\Gamma t} \left(e^{\frac{i}{\hbar}(2M_{12})t} + e^{-\frac{i}{\hbar}(2M_{12})t} \right) \right] \\
&= \frac{1}{4} \left[e^{-(\Gamma+\Gamma_{12})t} + e^{-(\Gamma-\Gamma_{12})t} + 2e^{-\Gamma t} \cos \left(\frac{2M_{12}}{\hbar} t \right) \right], \tag{9.26}
\end{aligned}$$

hvor vi har brukt at

$$\lambda_1 - \lambda_1^* = -\frac{i\hbar}{2}(\Gamma + \Gamma_{12}) - \frac{i\hbar}{2}(\Gamma + \Gamma_{12}) = -i\hbar(\Gamma + \Gamma_{12}), \tag{9.27}$$

$$\lambda_2 - \lambda_2^* = -\frac{i\hbar}{2}(\Gamma - \Gamma_{12}) - \frac{i\hbar}{2}(\Gamma - \Gamma_{12}) = -i\hbar(\Gamma - \Gamma_{12}), \tag{9.28}$$

$$\begin{aligned}
\lambda_2 - \lambda_1^* &= M - M_{12} - \frac{i\hbar}{2}(\Gamma - \Gamma_{12}) - \left(M + M_{12} + \frac{i\hbar}{2}(\Gamma + \Gamma_{12}) \right) \\
&= -2M_{12} - i\hbar\Gamma, \tag{9.29}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lambda_1 - \lambda_2^* &= M + M_{12} - \frac{i\hbar}{2}(\Gamma + \Gamma_{12}) - \left(M - M_{12} + \frac{i\hbar}{2}(\Gamma - \Gamma_{12}) \right) \\
&= 2M_{12} - i\hbar\Gamma. \tag{9.30}
\end{aligned}$$

Ekspontentialkomponentene i (9.26) beskriver henfallet av partikkelen ved at bølgefunksjonen blir mindre med tiden, mens cosinusfunksjonen gir oscillasjon mellom K^0 og \bar{K}^0 . Tiden for en full oscillasjon er

$$T_{\text{osc.}} = \frac{2\pi\hbar}{\Delta M}, \tag{9.31}$$

hvor størrelsen $\Delta M = 2M_{12}$ er forskjellen i masse mellom egentilstandene.

Oscillasjonstiden er målt eksperimentelt til å være $T_{\text{osc.}} = 1.16 \text{ ns}$. Dette kan sammenlignes med den gjennomsnittelige levetiden som for K_S er $\tau_{K_S} = 8.95 \times 10^{-2} \text{ ns}$, og for K_L , $\tau_{K_S} = 51.1 \text{ ns}$.⁹ De fleste K -mesonen vil altså henfalle før de oscillerer, men noen klare kunststykket. For de andre nøytrale mesonene er gjerne oscillasjonstiden av samme størrelsesorden som levetiden, eller mindre. Vi kan bruke en målt oscillasjonstid til å bestemme masseforskjellen mellom K_S og K_L .¹⁰

$$\Delta M = \frac{2\pi\hbar}{T_{\text{osc.}}} = \frac{2\pi\hbar c}{T_{\text{osc.}} c} = \frac{2\pi \cdot 193.7 \text{ MeV fm}}{1.16 \text{ ns} \cdot 3.00 \times 10^{14} \text{ fm/ns}} = 3.50 \times 10^{-12} \text{ MeV}, \tag{9.32}$$

en svært liten del av massen til et K -meson, som er målt til $m_K = 497.614 \text{ MeV}$.

Tilslutt skal vi nevne at også nøytrinoer oscillerer, men da mellom de tre typene — vi sier ofte generasjonene — nøytrinoer: elektronnøytrino ν_e , myonnøytrino ν_μ og taunøytrino ν_τ . Dette kan beskrives med det samme kvantemekaniske maskineriet, men siden nøytrinoene, så vidt vi vet, ikke henfaller, er matrisen $\Gamma = 0$. Da nøytrinoene er relativistiske må vi i tillegg bruke en relativistisk kvantemekanikk som vi ikke har vært inne på i dette kurset. Det viser seg at i det tilfellet blir sannsynligheten for oscillasjon mellom to nøytrinoer med masse m_1 og m_2 på formen

$$P(t) \propto \cos \left(\frac{m_1^2 - m_2^2}{2\hbar E} t \right). \tag{9.33}$$

⁹Derav navnene “K-short” og “K-long”.

¹⁰Egentlig er M hvileenergi og ikke masse, derfor bruker vi enheten MeV i svaret.

Dette er målt, blant annet som et underskudd av elektronnøytrinoer fra de kjerneprosessene vi vet foregår i sola. Dette underskuddet har gjort oss i stand til å si at massforskjellen mellom to av nøytrinoene er $\Delta m^2 = m_1^2 - m_2^2 \sim 5 \times 10^{-5} \text{ eV}^2$. Konklusjonen er at minst to nøytrinoer har masse, da vi har målt to slike oscillasjoner som innvolverer forskjellige nøytrinoer.

Bibliografi

- [1] http://en.wikipedia.org/wiki/File:NMR_splitting.gif
- [2] http://en.wikipedia.org/wiki/File:Standard_Model_of_Elementary_Particles.svg
- [3] G. Aad *et al.* [ATLAS Collaboration], Phys. Lett. B **716** (2012) 1 [arXiv:1207.7214 [hep-ex]].
- [4] S. Chatrchyan *et al.* [CMS Collaboration], Phys. Lett. B **716** (2012) 30 [arXiv:1207.7235 [hep-ex]].
- [5] J. Beringer *et al.* [Particle Data Group Collaboration], Phys. Rev. D **86** (2012) 010001.