
Kompendium i FYS2140

Kvantefysikk

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

Forord

Kursets struktur

Dette første kurset i kvantefysikk 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 det vi kaller klassisk fysikk — i all hovedsak Newtons lover, Maxwells ligninger for elektromagnetisme, og termodynamikk — ikke kunne beskrive resultater fra flere nye eksperimenter. Denne utviklingen førte fram til den nye kvanteteorien rundt 1925. De nye begrepene som ble innført med kvantefysikken var blant annet *materieegenskapen til lys*, *bølgeegenskapene til materien* og *kvantiseringen* av fysiske størrelser som for eksempel energi og angulærmoment (også kjent for mange som banespinn, eller bare spinn). Forelesningene i denne delen dekkes av disse forelesningsnotatene.
- **Andre del** er en introduksjon til kvantemekanikk, det matematiske språket som brukes i kvantefysikk. Her løser vi den såkalte Schrödingerligningen for enkle systemer. Denne delen avsluttes med en kvantemekanisk beskrivelse av hydrogenatomet. I denne delen følger vi læreboken, “*Introduction to Quantum Mechanics*” av David J. Griffiths. For kapittelet om kvantemekanikkens formalisme (kapittel 3), og avsnitt 4.4 om spinn, så har vi inkludert en forenklet oppsummering i dette kompendiet som dekker læringsmålene.
- **Tredje og siste del** undervises resten av semesteret. Her tar vi for oss ulike anvendelser fra kvantemekanikkens spede begynnelse til i dag, for eksempel innen atomfysikk, molekylegenskaper, moderne partikkelfysikk og faste stoffers fysikk. Deler av dette materialet finnes i kap. 5 i Griffiths, og avsnitt 5.1 og 5.2, mens 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. En spesiell takk også til en anonym bidragsyter med fritidsproblemer, som våren 2014 korrekturleste hele kompendiet og leverte den rettede utgaven i oblighyllen til FYS2140.

Kompendiet i FYS2140 er resultat av et dugnadsarbeid der kurssets forelesere har bygget på sine forgjenegers arbeid. Det 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. Flere revisjoner av notatene er gjort de siste årene av Are Raklev, tidvis med hjelp fra Siv Aalbergsjø. Til slutt har Eirik Grude Flekkøy lagt til sin versjon av kapittel 4. 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 MATERIEENS BØLGEEGENSKAPER	47
4.1 Dobbeltspalteeksperimentet	47
4.2 Davisson-Germer-eksperimentet og Braggdiffraksjon	51
4.3 De Broglies hypotese	52
4.4 Oppdagelsen av Schrödingerligningen	54
4.5 Gruppe- og fasehastighet	58
4.6 Bølge eller partikkel?	60
4.7 Oppgaver	61
II KVANTEMEKANIKK	65
5 Formalisme	67
5.1 Tilstander	67

5.2	Operatorer	69
5.3	Målinger	69
5.4	Forventningsverdier	71
5.5	Kompletthet	71
6	Spinn	73
6.1	Stern-Gerlach-eksperimentet	73
6.2	Den normale Zeeman-effekt	75
6.3	Oppdagelsen av spinn	76
6.4	Viktige fakta om spinn	78
6.5	Den anomale Zeemaneffekt (dvs. med spinn)	79
6.6	Bølgefunksjon med spinn	79
6.7	Spinn-bane-kobling	80
6.8	Addisjon av angulærmoment	80
6.9	Kombinasjoner av to spinn: singlet og triplet	81
III	ANVENDELSER	83
7	Molekyler	85
7.1	Bindingsmekanismer	85
7.2	Rotasjon og vibrasjon	87
7.3	Molekylspektra og strålingsoverganger	90
8	NMR	95
9	Elementærpartikler	99
9.1	Partikkelzoo	99
9.2	Henfall	100
9.3	Oscillasjon av nøytrale mesoner	103
9.4	Oscillasjon av nøytrinoer	107

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 fotoelektriske 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 gjensto kun var småproblemer. Dette illustreres kanskje best av Lord Kelvin, som i 1900 skal ha sagt følgende [1]:

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 i dag 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 ifølge 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.

Etter hvert 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	Uskarpheitsrelasjonen
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, supraledning, 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, et 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 teorien samt ulike postulater, f.eks. hvordan en måling av en fysisk størrelse skal defineres. Reglene er for så vidt 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 dobbeltspalteeksperimentet: 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 finne 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 nøytrinoner) 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 med andre ord 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 — så vel 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

enkler 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 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 $\rho = 71 \text{ kg/m}^3$. 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 størrelsesordenen **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 størrelsesordenen MeV (elektronet og de lette kvarkene), GeV (1000 MeV) (tunge kvarker, leptoner og de elektrosvake bosonene) eller TeV (massen til den mystiske Higgspartikkelen).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 er som følger: 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 Plancks 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 k i Coulombvekselvirkningen mellom to elektroner med ladning e ,

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

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

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

Men legg merke til at dette ikke er Coulombkonstanten k_e . Vi har at $k = k_e e^2$.

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}	mikro	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 — 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_e	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	$k_e e^2$	1.44 eV nm
Elektronets gyromagnetiske faktor	g_e	2.002
Grunntilstand hydrogen	$E_0 = -ke^2/2a_0$	-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 ble introdusert av Planck i 1900 og løste, som vi skal se, mysteriet med at klassisk fysikk ikke kunne forklare eksperimentelle observasjoner av stråling fra et såkalt sort legeme. 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 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 rødglødende 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 elektromagnetiske stråling som sendes ut fra et legeme som resultat av dets temperatur. Alle legemer sender ut (emisjon) og mottar (absorpsjon) elektromagnetisk stråling.
- Ved gitt temperatur T er vi interessert i å finne fordelingen av emittert stråling som funksjon av den elektromagnetiske 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

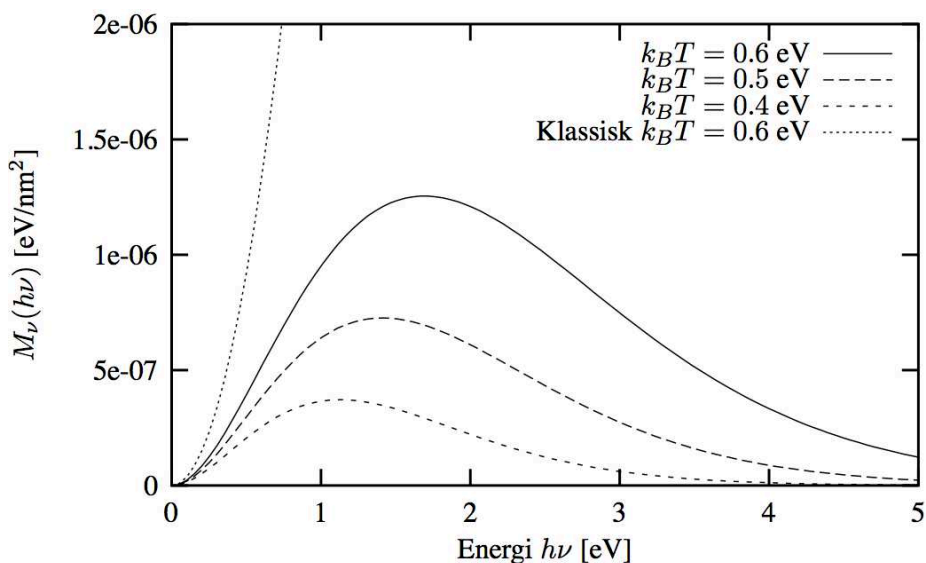
$$M(T) = \int_0^\infty M_\nu(T) d\nu$$

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 $M_\nu(T)$.**

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 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 senere se at energien til et foton jo nettopp er $E = h\nu$, 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.

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 reflekterer noe av den innkommende elektromagnetiske stråling. All innkommende elektromagnetiske 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 elektromagnetisk 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 elektromagnetisk stråling (mer 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 elektromagnetisk stråling. **Teknisk sett vil dette svare til stående elektromagnetiske bølger**, og en kan da regne ut energien til elektromagnetiske 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 den teoretiske frekvensfordelingen. Den typiske formen på frekvensfordelingene som ble målt, ser dere i figur 1.1.

Basert på måledata 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 forskyvningslov*, 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 mikrobølgebakgrunnsstrålingen fra perioden 400.000 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 det elektromagnetiske feltet i hulrommet. (Når dette feltet beskrives som stående bølger i hulrommet.) Dette feltet skal igjen gjenspeile svingningene 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 reprodusere 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 (“energipakker”) som kan ha energi**

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

der h er Plancks konstant, ν er strålingens frekvens, og n er et heltall. Det er med andre ord 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 utledning 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 gjettest, 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 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 $\langle E \rangle$. I stedet 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 ytterligere 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 elektromagnetisk stråling i et hulrom er at det gir opphav til stående elektromagnetiske 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.

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

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 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 travers

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

Nå skal vi anvende Plancks hypotese for å regne ut 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 elektromagnetisk 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

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

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 svingemode

I denne utledningen tar vi utgangspunkt i den såkalte Boltzmannfordelingen fra statistisk mekanikk. Denne sier at sannsynligheten P for å finne et system (f.eks. en elektromagnetisk oscillator) med energi E som er høyere enn minimumsenergi 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 gjennomsnittsenegien 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 gjennomsnittsenegien

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

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

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

Til sammen 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 elektromagnetisk stråling *i seg selv* er diskret og består av de nevnte fotonene. Denne teorien, som han 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

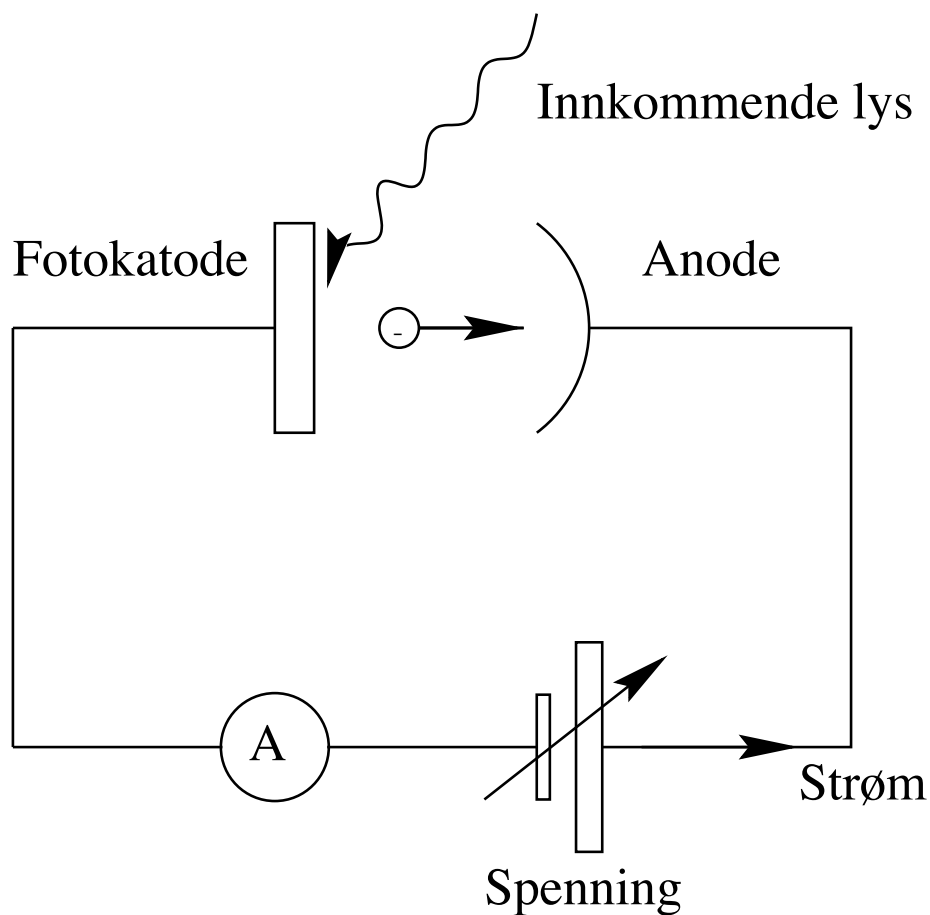
Den fotoelektriske effekt ble bl.a. studert av Hertz i 1887. Essensen i denne effekten er at lys (elektromagnetisk stråling) sendes inn mot en metallplate, og elektroner blir emittert fra platen som en følge av dette. Figur 2.1 viser et oppsett for måling av fotoelektrisk effekt. Kretsen er satt opp 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

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.

går til null ved en gitt negativ spenning $-V_0$ som er uavhengig av intensiteten. 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.

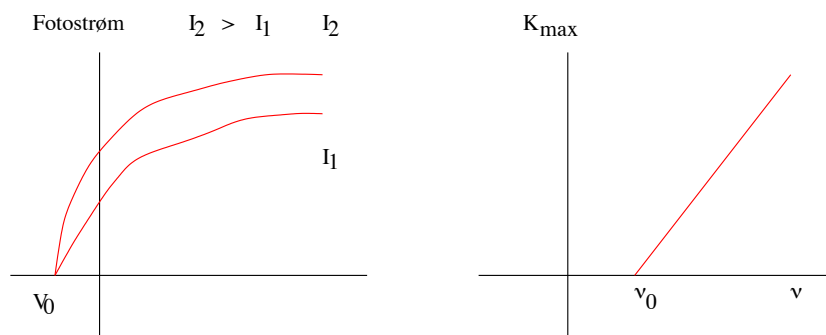
Videre ser vi av andre del av figuren (høyre) at det er en minste frekvens ν_0 den innkommende elektromagnetiske strålingen må ha for at elektroner skal bli sendt ut i det hele tatt, samt at elektronenes maksimale kinetiske energi øker lineært med lysets frekvens.



Figur 2.1: Skjematisk oppsett for fotoelektrisk effekt.

Oppsummert er det tre viktige egenskaper ved den fotoelektriske effekt som ikke kan forklares vha. elektromagnetisk 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



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

blitt utførlig uttestet for et intensitetssprang på 10^7 .

2. I henhold til klassisk elektromagnetisk 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 elektromagnetisk 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 elektromagnetisk 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 elektromagnetisk stråling fra lyskilden.

Tenker vi oss at lyskilden sender ut elektromagnetisk 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 løsrives 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 elektromagnetiske 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 elektromagnetiske 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 bølglengde $\lambda = 5890 \text{ \AA}$ hvor $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$. Effekt per arealenhet M til flaten til lyskjeglen 1 m fra lyskilden er da (dvs. elektromagnetisk 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

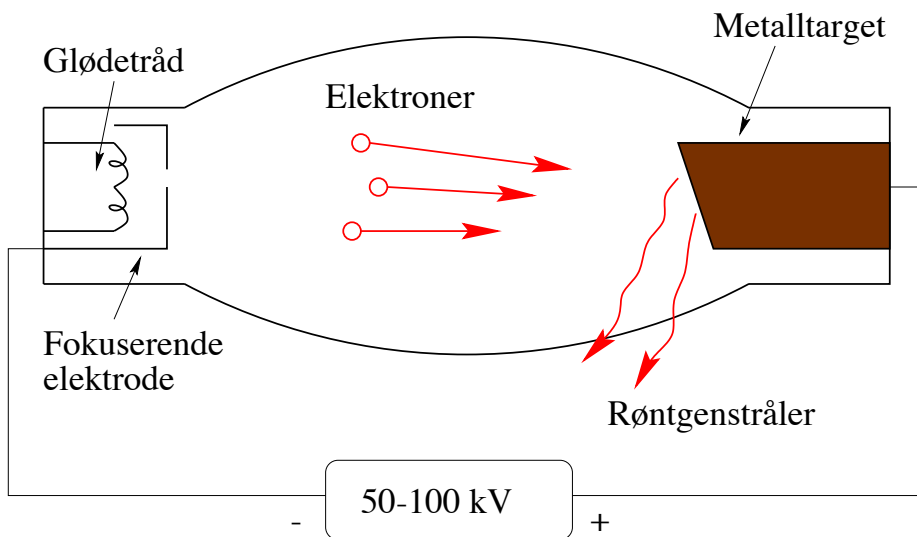
$$N = \frac{5 \times 10^{17} \text{ eV/m}^2\text{s}}{2.1 \text{ eV}} = 2.4 \times 10^{17} \text{ foton/m}^2\text{s}. \quad (2.10)$$

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 likevel 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 Comptoneffekten.

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.

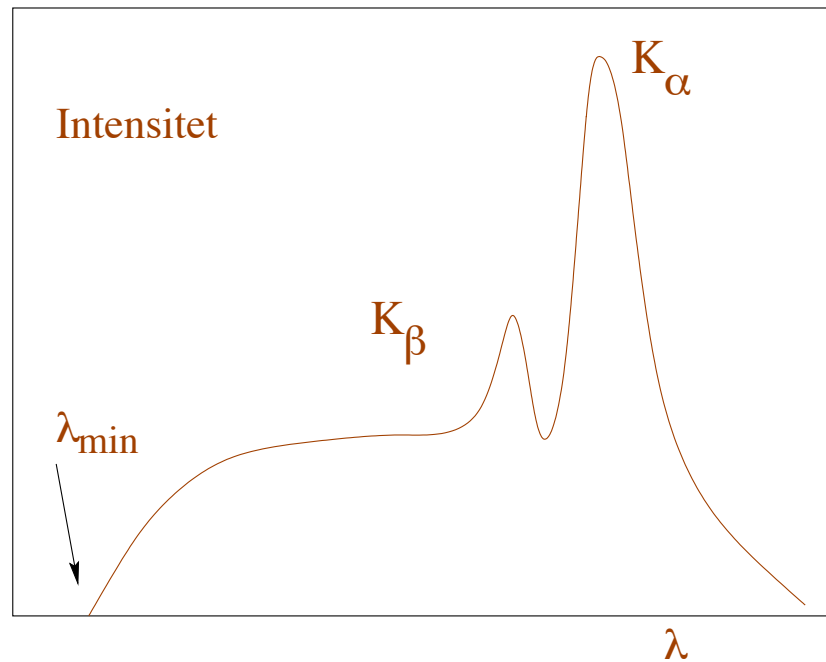


Figur 2.3: Eksperimentelt oppsett for produksjon av röntgenstråling.

Elektronene vekselvirker med atomene i metallet via Coulombvekselvirkingen, og overfører bevegelsesmengde til atomene. Elektronene bremses dermed ned, og i denne deakselerasjonen sendes det ut elektromagnetisk stråling i röntgenområdet. Denne strålingen som skyldes nedbremsingen av elektronet kalles

bremstraahlung, fra tysk for bremsestråling. Dette svarer til elektromagnetisk 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 elektromagnetisk stråling i röntgenområdet, 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 energibalans

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

Det en observerte var at det fantes en minste bølgelengde (maksimal frekvens!) for utsending av Röntgenstråling, noe som ikke kunne forklares vha. klassisk elektromagnetisk 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 elektromagnetiske 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 elektromagnetisk 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 binær-system. Massen til den andre stjernen kan være flere solmasser. Den utsendte elektromagnetiske 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 elektromagnetisk 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 grafittplate og observerte at bølgelengden til den spredte (utgående) strålingen var større enn bølgelengden til den innkommende. Siden energien er knyttet til bølgelengden via

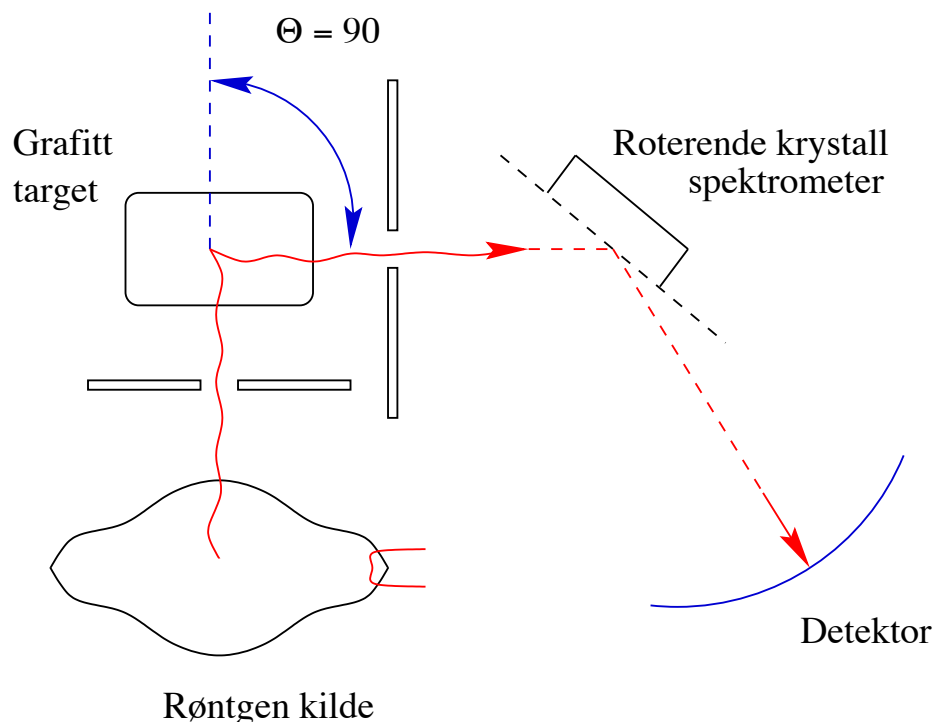
$$E = \frac{hc}{\lambda} = h\nu,$$

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 *Braggdiffraksjon*, hvor et krystall med kjent avstand d mellom atomlagene gir konstruktiv interferens for elektromagnetisk stråling med bølgelengde λ når

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

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 noen gang har vunnet nobelprisen i fysikk.

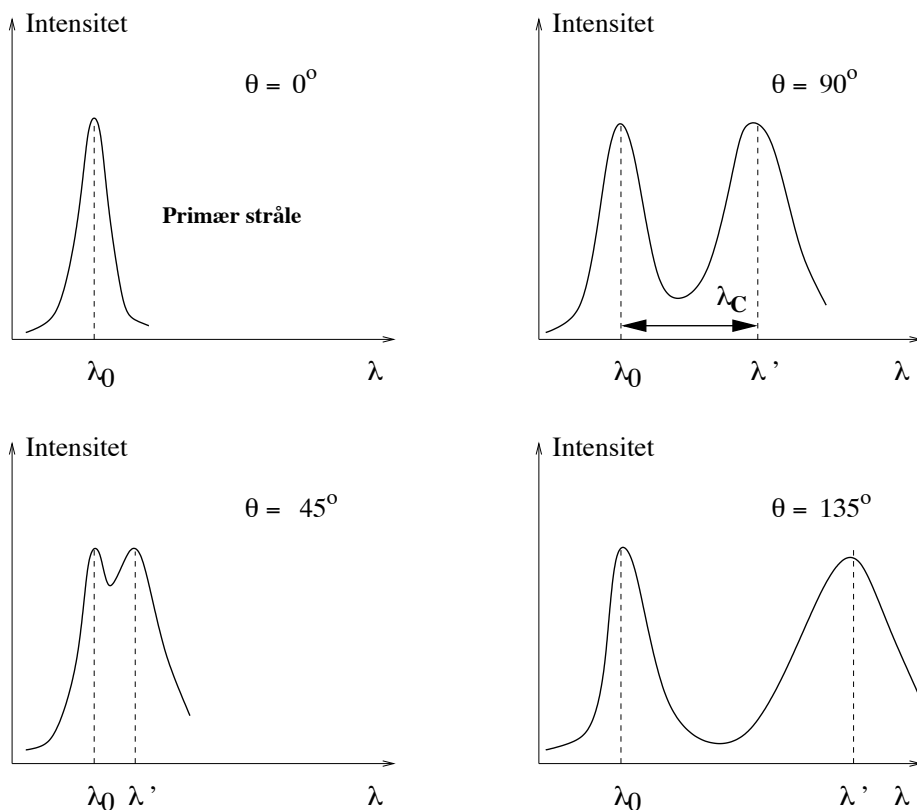


Figur 2.5: Eksperimentelt oppsett for Comptons forsøk, her med $\theta = 90$ grader.

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 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 elektromagnetiske strålingen (må ikke forveksles med refleksjonsvinkelen i Bragg-krystallspektrometeret!). Vi ser at den utgående (spredte) strålingen har to topper — en ved den opprinnelige (innkommende) bølgelengde 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 forskjøvede 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 Comptoneksperimentet 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 elektromagnetisk stråling mot et elektron. Løsningen er igjen å ta hensyn til lysets partikkelegenskaper. Vi har allerede lært at fotoner tilordnes



Figur 2.6: Skisse av intensitetsfordeling for elektromagnetisk 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.

en energi $E = h\nu = hc/\lambda$. I tillegg tilordnes de altså en bevegelsemengde

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

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

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

har vi at bevegelsesmengden p er gitt ved

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

La oss nå bruke dette og utlede bølgelengdeforandringen 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 lage tabell 2.1 med definisjonene av energi og bevegelsesmengde for elektroner og fotoner, hvor m_e er elektronets masse. Disse har vi illustrert i figur 2.7.

Tabell 2.1: Definisjon av energi og bevegelsesmengde 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^-	$E_e = m_e c^2$	$E'_e = \sqrt{(p'_e c)^2 + m_e^2 c^4}$

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

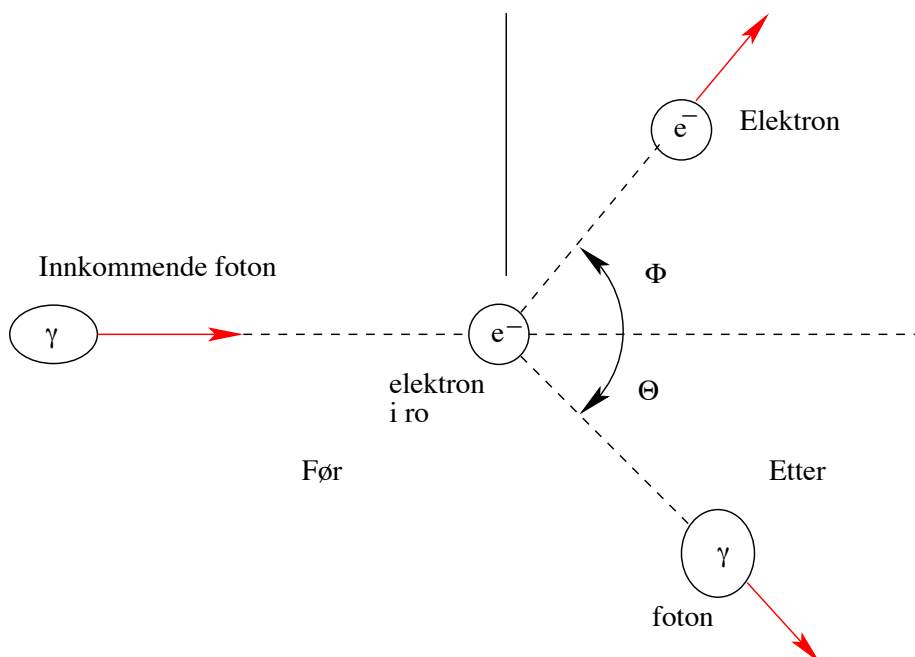
$$\mathbf{p}_\gamma + \mathbf{0} = \mathbf{p}'_\gamma + \mathbf{p}'_e. \quad (2.25)$$

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

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



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.

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 Comptonbølglengden for elektronet, og ligning (2.35) er Comptons formel. Vi ser at siden bølglengden til den elektromagnetiske 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 bølglengde. Dette kan forstås på følgende vis. Når vi har en forandring i bølglengde, 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 elektromagnetiske 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 Comptonbølglengden

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

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

Nå kan vi også forstå hvorfor det ikke var relevant å snakke om endring av bølglengde i diskusjonen om fotoelektrisk effekt, selv om prosessen i og for seg er den samme — støt av fotoner mot elektroner. Forklaringen ligger simpelthen i energistørrelsene. I fotoelektrisk effekt har vi elektromagnetisk 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 bølglengder i størrelsesorden $10 - 100 \text{ nm}$

og energier for fotoner i størrelsesorden $10^0 - 10^2$ 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 elektromagnetisk stråling med bølgelengder i riktig størrelsesorden. Dersom vi f.eks. ser på fotoner med en energi på $E = 41$ 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 som 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 *elektromagnetisk 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 elektromagnetiske strålingen bygger på standard bølgelære. (Braggdiffraksjon.)
- 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 potentialsprang på 1 volt. Vis at $1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$. Hva blir energiøkningen når elektronet akselereres i et potentialsprang 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 elektrostatisk 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 arealenhet og per bølgelengde, $dR/d\lambda$, fra et sort legeme er gitt ved

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

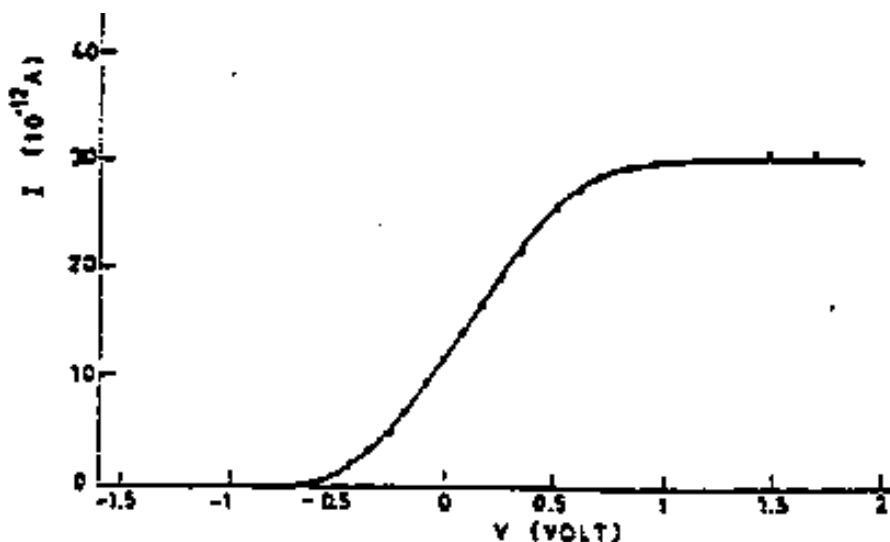
der k er Boltzmanns konstant og T er legemets temperatur. I utledningen av ligningen over gjøres en antakelse som bryter med klassisk fysikk. Forklar kort hva denne antakelsen består i. Bruk Plancks lov til å vise Wiens forskyvningslov

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

der λ_m er bølglengden 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. bølglengde er størst ved en bølglengde 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, $\lambda = 2.58 \cdot 10^{-7} \text{ m}$. 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 bølglengde. Tabell 2.2 viser stoppepotensialet for noen forskjellige verdier av bølglengden. Bestem ut fra dette arbeidsfunksjonen for det nye metallet, den lavest mulige frekvensen for prosessen og Plancks konstant h .
- 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 $1.6 \times 10^{-12} \text{ W}$ blitt pluseslig satt på og bestråler en metallflate. Ved fotoelektrisk effekt blir

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.

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 $\approx 1 \text{ \AA}$ har absorbert nok energi til å emitteres.
- Lord Rayleigh demonstrerte imidlertid (Phil. Mag. **32**, (1916), side 188) at dette estimatet er for pessimistisk. Absorpsjonsarealet 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.

- b) 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

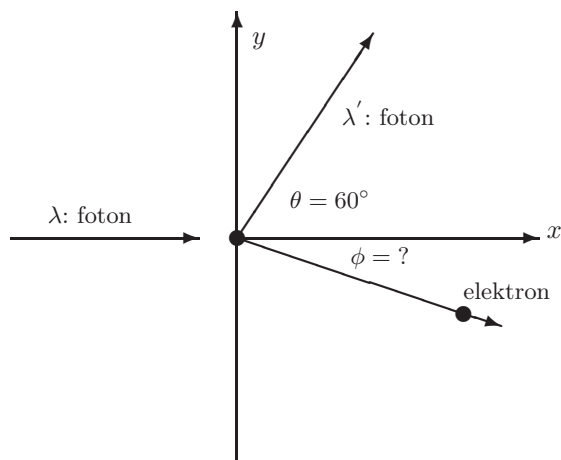
- a) Tegn en skjematisk skisse av et røntgenrør. Gi en kort og kvalitativ beskrivelse av hvordan røntgenstrålingen dannes og typiske trekk ved foton-spektret.
- b) Hvis et elektron har kinetisk energi $E_k = 10000$ eV, beregn den minste bølgelengden λ_{\min} for de utsendte fotonene.
- c) Vi antar at vi har røntgenstråler med bølgelengde $\lambda = 1$ nm $= 1 \times 10^{-9}$ 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 $\lambda = 1.00 \times 10^{-11}$ 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 $\lambda_c = 2.426 \times 10^{-12}$ 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.

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

- c) Finn den kinetiske energien, bevegelsesmengden og spredningsvinkelen for elektronet.

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.

- a) Gjør kort rede for de størrelser som inngår i relasjonen ovenfor.
 b) 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.

- c) Tegn en prinsippskisse for et Compton eksperiment og angi spredningsvinklene for fotonet og elektronet etter spredningen.
 d) 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° .

- e) Beregn bølgelengden λ' for de spredte fotonene ved 90° .
 f) 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.

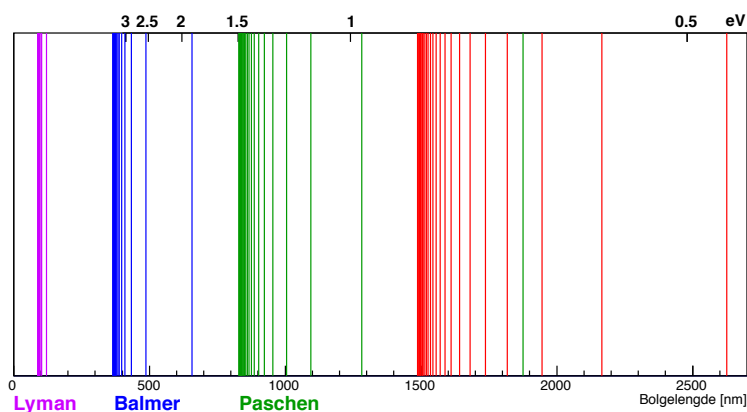
I dette kapitlet skal vi se på nok en revolusjonerende innsikt som ble drevet fram av eksperimentelle fakta som ikke kunne forklares ved klassisk fysikk. Året er 1913, og ideen er Bohrs teori om atomene. Men la oss først rekapitulere noen av de fenomenene en ikke hadde noen forklaring på. Det første 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 den konsekvens 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 bølglengden til forskjellig slags lys. Det dreide seg i all hovedsak om utsendt (emittert) elektromagnetisk stråling fra bestemte typer atomer. Den viktige observasjonen var at slik elektromagnetisk stråling er konsentrert ved bestemte, diskrete bølgelengder. Disse såkalte linjespektrene er forskjellige for hvert grunnstoff og utgjør dermed et slags “fingeravtrykk” for grunnstoffet. En nær 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 stort sett 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 emittere elektromagnetisk stråling ved bestemte, diskrete bølgelengder (fotonenergier). Et av de mest studerte atomer var hydrogenatomet, som består av et proton og et elektron. Vi viser foton-spekteret for hydrogen i figur 3.2.



Figur 3.2: Foton-spekteret for hydrogen. Bølglengdene er i nm. De tykke strekene betyr at linjene ligger så tett at de ikke kan skilles.

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

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

som vi i dag vet svarer til overganger fra høyere eksiterte tilstander i hydrogenatomet til den første eksisterende 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 Balmerserien (synlig lys).
3. $n_f = 3$ og $n_i = 4, 5, \dots$, svarende til den såkalte Paschenserien (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 i utviklingen frem mot den kvantemekanikken vi kjenner i dag var Bohrs atommodell fra 1913. Bohr utviklet en teori basert på kombinasjonen av klassisk mekanikk og Plancks og Einsteins kvantiserings teorier fra elektromagnetisk 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 evne til forutsigelser. En god modell må kunne testes ved at den forutsier 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.

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

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 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 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 Coulombvekselvirkningen mellom elektron og kjerne.
2. Bare visse elektronbaner er stabile. I disse baner utsender ikke elektronene elektromagnetisk 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, $J \cdot s = \text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}$! Så hvorfor da ikke prøve seg med å anta at i kvantedomenet må angulærmomentet være av størrelsesorden \hbar , kanskje \hbar ganget med et 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

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 $F_e = k_e e^2 / r^2$ der $k_e = 1 / (4\pi\epsilon_0)$. Denne kraften skal gi elektronets nødvendige sentripetalakselerasjon i sirkelbanen, $a = v^2 / r$. Newtons 2. lov gir da

$$\frac{k_e e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \quad \text{eller} \quad v^2 = \frac{k_e e^2}{m_e} \frac{1}{r}. \quad (3.5)$$

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

$$E = -\frac{k_e e^2}{r} + \frac{1}{2} m_e v^2. \quad (3.6)$$

Kombinerer vi dette med (3.5), får vi

$$E = -\frac{k_e e^2}{2r}. \quad (3.7)$$

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

$$m_e v r = n \hbar, \quad (3.8)$$

som kan brukes til å eliminere v fra (3.5) og løse ut radien,

$$r \equiv r_n = \frac{\hbar^2}{m_e k_e e^2} n^2 \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.9)$$

Dette skrives gjerne som

$$r_n = a_0 n^2, \quad (3.10)$$

der $a_0 = \hbar^2 / (m_e k_e e^2) \approx 0.0529$ nm kalles **Bohrradien**. Her ser vi at elektronradiene er kvantisert som kvadratiske heltallsmultipler av Bohrradien. Fra (3.7) følger nå også energiens kvantisering, som er Bohrs atomformel,

²Legg merke til at, som for energien, så er forskjellen mellom to angulærmoment, ΔL , delt på angulærmomentet

$$\Delta L / L = [(n+1)\hbar - n\hbar] / n\hbar = 1/n \rightarrow 0, \quad (3.4)$$

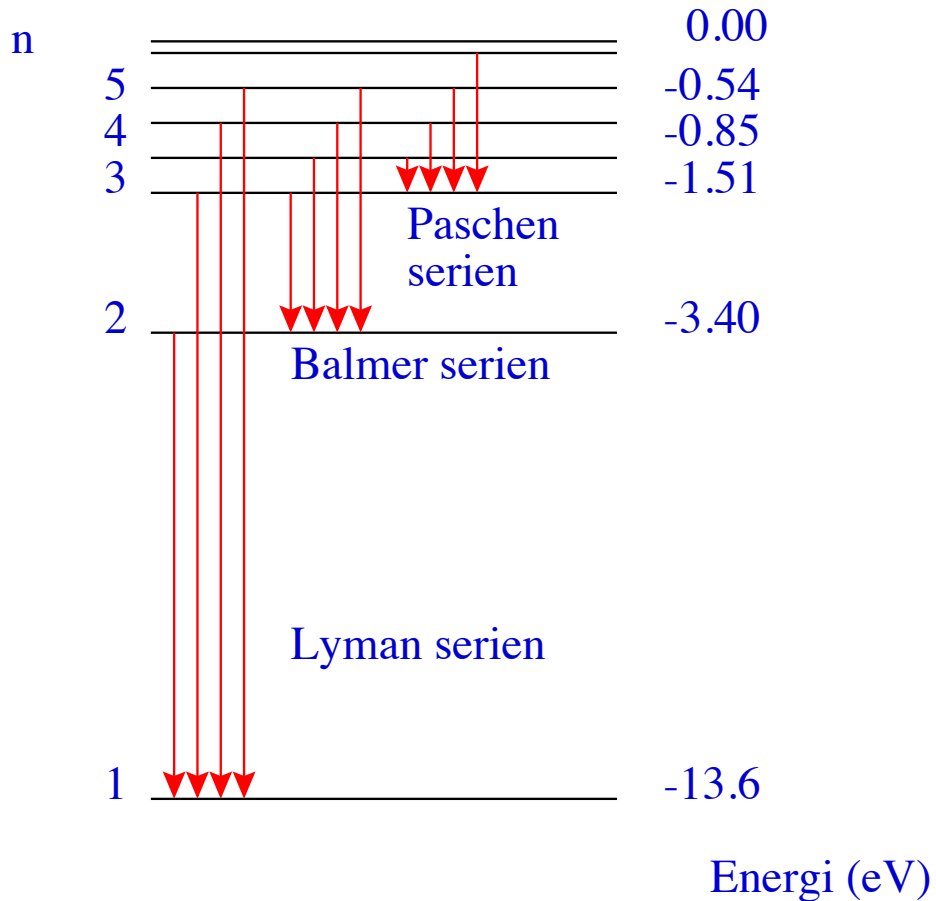
for store n , slik at angulærmomentet da blir en *kontinuerlig* størrelse slik vi er vant til i klassisk mekanikk.

$$E_n = -\frac{k_e^2 m_e e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}. \quad (3.12)$$

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

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{k_e e^2}{2a_0 hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (3.13)$$

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 strålingsovergangene 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 trengs for å frigjøre et elektron i hydrogenatomet.

Som sagt var det en imponerende bragd av Bohr å konstruere sin modell ut fra 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 mer om når vi gjennomgår hydrogenatomet i detalj senere i kurset.

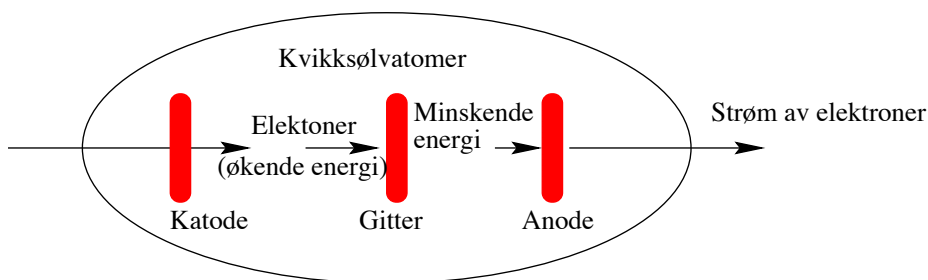
3.2.1 Franck-Hertz-eksperimentet

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 topper ved heltallsmultipler 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,



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.

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.

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

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{254 \text{ nm}} = 4.88 \text{ eV}, \quad (3.14)$$

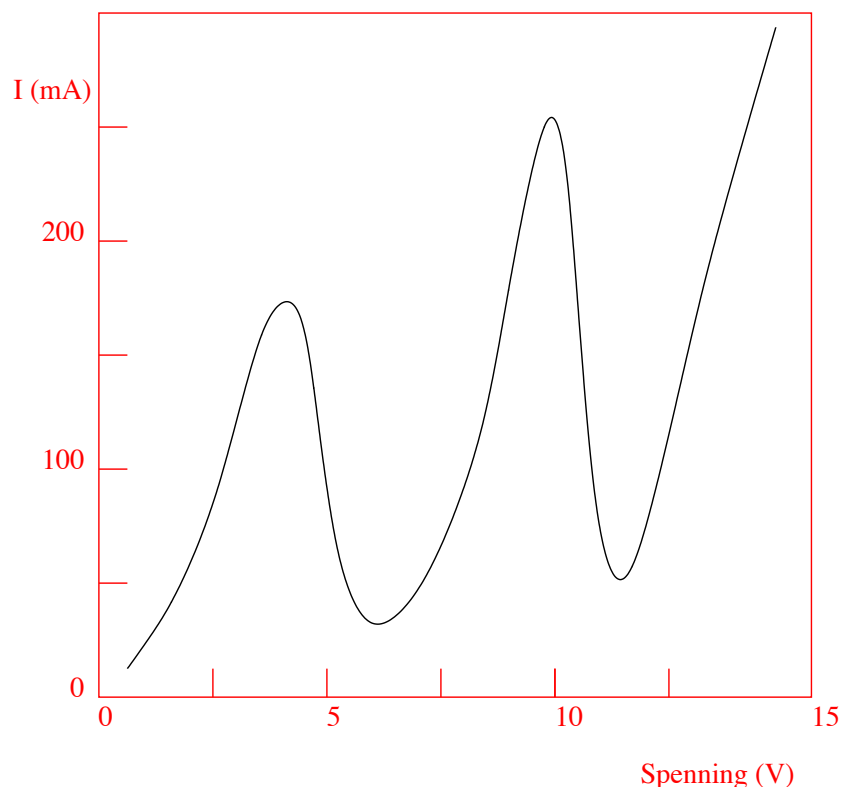
i samsvar med den målte spenningen og dermed den kinetiske energi som elektronene har.

3.3 Oppgaver

Oppgave 3.1 Synlig lys har bølglengder i området 4000–7000 Å.

- 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 .



Figur 3.5: Strømmen av elektroner gjennom røret som funksjon av det akselerende 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.

- a) 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

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

- 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 bølglengden H_α ($n = 3 \rightarrow n = 2$) i Balmer-serien ifølge denne mer korrekte formelen?
- d) Spektrallinjen H_α fra deuterium (tungt hydrogen) har bølglengden $\lambda = 656.029$ 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: $h\nu = E_1 - E_2 - \Delta E$.

- Finne et uttrykk for denne korreksjonen ΔE . Gå ut fra at fotonet har en bevegelsesmengde lik $h\nu/c$.
- Gjennomfør en tilsvarende diskusjon for det tilfellet at atomet absorberer et foton.
- 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

- Hvilke energier har lyskvant som faller i den synlige delen av spektret, $4000 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 7000 \text{ \AA}$?
- Oppgi noen spektrallinjer av atomært hydrogen og enkeltionisert helium som tilsvarer synlig lys.
- Finne 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 atommodell 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

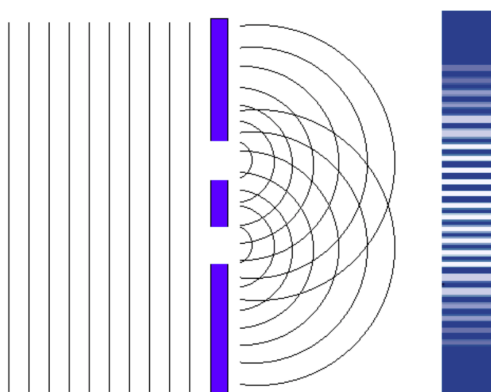
MATERIENS BØLGEEGENSKAPER

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, desto 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 om 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.

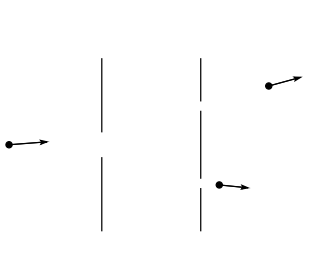
4.1 Dobbeltpalteeksperimentet

Figur 4.1 viser en skisse av et interferensforsøk med en dobbeltpalte der det brukes koherent lys. Interferens er et bølgefenomen som dere kjenner til, både fra videregående skole og fra FYS2130, hvor det blir beskrevet for klassiske bølger (f.eks. på vann) og for elektromagnetisk stråling (f.eks. laserlys). Om man registrerer interferensmønsteret på skjermen til høyre, vil man få en intensitetsfordeling slik som vist i figur 4.3 (c). Om vi nå tenker oss et analogt eksperiment der vi bytter ut lyskilden med en kilde for små klassiske partikler, slik som illustrert i figur 4.2, kan vi også registrere fordelingen av partikler. Vi kan tenke oss at det sitter en person med en ertepistol og avfyrer ertene gjennom den første spalten. Presisjonen er ikke så god, så av og til treffer ertene kantene på spaltene, slik at de som kommer frem, ankommer temmelig vilkårlig. Da vil de fordele seg på skjermen slik som vist i figur 4.3 (b). Dersom man stenger for en av spaltene vil de fordele seg slik det er illustrert i figur 4.3 (a). Slik vil også fordelingen av lyset se ut dersom man stenger for den ene spalten¹.

¹Det er sant at lys som passerer enkeltspalter også vil skape diffraksjonsmønster med intensitetsminima, spesielt om spaltebredden er større enn lysbølgelengden. Men vi skal anta



Figur 4.1: Dobbeltspalteeksperiment med lys. I 1999 klarte fysikere å observere interferensfenomen mellom bølgepakker som besto av kun to fotoner. Her vises bølgefronten til lyset og det resulterende interferensmønsteret på skjermen bak.

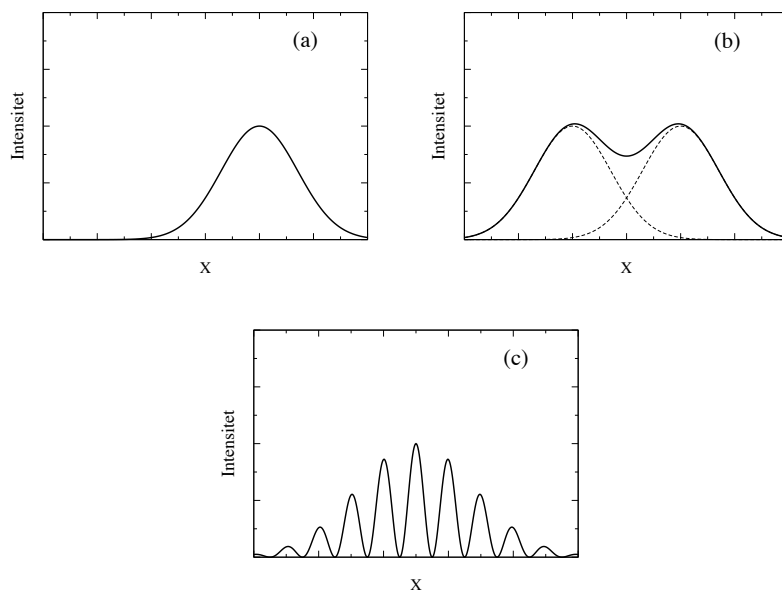


Figur 4.2: Små klassiske kuler som skytes gjennom mot to spalter. Det registreres hvor de treffer på skjermen til høyre.

La oss nå tenke oss at vi bytter ut ertene med en jevn strøm av monoenergetiske elektroner og gjør et tilsvarende eksperiment. Skjermen bak kan være fluorescerende, slik at den produserer et lysglimt hver gang den treffes av et elektron. Hva skjer? Figur 4.4 viser resultatet av et slikt eksperiment som ble utført i 2009. Elektronene sendes ut enkeltvis, det går omtrent et sekund mellom hvert, og figuren illustrerer hvordan mønsteret på skjermen utvikler seg etter hvert som flere og flere elektroner ankommer. De danner et interferensmønster akkurat som lyset, eller altså fotonene.

Dekker vi til en av spaltene får vi tilbake den jevne fordelingen av prikker, som illustrert i figur 4.3 (a). Dette er også blitt gjennomført eksperimentelt. Men åpner vi begge spaltene igjen, dannes på nytt interferensmønsteret. 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. Legg imidlertid

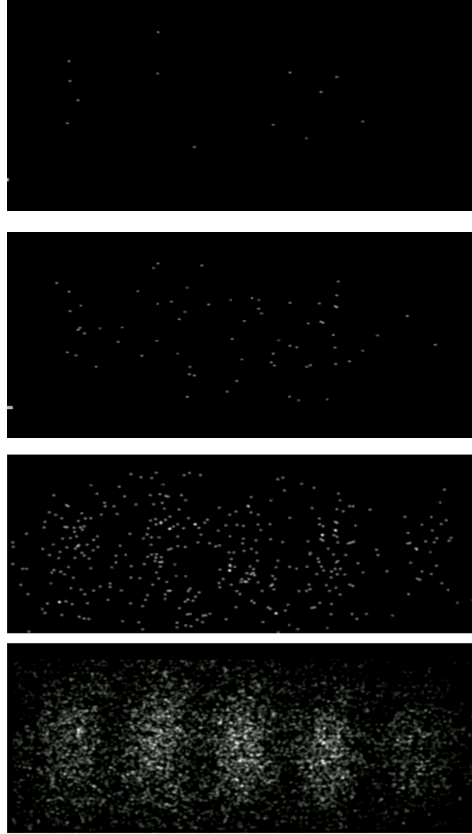
at spaltebredden er tilstrekkelig liten til at denne effekten domineres av interferensen mellom de to spaltene.



Figur 4.3: Intensitetsfordelingene for klassiske kuler til som passerer gjennom én spalte (a) og to spalter (b) og bølger som passerer gjennom to spalter (c). I figur (b) er intensitetsprofilen summen av intensitetene fra de to spaltene. Disse er vist i stiplede linjer.

merke til en ting til som er merkelig: Elektronene går gjennom spaltene én og én. Interferensmønsteret oppstår etter hvert 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 dreier seg om en instantan energioverføring, akkurat som tilfellet er for den fotoelektriske effekt. Elektronet 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. Som dere ser i figur 4.4 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 i et interferensmønster relatert til kvadratet av amplituden til den innkommende bølgen $I \propto a^2$, der amplituden til interfererende bølger er additiv. De to amplitudene fra de to spaltene, la oss kalle dem a_1 og a_2 , danner resultantamplituden $a = a_1 + a_2$, som gir opphav til intensiteten $I \propto |a_1 + a_2|^2$. Årsaken til at interferens forekommer er at amplitudene kan være både positive og negative og derfor kansellere, slik at vi får mønsteret i figur 4.3 (c). I figur 4.3 (b) er det intensitetene som adderes slik at $I = I_1 + I_2$ der I_1 er intensiteten når spalte 2 er stengt og visa versa for I_2 . For lyset kan vi identifisere amplituden med det elektriske feltet $a \sim E$, og for elektronene gir vi den navnet ψ . Dette er den såkalte bølgefunksjonen.



Figur 4.4: Eksperiment der ett elektron per sekund passerer gjennom en dobbeltspalte i en gull-dekket silikonmembran. Den øverste figuren viser detektor-skjermen tidlig i eksperimentet, den nederste sent. Elektronene aksellereres først gjennom et potensialfall på 600 V og spaltene er 62 nm brede og 272 nm fra hverandre. De er 4 μm lange. Eksperimentet som er en av en lang rekke lignende eksperimenter er utført av Herman Batelaan i 2009.

Den er additiv, varierer i rom og tid, og sannsynligheten for å finne elektronet er proporsjonal med $|\psi|^2$. Hvordan den varierer i rom og tid må bestemmes av en bølgeligning, og denne representerer en ny naturlov, som vi skal finne i neste kapittel. Det skal vise seg at, ulikt det elektriske feltet, som kan måles som en kraft på en testladning, er ikke ψ direkte målbar

La oss nå se litt nærmere på hvordan elektronene med sine bølgeegenskaper faktisk oppfører seg. Hva om vi stenger den ene spalten? Da vil elektronene generere en enkelt klokkeformet intensitetsprofil som illustrert i figur 4.3 (a). Så åpner vi begge spaltene igjen, men nå setter vi oss fore å teste hvilken av spaltene hvert enkelt av elektronene går gjennom. Vi kan tenke oss at vi setter opp en lyskilde som avslører hvor elektronen passerer. Siden elektronene passe-

rer enkelvis og hver måling viser at de går enten gjennom den ene eller gjennom den andre spalten, får vi to klokkeformede bidrag. Elektronene kommer nå i to grupper, en som går gjennom den ene spalten, og en som går gjennom den andre. Hver gruppe må oppføre seg på samme måte som den gruppen som bare hadde en spalte å gå gjennom. Dette er illustrert i figur 4.3 (b). Nå er altså interferensmønsteret forsvunnet. Vi endrer altså elektronenes oppførsel ved å måle på dem. Dette har å gjøre med at observasjonen innebærer en spredningshendelse mellom et foton og et elektron, og uansett hvilken målemetode vi velger, vil vi ikke kunne unngå å påvirke elektronene.

Hva om man skrudde ned lyset, så det ble veldig svakt og bare påvirket elektronene meget svakt? I så fall ville færre av elektronene bli utsatt for spredning. Men så ville jo også færre av elektronene bli observert. Til slutt, ettersom lyset gradvis blir borte, ville elektronene på nytt produsere sitt interferensmønster.

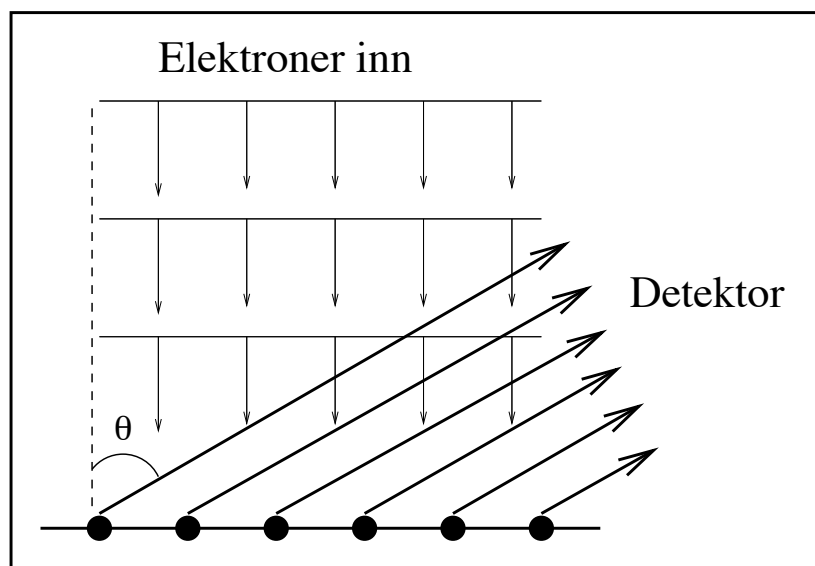
Dette at enkeltelektroner interferer med seg selv kan altså ikke beskrives uten å gi dem bølgeegenskaper. Spesielt må man tenke seg at det formidles informasjon gjennom begge spaltene samtidig, selv om elektronene kommer en og en. Det betyr at hvert enkelt elektron har en endelig sannsynlighet for å måles i begge spalter. For Einstein var ideen om at naturen på denne grunnleggende måten var vilkårlig uakseptabel, og er kjent bl.a. for utsagnet *Gud kaster ikke med terning*². Hans syn, som også har blitt kjent som den realistiske tolkningen av kvantemekanikken, innebærer at elektronene faktisk er underkastet en deterministisk oppførsel. Vi kjenner den bare ikke. Denne oppførselen må dermed være bestemt av ukjente variable og denne såkalte *hidden variables* teorien har hatt mange prominente tilhengere. Først på 1980 tallet ble denne kontroversen endelig avgjort gjennom eksperimentelle målinger, og da i Einsteins disfavør. Men allerede dobbeltspalteeksperimentet indikerer at de skjulte variable ikke finnes. For, om slike variable skulle finnes, ville de for hvert enkelt elektron avgjøre om de skulle gjennom den ene eller andre spalten. Det spiller ikke da noen rolle om vi kjenner variablene, eller deres prediksjon, elektronene ville på nytt dele seg i to grupper, en for hver spalte. Dermed er vi tilbake til situasjonen hvor vi måler elektronenes posisjon ved spaltene, og igjen skulle vi miste interferensmønsteret. Men det er i strid med eksperimentelle målinger.

4.2 Davisson-Germer-eksperimentet og Braggdiffraksjon

Dobbeltspalteeksperimentet er kanskje det konseptuelt enkleste eksempelet 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 nikkkelkrystall, se figur 4.5. Den innkommende elektronbølgen spres mot atomene 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

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

²Det er i hvert fall slik utsagnet hans alltid blir gjengitt. Det han faktisk sa var 'Det virker vanskelig å kikke Gud i kortene.. Men at Herren spiller terning og bruker 'telepatiske' metoder..., det tror jeg ikke på et øyeblikk.'



Figur 4.5: Davisson-Germer-eksperimentet.

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 ennå ikke sagt hva elektronenes bølgelengde λ egentlig er. Det får dere vite mer om i neste avsnitt.

Et lignende eksperiment er Braggdiffraksjon med elektroner.³ 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 4.6. 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 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

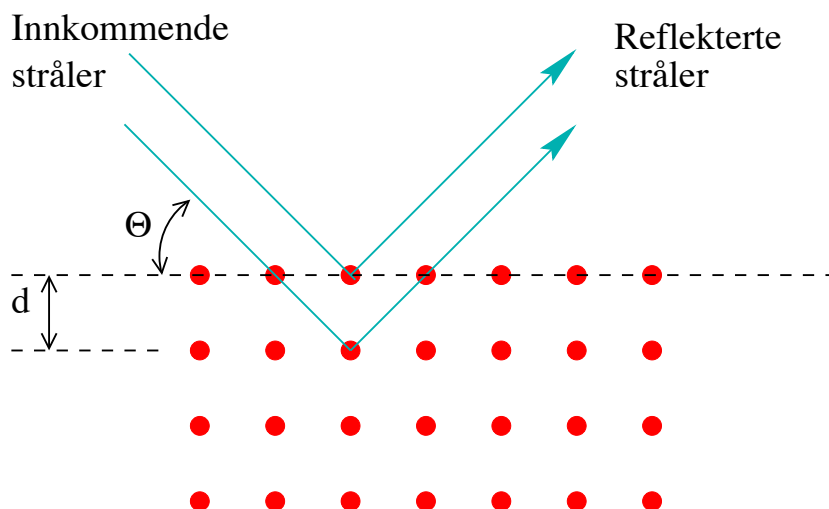
$$2d \sin \theta = m\lambda. \quad (4.2)$$

Denne ligningen er kjent som **Braggs 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 bølgeegen-

³Vi nevnte så vidt Braggdiffraksjon for elektromagnetiske bølger i avsnitt 2.3. Det var et klassisk resultat fordi det bare bygde på det elektromagnetiske feltets bølgenatur. Braggdiffraksjon med elektroner er en kvantefysisk effekt som hviler på elektronets bølgenatur.



Figur 4.6: Braggdiffraksjon. Avstanden mellom atomene i krystallet er d . Spredningsvinkelen for innkommende og utgående elektroner er θ .

skapene.

La oss minne om skillet mellom partikler og bølger i klassisk fysikk: Klassisk har en partikkel egenskaper som posisjon, bevegelsesmengde, kinetisk energi, 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 til 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 ses 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 Oppdagelsen av Schrödingerligningen

Alle de grunnleggende naturlovene må på ett eller annet vis gjettes før de kan gjøres til gjenstand for eksperimentell testing. Noen naturlover, slik som bevaring av angulærmoment, kan utledes fra andre, mer fundamentale lover– i dette

tilfellet bevaring av bevegelsesmengde. Men de underliggende lovene sier noe ikke-trivielt om naturen og kan derfor ikke utledes fra matematiske betraktninger alene. Prosessen frem til formuleringen av en naturlov er derfor i seg selv hverken rigorøs eller deduktiv, men må inneholde et kreativt skritt og generaliseringer. Heldigvis er naturlovene i mange henseender storartet generelle, så generalisering er en utmerket fremgangsmåte.

Som et eksempel kan man tenke seg at man gjetter Newtons andre lov ved å gjøre målinger på ett enkelt system av en masse og en fjærvekt. Dersom man aksellererer massen ved hjelp av forskjellige krefter fra fjærvekten, vil man kunne lese av en vakker lineær sammenheng mellom kraften og aksellerasjonen. Man har selvfølgelig bare målt på en enkelt masse av et spesielt stoff som utsettes for en helt spesiell type kraft. Det er derfor direkte grensesprengende å anta at denne lineære sammenhengen gjelder for alle substanser, alle verdier av massen og alle typer krefter, slik man gjør når man generaliserer denne enkeltmålingen til å gjelde universelt. Likevel er det et empirisk faktum at Newtons andre lov gjelder for alle typer krefter og systemer. Den gjelder for Merkurs massesenter som påvirkes av solsystemets tyngdekrefter. Den gjelder for et lite væskeelement som påvirkes av trykkrefter fra den omkringliggende væsken (formulering av Newtons andre lov i et slikt kontinuerlig system er kjent under navnet 'hydrodynamikk'), og den gjelder for en elektrisk ladd dråpe som beveger seg mellom to kondensatorplater under påvirkning av elektromagnetiske krefter.

Newtons lover legger grunnlaget for mekanikken og lar oss regne ut hvordan masser og krefter utvikler seg med tiden. De har en klar motivasjon i empiriske målinger, som vi allerede har en intuisjon for. Schrödingerligningen beskriver hvordan den kvantemekaniske bølgefunksjonen utvikler seg med tiden, noe som også tillater oss å beregne hvordan masser og krefter utvikler seg med tiden. Men når det gjelder utledningen av- eller motivasjon for denne ligningen, finnes det ingen rute som er like intuitiv som den som leder til Newtons lover.

Løsningen ligger i å ta utgangspunkt i beskrivelsen av fotoner, hvor den aktuelle bølgefunksjonen faktisk er kjent. Den la i sin tid grunnlaget for å forstå lys som elektromagnetiske bølger. Nå skal vi bruke den til å ta skrittet tilbake til en beskrivelse av materiens partikkelegenskaper.

Vi skal lete etter en bølgebeskrivelse av massive partikler– la oss tenke på elektroner– ved å ta utgangspunkt i bølgefunksjonen for elektromagnetiske felt, generalisere denne og så avslutte med å ta den ikke-relativistiske grensen. Dette leder oss til Schrödingerligningen. Vi skal dermed følge omtrent den samme konseptuelle ruten som Erwin Schrödinger selv brukte da han satte seg fore å komme frem til en bølgefunksjon som beskriver materielle partikler. Som han, har vi allerede et utgangspunkt der vi vil tilordne materielle partikler en bølgeamplitude, som vi kan kalle ψ . Dobbeltspalte-eksperimentet indikerer allerede at sannsynligheten for å finne en partikkel oppfører seg som kvadratet av en additiv amplitude, altså $|\psi|^2$. Vi skal tolke denne som en sannsynlighetstetthet og starte med å beskrive ting i en dimensjon siden generaliseringen til flere dimensjoner er ganske liketil. Om vi innfører koordinaten x , vil altså sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x + dx$ være $|\psi|^2 dx$, og siden vi er sikre på å finne partikkelen ett eller annet sted må

$$\int dx |\psi|^2 = 1, \quad (4.12)$$

som vil si at sannsynligheten er normalisert⁴.

For fotoner er det tilsvarende. Vi vet at antallet per volum, eller tettheten av dem, er proporsjonal med energitettheten, som i sin tur er proporsjonal med kvadratet av det elektriske feltet, $E^2(x, t)$. Så, også i dette tilfellet er det en amplitude som vi må kvadrere for å få sannsynlighetstettheten for partiklene. Det elektriske feltet er beskrevet av Maxwells ligninger, som i det frie, kildeløse rom gir opphav til bølge ligningen

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) E(x, t) = 0 \quad (4.13)$$

der c er lyshastigheten. Denne ligningen har planbølgeløsninger av formen $e^{i(kx - \omega t)}$, der $\omega = 2\pi f$ er sirkel-frekvensen og $k = 2\pi/\lambda$ bølgetallet til bølgen. Vi husker at eksperimentene med den fotoelektriske effekt viste at fotonenergien kunne skrives $\epsilon = \hbar\omega$, og eksperimentene med Compton-spredning ga de Broglie grunnlaget for å tilordne fotonene bevegelsesmengden $p = h/\lambda = \hbar k$. Disse indentifikasjonene gjør det mulig å skrive planbølgeløsningen som

$$E(x, t) = E_0 e^{i(kx - \omega t)} = E_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - \epsilon t)}, \quad (4.14)$$

som ved innsetting i ligning (4.13) gir

$$\frac{E_0}{\hbar} (\epsilon^2 - (pc)^2) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \epsilon t)} = 0, \quad (4.15)$$

eller, med andre ord $\epsilon^2 - (pc)^2 = 0$. Dette er den kjente relativistiske sammenhengen mellom impuls og energi for en partikkel uten hvilemasse. Som vi vet, kan denne relasjonen utvides til å holde for partikler med endelig hvilemasse ved å legge til massetermen $(mc^2)^2$ på høyresiden. Alternativt kan vi oppnå det samme gjennom å gjøre erstatningen

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{(mc^2)^2}{\hbar^2} - c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (4.16)$$

i ligning (4.13). Dette resulterer i den såkalte Klein-Gordon ligningen

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{(mc^2)^2}{\hbar^2} - c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Phi(x, t) = 0, \quad (4.17)$$

som fortsatt har løsninger på formen $\Phi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - \epsilon t)}$, men nå med den relativistiske energien $\epsilon^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2$. I ligningen ovenfor har vi erstattet det elektriske feltet med en bølgefunksjon $\Phi(x, t)$, som beskriver massive relativistiske partikler.

I den ikke-relativistiske grensen, som er aktuell for energier på størrelse med ioniseringsenergien til atomer, kan det relativistiske energiuttrykket rekkeutvikles i den lille størrelsen $pc/(mc^2)$

$$\epsilon = mc^2 \left(1 + \frac{(pc)^2}{(mc^2)^2} \right)^{1/2} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} \quad (4.18)$$

⁴Det oppstår et problem, som krever en modifikasjon av dette normaliseringskravet, når partikkelen ikke er begrenset til en endelig del av rommet. Men dette problemet er ikke av fundamental art og endrer ikke på Schrödingerligningens form.

hvor mc^2 er den konstante hvileenergien og $E_k = p^2/2m$ er den klassiske kinetiske energien. Om vi nå ønsker en ikke-relativistisk bølge-ligning, kan det være en god ide å skille ut den relativistiske faktoren $e^{-\frac{i}{\hbar}(mc^2t)}$ og skrive planbølge-løsningen som

$$\Phi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}\Phi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - E_k t)} = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}\psi(x, t) \quad (4.19)$$

der $\psi(x, t) \sim e^{\frac{i}{\hbar}(px - E_k t)}$ ikke lenger inneholder c . Legg merke til at siden $e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}$ er en ren fasefaktor, påvirker den ikke sannsynlighetstettheten, dvs. $|\Phi|^2 = |\psi|^2$.

Hva er så ligningen som tilfredstilles av $\psi(x, t)$? For å svare på dette regner vi først ut

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}mc^2\psi \right) e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t} \quad (4.20)$$

og ved hjelp av dette resultatet finner vi lett

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{(mc^2)^2}{\hbar^2} \right) \Phi = \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{2imc^2}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(mc^2t)}, \quad (4.21)$$

som ved innsetting i ligning (4.17) gir

$$\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{2imc^2}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} - c^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) = 0. \quad (4.22)$$

Dersom man bruker tidsavhengigheten $\psi(x, t) \sim e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$ til å erstatte $\partial/\partial t$ med $-iE_k/\hbar$ i denne ligningen ser vi at de to første termene tar formen

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{2imc^2}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{mc^2}{\hbar^2} \left(\frac{E_k^2}{mc^2} - 2E_k \right) \psi, \quad (4.23)$$

og siden vi er i den ikke-relativistiske grensen der $E_k/(mc^2) \ll 1$, er den første termen neglisjerbar i forhold til den siste og kan droppes. Dette svarer til å droppe $\partial^2 \psi / \partial t^2$ termen i ligning (4.22). Om vi gjør dette og multipliserer ligning (4.22) med $\hbar^2/(2mc^2)$ står vi igjen med

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (4.24)$$

som er første orden i den tidsderiverte. Dette er Schrödingerligningen for en fri partikkel.

Men hva om partikkelen ikke er fri, men befinner seg i et potensial? Den nødvendige generaliseringen kan motiveres gjennom følgende observasjon: Siden $-i\hbar \partial \psi / \partial x = p\psi$ for en planbølge, kan høyresiden i ligningen ovenfor identifiseres som $H\psi(x, t) = p^2/(2m)\psi(x, t)$ der $p^2/(2m)$ er energien til en fri partikkel og $H = p^2/(2m)$ er Hamiltonfunksjonen. Om partikkelen befinner seg i et potensial $V(x)$, blir energien i stedet $H = p^2/(2m) + V(x)$. Den tilsvarende generaliseringen av ligning (4.24) blir da

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t). \quad (4.25)$$

som er den generelle Schrödinger ligningen i én dimensjon. Nå kan vi ikke lenger anta at løsningen er en planbølge, men må generalisere også statusen til

bølgefunksjonen $\psi(x, t)$ til å være løsningen av ligning (4.25) med de aktuelle startbetingelsene. Disse gis gjerne ved å spesifisere $\psi(x, 0)$ som samtidig gir den initiale sannsynlighetsfordelingen $|\psi(x, 0)|^2$.

Vi har hele tiden antatt at partikkelen beveger seg langs en linje i én dimensjon, men generaliseringen til flere dimensjoner er umiddelbart gitt ved å erstatningen $-\hbar\partial/\partial x \rightarrow -\hbar\nabla$ og ved å la potensialet avhenge av den romlig vektoren \mathbf{x} . Da kan vi skrive

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}, t). \quad (4.26)$$

som er vårt endelige resultat. Denne ligningen danner blant annet grunnlaget for å bestemme bølgefunksjonen og de tillatte energinivåene i hydrogenatomet og andre bundne kvantetilstander. Disse energinivåene har, sammen med mange andre konsekvenser av Schrödinger ligningen, blitt eksperimentelt verifisert.

4.5 Gruppe- og fasehastighet

Planbølgeløsningene i siste kapittel har en helt skarp definert bevegelsesmengde p for partikkelen. Vi skal se at dette svarer til at de har en udefinert posisjon. Kvalitativt kan vi forstå dette allerede nå ved å sammenligne med en hvilken som helst kjent bølgebevegelse, si en bølge på vann. Dersom bølgen er uendelig lang og har mange bølgetopper med samme separasjon, kan vi enkelt fastslå bølgelengden. I følge de Broglies relasjon $p = h/\lambda$ kjenner vi tilsvarende impulsen. Men dersom bølgen har form som en enkelt hump, som en Gauss-funksjon si, kan den være vel lokalisert i rommet, men det er vanskeligere å tilordne den en enkelt bølgelengde. Vi skal returnere til dette fenomenet, som gir opphav til Heisenbergs usikkerhetsrelasjon mellom usikkerheten i impuls og posisjon.

For å forstå hvordan bølgebeskrivelsen henger sammen med partikkelbeskrivelsen skal vi studere en bølge, som er sammensatt av flere bølger med litt ulik bølgelengde, en såkalt bølgepakke. Siden Schrödingerligningen er linær står vi nemlig fritt til å addere flere planbølger $e^{i\omega t - kx}$, summen vil fortsatt være en løsning av ligningen. For dette formål antar vi at vi har et kontinuerlig spekter av k -verdier og at det er en k -avhengig amplitude. Denne amplituden tar form av en tetthet $Q(k)$ slik at bølgepakken kan skrives som et integral

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk Q(k) e^{i(\omega(k)t - kx)} \quad (4.27)$$

der vi har uttrykt at ω generelt er k -avhengig. Det er lett å sjekke at uttrykket ovenfor fortsatt er en løsning av Schrödingerligningen ved å anvende operatoren

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (4.28)$$

på det. Denne operatoren vil passere både k -integralet og Q -faktoren og virke direkte på planbølgen, som vi allerede kjenner som en løsning.

Dersom $Q(k)$ er sterk sentrert rundt en middelvei k_0 , kan vi rekkeutvikle frekvensen $\omega(k) \approx \omega(k_0) + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0)$, slik at den blir en linær funksjon av k . Det er praktisk å representere $Q(k)$ som en Gaussfunksjon av formen

$$Q(k) = e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta k^2}} \quad (4.29)$$

der Δk bestemmer spredningen i k verdier: Om $(k - k_0) \gg \Delta k$ vil $Q(k) \approx 0$. Med dette uttrykket kan ligning (4.27) skrives som integralet

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta k^2}} e^{i(\omega(k)t - kx)} \quad (4.30)$$

$$\approx \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta k^2} + i(\omega(k_0)t + d\omega/dk(k-k_0)t - kx)}. \quad (4.31)$$

Ved å innføre substituasjonen $k' = k - k_0$ og ordne termer kan dette skrives

$$\psi(x, t) \approx e^{i(\omega_0 t - k_0 x)} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{-\frac{k'^2}{2\Delta k^2} + ik'(\frac{d\omega}{dk}t - x)} \quad (4.32)$$

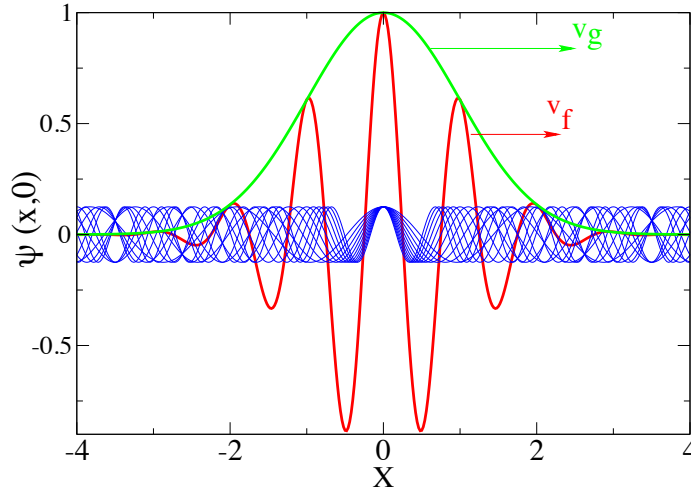
hvor vi har trukket den k -uavhengige termen $e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}$ utenfor og innført $\omega_0 = \omega(k_0)$. Dette integralet er det kjente Gauss-integralet

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2 + bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \quad (4.33)$$

med $a = 1/(2\Delta k^2)$ og $b = -i(x - d\omega/dk t)$. Innsetting gir da

$$\psi(x, t) = \sqrt{2\pi\Delta k^2} e^{i(\omega_0 t - k_0 x)} e^{-\frac{\Delta k^2}{2}(x - \frac{d\omega}{dk}t)^2}. \quad (4.34)$$

Dette er en bølgepakke. Den består av to tidsavhengige funksjoner, en planbølge som avhenger av $\omega_0 t - k_0 x \sim x - v_f t$ der $v_f = \omega_0/k_0$ og en Gaussfunksjon som avhenger av $x - \frac{d\omega}{dk}t = x - v_g t$, der $v_g = \frac{d\omega}{dk}$. Planbølgen forplanter seg med den såkalte fasehastigheten v_f , mens Gaussfunksjon forflytter seg i samme retning med den såkalte gruppehastigheten v_g . Dette er illustrert i figur 4.7, som også



Figur 4.7: Summen av enkeltbølger slik den er gitt i ligning (4.34) og deres omhulningskurve, Gaussfunksjonen i grønt. Selve bølgepakken er rød og enkeltbølgene den består av, blå. Omhulningskurven beveger seg med gruppehastigheten v_g mens de blå og rød bølgetoppene beveger seg med fasehastigheten v_f .

viser enkelte av planbølgene i blått. Disse forplanter seg også med hastigheten v_f . Legg merke til at bare i midten der de er i fase forsterker de hverandre og gir opphav til en betydelig sum. Utenfor bølgepakkens utstrekning, som er gitt ved bredden $\Delta x \sim 1/\Delta k$, kansellerer bidragen ved destruktiv interferens. Dette medfører at $\psi(x, t)$ nå er normaliserbar og tilfredstiller kravet i ligning (4.12). Det er bare i grensetilfellet at $\Delta k \rightarrow 0$ at normaliserbarheten faller bort. Det er bare innenfor området hvor Gausskurven har betydelige verdier at det er betydelig sannsynlighet for å finne partikkelen, og jo større spredningen er i k , jo skarpere blir Gauss-funksjonen.

Dette er uttrykk for en større og dypere sammenheng mellom uskarphet i bevegelsesmengde og uskarphet i posisjon: Fra uttrykket for $Q(k)$ ser vi at spredningen i k er omtrent Δk . Siden relasjonen for de Broglie bølgelengden $\lambda = h/p$ også kan skrives $k = p/h$, ser vi at en uskarphet i k medfører en uskarphet i p . Om vi også sammenligner med bølgepakken i ligning (4.34), som viser at spredningen i posisjon er $\Delta x \sim 1/\Delta k$ og multipliserer med $\Delta p = \hbar \Delta k$ får vi relasjonen

$$\Delta p \Delta x \approx \hbar. \quad (4.35)$$

Om vi bare bytter ut ' \approx ' med ' \geq ', er dette Heisenbergs berømte usikkerhetsrelasjon som vi nevnte innledningsvis. Det viser seg nemlig at \hbar , eller nærmere bestemt $\hbar/2$, er den nedre grensen for $\Delta p \Delta x$. Den sier at usikkerhet i posisjon er omvendt proporsjonal med usikkerheten i bevegelsesmengde. Riktignok har vi ved å identifisere Δk med en usikkerhet i faktiske målinger av p gjort en antagelse om at $Q(k)$ faktisk svarer til en sannsynlighetsfordeling over mange skarpe k -verdier, som kunne resultere fra målinger av bevegelsesmengden. At dette faktisk er en riktig tolkning skal vi komme tilbake til. Men uskarphetsrelasjonen stammer uansett fra det bølgefenomen at økt spredning av bølgelengder gir redusert spredning i bølge-posisjon.

Når $\omega = kv_f$ er gruppe- og fasehastighet like. Dette er tilfellet blant annet for lydølger og elektromagnetiske bølger i vakuum, men ikke for bølger på vann eller altså løsninger av Schrödingerligningen der $\hbar\omega = (\hbar k)^2/(2m)$ for en planbølge. Dette medfører at

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{mv^2/2}{mv} = \frac{v}{2} \quad (4.36)$$

der v er partikkelhastigheten. Men siden $\omega \sim k^2$ er $\frac{d\omega}{dk} = 2\omega/k$, og vi ser at $v_g = v$, dvs. at partikkelhastigheten samsvarer med bølgepakkens gruppehastighet. Dette gjelder generelt. Også for vannbølger forflytter energien seg med bølgepakken, som beveger seg med gruppehastigheten.

4.6 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. Bli 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

$$\lambda_{\text{stein}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = 6.6 \times 10^{-35} \text{ m}. \quad (4.37)$$

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

$$\lambda_{e^-} = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{2m_e c^2 E_{\text{kin}}}} = 1.2 \times 10^{-10} \text{ m}, \quad (4.38)$$

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.

4.7 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

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

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.

- 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.
- Et elektron med energi 10 keV er lokalisert i et område med utstrekning 0.1 nm. Hva blir uskarpheten i bevegelsesmengden til elektronet?
- Hva blir uskarpheten i elektronets energi?
- 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.

- 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.
- Gjør kort rede for de Broglies ideer om materiebølger og sett opp uttrykket for de Broglie bølgelengden for en materiell partikkel med bevegelsesmengde p .
- 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

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

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

Del II

KVANTEMETKANIKK

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.¹ Man bør merke seg at disse postulatene ikke har latt seg bevise fra noe mer grunnleggende (i alle fall ikke i alle mulige tilfeller), og at de er, som f.eks. aksiomatiseringen av de reelle tall er i matematisk analyse, de grunnleggende byggestener som vi utleder kvantemekanikken fra, som et selvkonsistent matematisk system. Hvorvidt dette har noe med virkeligheten å gjøre, kan man bare finne ved å sammenligne målinger med kvantemekanikkens forutsigelser.

5.1 Tilstander

I kvantemekanikken beskriver vi fysiske systemer ved hjelp av 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. For eksempel vil vi gjerne

¹Vi vil her holde oss til én romdimensjon for å forenkle skrivearbeidet.

gjøre dette for å normere bølgefunksjonen slik at

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

Dersom dette komplekse tallet z har lengde 1, det vil si at vi kan skrive det ved hjelp av Eulers formel som $z = e^{i\theta}$ hvor θ er et reelt tall, så kalles det en **fase**, og tilsvarer en rotasjon av Ψ på θ radianer i det komplekse planet.

2. Løsningene av SL, tilstandene Ψ , kan beskrives som abstrakte vektorer i et kompleks (uendeligdimensjonalt) indreproduktrom, med indreproduktet² mellom to tilstander $|\Psi_i\rangle$ og $|\Psi_j\rangle$ 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.

Som for alle vektorrom har vi et valg når det gjelder hvilken basis vi skal bruke. I FYS2140 er vårt valg av basis, når vi bruker bølgefunksjonsbeskrivelsen, den såkalte **koordinatbasisen**, hvor basisvektorene er gitt ved deltafunksjonen $|x\rangle = \delta(x - y)$. Dette er en uendelig og kontinuerlig basis hvor bølgefunksjonen er gitt fra projeksjonen av tilstanden på basisvektorene³

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

3. Det finnes alternativer til denne basisen som vi ikke skal gå så mye nærmere inn på i dette kurset:⁴ eksempel er den såkalte **bevegelsesmengdebasisen** og **energibasisen**. I bevegelsesmengdebasisen er bølgefunksjonen en funksjon av tid og bevegelsesmengde, $\Phi(p, t)$.⁵ Denne er gitt av en **Fouriertransformasjon** av bølgefunksjonen i koordinatbasisen

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx. \quad (5.6)$$

En invers Fouriertransformasjon gir tilbake bølgefunksjonen i koordinatbasis:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p, t) dp. \quad (5.7)$$

Du kan finne Fouriertransformasjoner for de fleste enkle funksjoner i Rottmann, men merk deg at Rottmann bruker en irriterende definisjon som ikke deler retteferdig på 2π mellom transformasjonen og den inverse. Den statistiske tolkningen av bevegelsesmengdebasisen er at $|\Phi(p, y)|^2 dp$ gir sannsynligheten for å finne en partikkel med bevegelsesmengde i intervallet $[p, p + dp]$ ved tiden t .

²Vi minner om at indreprodukt er en generalisering av det vanlige skalarproduktet mellom to vektorer.

³Akkurat som du kan finne lengden av en vanlig romvektor langs en basisvektor ved å ta skalarproduktet mellom de to vektorene.

⁴Men deilig mye mer om dette i FYS3110 Kvantemekanikk.

⁵Vi bruker Φ her istedet for Ψ bare for å huske at vi er i en annen basis.

5.2 Operatorer

Kvantemekanikken knytter det vi måler på i eksperimenter, observabler, til 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 når de virker på tilstander, det vil si at de virker på følgende måte:

$$\hat{Q}(a\psi_i + b\psi_j) = a\hat{Q}\psi_i + b\hat{Q}\psi_j, \quad (5.8)$$

eller det samme sagt ved hjelp av Dirac-notasjon

$$\hat{Q}(a|\psi_i\rangle + b|\psi_j\rangle) = a\hat{Q}|\psi_i\rangle + b\hat{Q}|\psi_j\rangle. \quad (5.9)$$

2. At operatorene er hermitiske betyr at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \hat{Q}\psi_i dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{Q}\psi_i)^* \psi_i dx, \quad (5.10)$$

eller, med Dirac-notasjon,

$$\langle \psi_i | \hat{Q} \psi_i \rangle = \langle \hat{Q} \psi_i | \psi_i \rangle. \quad (5.11)$$

Merk at dette er ekvivalent med at

$$\langle \psi_i | \hat{Q} \psi_j \rangle = \langle \hat{Q} \psi_i | \psi_j \rangle. \quad (5.12)$$

3. De **kanoniske variable** x og p har operatorer $\hat{x} = x$ og $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ i koordinatbasisen. 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 eksempelet på operatorer henter vi fra selve Schrödingerligningen i Postulat 1:

$$\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi, \quad (5.13)$$

som er en operatorligning hvor $\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ 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} :

$$\hat{Q}|\psi_n\rangle = q_n|\psi_n\rangle, \quad (5.15)$$

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:

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi dx. \quad (5.16)$$

For et kontinuerlig spektrum så er de tilsvarende relasjonene:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) |\psi(k)\rangle dk \quad (5.17)$$

og

$$\phi(k) = \langle \psi(k) | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(k) \psi dx, \quad (5.18)$$

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

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

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} [\hat{A}, \hat{B}] \right)^2. \quad (5.19)$$

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

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx} = p\psi. \quad (5.20)$$

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

$$\hat{x}\psi = x e^{ikx}, \quad (5.21)$$

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

⁶Dessverre er det ikke slik at om du har en egenfunksjon til \hat{A} så er den automatisk en egenfunksjon til \hat{B} dersom de to kommuterer. Alt kompatible observable granterer er at det finnes slike felles egenfunksjoner. Det du ofte må gjøre er å ta ett sett med egenfunksjoner for den ene operatoren og skrive lineærkombinasjoner av disse for å finnes det felles settet.

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:

$$\langle Q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q} \psi dx. \quad (5.23)$$

1. **Variansen** til Q defineres som

$$\sigma_Q^2 \equiv \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2. \quad (5.24)$$

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):

$$\hat{H}\Psi(x, t) = \hat{E}\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right) = E\Psi(x, t) \quad (5.25)$$

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), det vil si at en vilkårlig tilstand $|\psi\rangle$ kan skrives

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle. \quad (5.27)$$

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

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k) |\psi(k)\rangle dk. \quad (5.28)$$

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

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (5.29)$$

hvor

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{for } n = m \\ 0 & \text{for } n \neq m \end{cases}, \quad (5.30)$$

er det såkalte Kroneckerdeltaet, for kontinuerlige egenverdier er settet **Diracortonormalt**, det vil si

$$\langle \psi(k) | \psi(k') \rangle = \delta(k - k'). \quad (5.31)$$

Kapittel 6

Spinn

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

6.1 Stern-Gerlach-eksperimentet

Eksperimentet som først ble utført av Otto Stern og Walther Gerlach i 1922 [3] var egentlig ment å teste hypotesen i Bohrs atommodell om at angulærmomentet L er kvantisert. Sølvatomer ble sendt gjennom et inhomogent magnetfelt, altså et magnetfelt som ikke er like sterkt over alt, hvor tanken var at kvantiseringen burde gi et bestemt mønster etter at atomene hadde passert feltet. Eksperimentet er illustrert i figur 6.1. Sølv ble brukt, fordi dette atomet har et løst bundet ytre elektron som oppfører seg—er i en tilstand bør vi kanskje si som kvantemekanikere—som om det er i et slags overvektig hydrogenatom, med kjernen og de 46 andre elektronene innenfor som har en totalladning på $+e$ og en masse på omlag 47 ganger hydrogenatomet. Forsøket ble senere gjentatt med ordentlige hydrogenatomer i 1927, men dette er teknisk mer utfordrende.

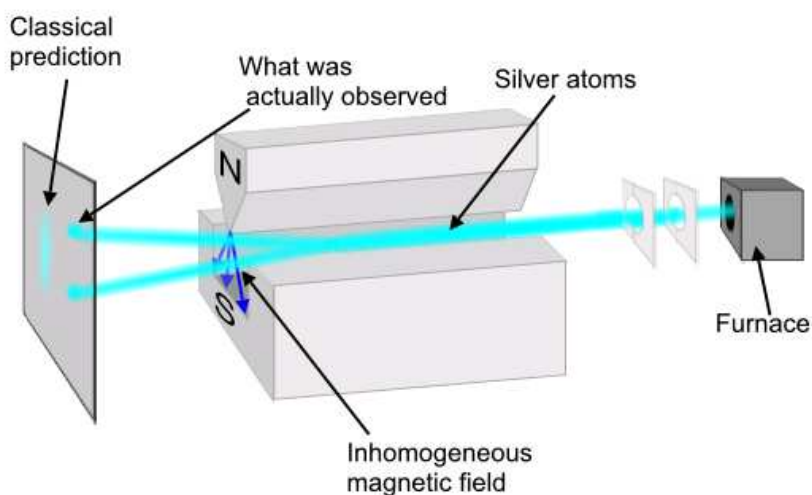
Som vi så da vi løste Schrödingerligningen for sentralsymmetriske potensial i tre dimensjoner, følger det naturlig av formalismen at angulærmomentet for dette elektronet må være kvantisert, med størrelsen på angulærmomentet

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

og størrelsen på komponenten langs z -aksen

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

der $l = 0, 1, \dots$, og $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Det er da kan spørre seg, er om denne kvantiseringen kan observeres direkte i et eksperiment. Ideen i Stern-Gerlach-eksperimentet er at et hydrogenatom (eller sølvatomet som stand-in for hydrogenatomet) må ha et magnetisk dipolmoment som er direkte relatert til elektronets angulærmoment, og dermed er 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



Figur 6.1: Skisse av Stern-Gerlach-eksperimentet. Fra [4].

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 bieffekt av eksperimentet.

For å beskrive det magnetiske dipolmomentet til elektronet la oss for enkelhets skyld se på 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. Vi vet fra FYS1120 Elektromagnetisme at dette gir et dipolmomentet som etter høyrehåndsregelen peker 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 for en sirkelbevegelse. 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 er kjent som

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

Er feltet inhomogent, det vil si har forskjellig styrke ulike steder i rommet, påvirkes dipolen av en kraft¹

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

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.

¹Om feltet er homogent er kraften null fordi de deriverte av potensialet er null.

6.2 Den normale Zeeman-effekt

Ligning (6.5) gir oss 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 , det vil si

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

der $Y_{lm}(\phi, \theta)$ er de sfæriske harmoniske. Grunnen er at løsningene (6.8) blant annet 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 energieigenverdiene 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 til 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. For eksempel 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 én.² 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.

²Generelt 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.

6.3 Stern-Gerlach-eksperimentet og oppdagelsen av spinn

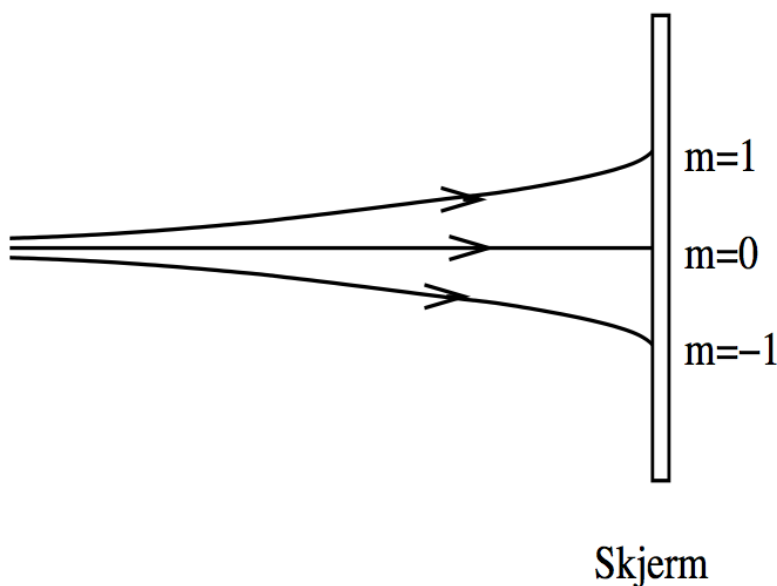
Ideen bak Stern-Gerlach-eksperimentet var som sagt å benytte seg av avbøyningen en magnetisk dipol opplever i et inhomogent magnetfelt for å skille de ulike m -tilstandene og observere kvantiseringen av angulærmoment. Antar vi at feltet er parallelt med z -aksen (dvs. $B_x = B_y = 0$) og at det er inhomogent 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 6.2.



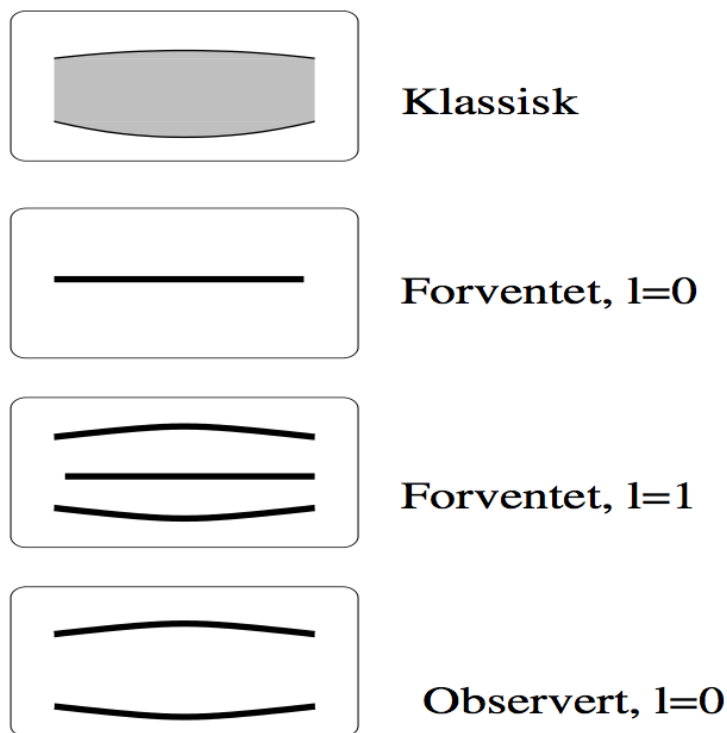
Figur 6.2: Skisse av resultatet av Stern-Gerlach-eksperimentet. Atomene avbøyes når de kommer inn i området med inhomogent magnetfelt. Kraften de påvirkes av, avhenger av verdien på L_z .

Figur 6.3 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. én 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 én 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 engang inn i vårt mønster med $2l + 1$ stykker. Dere har sikkert gjettet 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 **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 egenspinn er en ren kvantemekanisk effekt som ikke har noen analogi i klassisk mekanikk.



Figur 6.3: 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 $l = 0$.

Som klassisk analogi for å forestille seg egenspinn, 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 spinn som sagt ikke “bremset 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.

For alle partikler med spinn har vi kvantiseringsbetingelsen

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

Igen 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 analogi med $L_z = m\hbar$ 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 tre 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 .³ En vanlig måte å skrive dette på (notasjon) er

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

Første del her, ψ_{nlm} , omtaler vi som **romdelen** av bølgefunksjonen. Andre del, χ_{m_s} , er **spinddelen**. De “romlige” operatorene (\hat{H} , \hat{p} , \hat{L} , ...) virker kun på romdelen, mens spinnoperatorene bare virker på spinddelen,

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

Men hva er χ_{m_s} og spinnoperatorene? Dette spørsmålet vil vi komme tilbake til i FYS3110 i grusom detalj. Nå vil vi bare nevne at den enkleste måten å skrive tilstandene på, og operatorene som virker på, en spinn-1/2 partikkel—den såkalte fundamentale representasjonen—er å bruke todimensjonale vektorer for tilstandene

$$\chi_{\frac{1}{2}} \equiv \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \chi_{-\frac{1}{2}} \equiv \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.22)$$

og matriser for operatorene

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.23)$$

Sjekk nå gjerne at egenverdiligningene i (6.21) holder i spesialtilfellet $s = \frac{1}{2}$.

Du lurer kanskje på hvordan normering og forventningsverdier skal virke nå som bølgefunksjonene i (6.20) har fått en vektordel? Svaret er: på enklest mulige måte. Vi definerer sannsynlighetstettheten til å være

$$|\psi_{nlmm_s}|^2 \equiv \psi_{nlmm_s}^\dagger \psi_{nlmm_s} = |\psi_{nlm}|^2 \chi_{m_s}^\dagger \chi_{m_s}, \quad (6.24)$$

hvor $\chi^\dagger \equiv (\chi^T)^*$ er den såkalte **hermitiske konjugerte**, altså både komplekskonjugering og transponering. Denne definisjonen følger definisjonen for skalarprodukt for komplekse vektorer som vi finner i lineæralgebra; vi ser altså på

³Husk at $s = 1/2$ er en fast egenskap ved elektronet, så den trenger vi ikke oppgi eksplisitt hver gang.

sannsynlighetstettheten for en tilstand som skalarproduktet av tilstanden med seg selv, noe som alltid gir et reelt tall ut av en kompleks vektor. På samme måte er forventningsverdien til en operator \hat{A} , som nå generelt er en matrise, gitt ved

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{nlmm_s}^\dagger \hat{A} \psi_{nlmm_s} dx. \quad (6.25)$$

6.7 Spinn-bane-kobling

Til nå har vi snakket om elektronets angulærmoment \vec{L} og dets egenspinn \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:⁴ Vi tenker oss en klassisk variant av hydrogenatomet der elektronet går i sirkelbane rundt kjernen med et angulærmoment L . Men sett fra elektronets ståsted er det *kjernen* som går rundt elektronet. Elektronet “opplever” altså kjernen som en sirkulær strømsløyfe som da setter opp et *internt magnetfelt*

$$B_z = \frac{\mu_0 I}{2r}. \quad (6.26)$$

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

$$I = \frac{e}{2\pi m_e r^2} L_z, \quad (6.27)$$

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

$$\vec{B}_{\text{int}} = \frac{\mu_0 e}{4\pi m_e r^3} \vec{L}. \quad (6.28)$$

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 (spinn), og ifølge (5) blir den potensielle energien

$$U_{LS} = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}_{\text{int}} = \alpha \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad (6.29)$$

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,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (6.30)$$

⁴Spinn-bane-koblingen er en relativistisk korreksjon og kan utledes formelt vha. relativistisk kvantemekanikk. Men dette er utenfor pensum i FYS2140.

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 ett spinn og ett 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:

$$J = |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad j = |l-s|, |l-s|+1, \dots, l+s \quad (6.31)$$

og

$$J_z = \hbar m_j, \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j. \quad (6.32)$$

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 (6.31).

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, så vend tilbake til dem etter at vi har gjennomgått topartikkelbølgefunksjoner. 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:

$$\{\downarrow\downarrow\}, \{\downarrow\uparrow\}, \{\uparrow\downarrow\}, \{\uparrow\uparrow\}, \quad (6.33)$$

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 (6.33), 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:

$$\begin{aligned} &\{\downarrow\downarrow\} \\ &\{\downarrow\uparrow\} + \{\uparrow\downarrow\} \\ &\{\uparrow\uparrow\}. \end{aligned} \quad (6.34)$$

Dette settet med symmetriske kombinasjoner av to spinn, (6.34), kalles gjerne for en **triplet**. På lignende måte kan vi lage oss en antisymmetrisk kombinasjon,

$$\{\downarrow\uparrow\} - \{\uparrow\downarrow\}. \quad (6.35)$$

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 (6.31) 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. Et 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 *polar*: 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 elektron og danner 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 Coulombtilrekningen 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 er derfor 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 inducere et dipolmoment i et ellers ikke-polart molekyl, hvilket igjen fører til en elektrostatiske 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

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

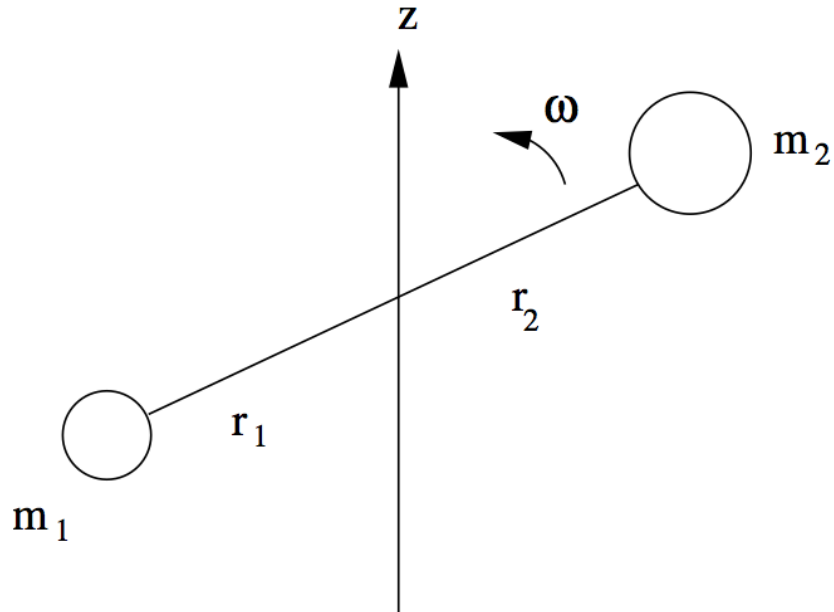
der I er treghetsmomentet rundt z -aksen. Dermed kan den kinetiske energien uttrykkes som

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

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

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

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 .

slik at treghetsmomentet blir

$$\begin{aligned}
 I_{\text{CM}} &= m_1 \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right)^{-2} R_0^2 + m_2 \left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right)^{-2} R_0^2 \\
 &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} R_0^2 \\
 &\equiv \mu R_0^2,
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

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

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.

	Energi (E_R)
1	
5	30
4	20
3	12
2	6
1	2
0	0

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

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 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.

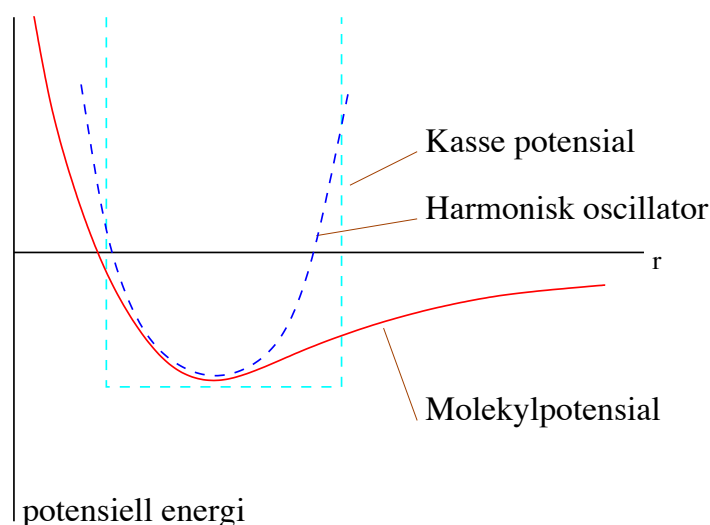
La oss nå se på vibrasjon. Figur 7.3 viser den typiske formen på det effektive potensialet mellom atomene i et diatomisk molekyl, dvs. den totale energien som funksjon av avstanden mellom atomkjernene. Vi ser at denne energien går mot uendelig for små avstander, dvs. at atomene opplever en sterk frastøtning 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 molekylaksen. 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. bindings-



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

styrke. Fra gjennomgangen av den harmoniske oscillator tidligere i semesteret vet vi at de tilhørende energinivåene er kvantisert,

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

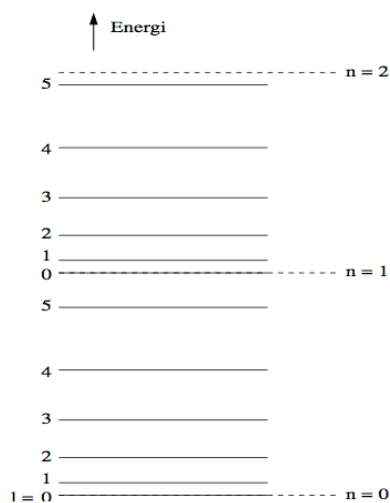
der n gjerne kalles *vibrasjonskvantetallet*. Vi merker oss at grunntilstandsenergien (for $n = 0$) ikke er lik null. Dette er en kvantemekanisk effekt: Nullpunkt-svibrasjoner er alltid til stede.

For å få et begrep om energiskalaen her, nevner jeg at $\hbar\omega$, dvs. energiforskjellen mellom to naborivåer 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*,

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



Figur 7.4: Skisse av rotasjons-vibrasjonsspektrum

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 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

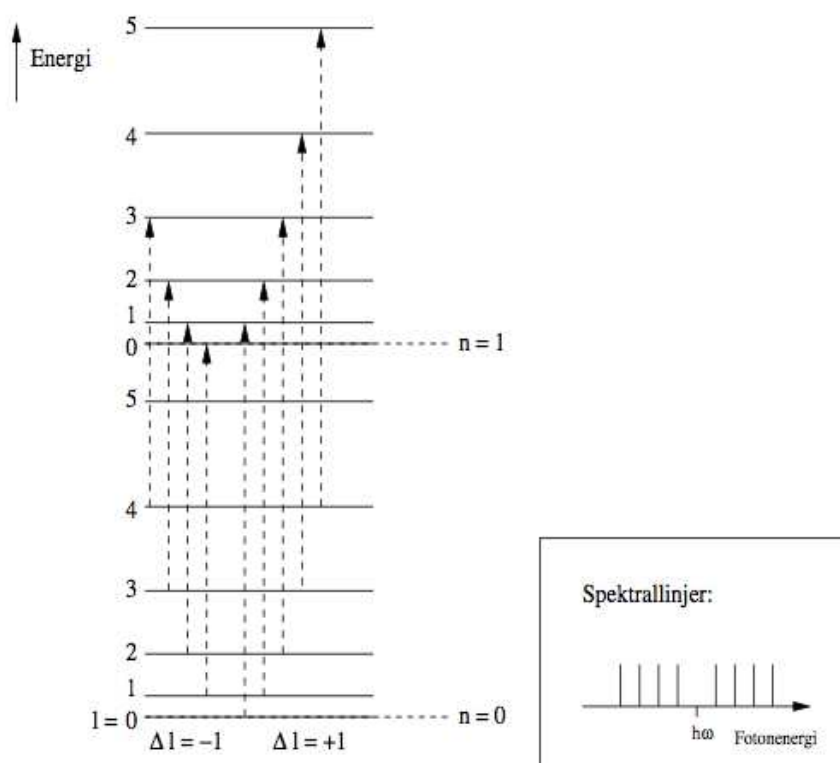
$$R_0 = \sqrt{\frac{I_{\text{CM}}}{\mu}} = 0.113 \text{ nm.} \quad (7.18)$$

Så bare ved å tittle 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 spintilstandene 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)

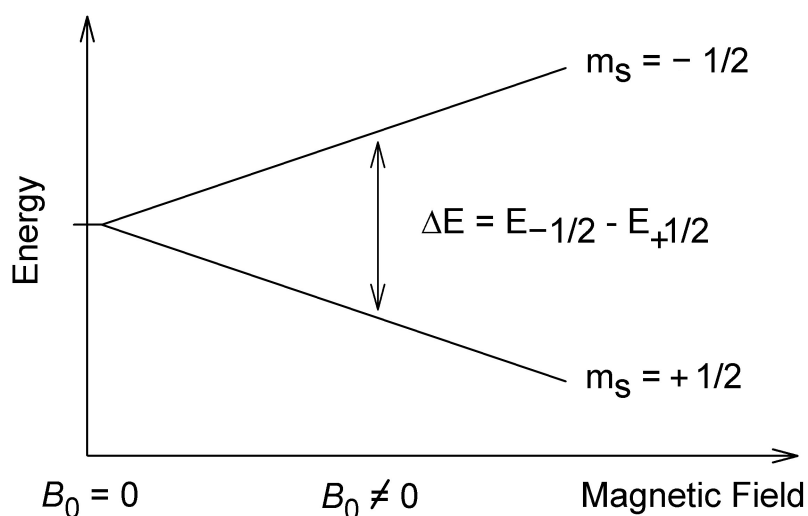
$$\Delta E = -\vec{\mu}_- \cdot \vec{B} - (-\vec{\mu}_+ \cdot \vec{B}) = \frac{g_p e}{2m_p} S_{+z} B_0 - \frac{g_p e}{2m_p} S_{-z} B_0 = \frac{g_p e \hbar}{2m_p} B_0, \quad (8.2)$$

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 elektriske ladning har motsatt fortegn.



Figur 8.1: Energisplittingen mellom de to spinnstilstandene til et proton i et eksternt magnetfelt B_0 . Tatt fra [5].

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 Röntgenenergi 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 spinnretningen til protonet. Når det sekundære feltet så skrur 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 spinnstilstandene oppnås forttere. 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 allerede 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 kapitlet 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 antipartikler 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 spinn- $\frac{1}{2}$, og kraftbærende partikler (rødt), som er bosoner med spinn-1. For fermionene eksisterer det også antipartikler med, så vidt vi vet, identiske egenskaper bortsett fra motsatt ladning(er).³

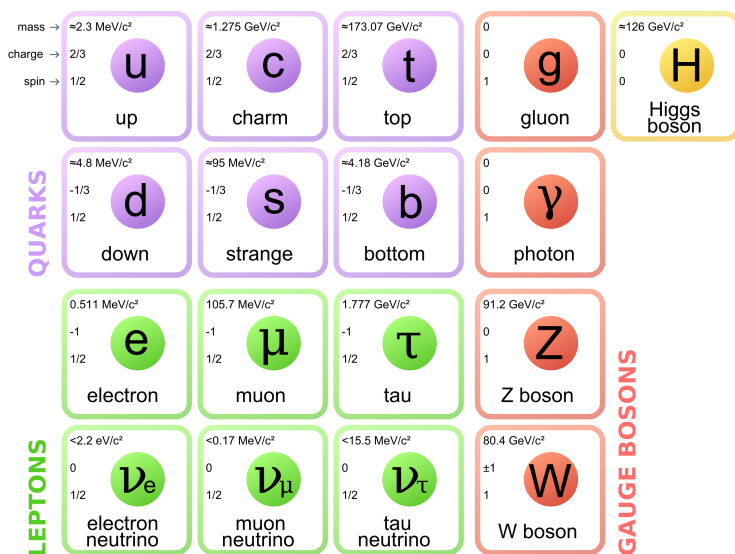
I tillegg til materiepartiklene og de kraftbærende partiklene forutsier standardmodellen også eksistensen av det såkalte Higgsbosonet, et spinn-0 boson uten elektrisk ladning, som er en konsekvens av Higgsmekanismen: opphavet til massen til elementærpartiklene i standardmodellen. Oppdagelsen av Higgspartikkelen ble annonsert 4. juli 2012 ved Large Hadron Collider eksperimentet ved CERN [7, 8].

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 antipartikler, 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 [6].

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 observabel.

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

Schrödingerligningen

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

hvor \hat{H}_0 er den vanlige Hamiltonoperatoren i én 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 operatoren 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 førsteordens differensialligningen har løsningen

$$\phi(t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}E_0t - \frac{\Gamma}{2}t} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}e^{-\frac{\Gamma}{2}t}. \quad (9.5)$$

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

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 Schrödingerligningen.

sted på x -aksen:

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

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 radioaktiv 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 Schrödingerligningen har også andre interessante egenskaper. Vi kan nemlig vise at tidsdelen i bølgefunksjonen gitt i (9.5) kan skrives som et integral over tidsdelen $e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$ i løsninger av den originale Schrödingerligningen, med \hat{H}_0 som Hamiltonoperator og E som energi:

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

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 absoluttverdikvadratet av faktoren før eksponentialfunksjonen i integralet (9.8). Denne faktoren er det vi kan kalle en bølgefunksjon i energibasisen. 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 partiklen. 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 $2.4952 \pm 0.0023 \text{ GeV}/c^2$ [9].

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 antikvark, 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 antipartikkeltilstand. 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 (antikvarker skrives med et strek eller "bar" på toppen). Disse oscillerer da frem og tilbake til antimesonene $\bar{K}^0 (\bar{d}s)$, $\bar{D}^0 (\bar{c}u)$, $\bar{B}_d^0 (\bar{b}d)$ 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 antipartikler (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 antimaterie 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 Schrödingerligningen

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

hvor vi i stedet 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 henfall 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

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

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.

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 operatører som skulle tilsvare observable at de måtte være hermitiske. Det viser seg at hermitiske Hamiltonoperatører som kan skrives 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 Hamiltonoperator, sammen med energien til partikelen. 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 antipartikler, 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.

Det andre tilleggskravet vi vil 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.

Til sammen 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 Schrödingerligningen:

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

hvor E_n er egenverdiene til Hamiltonoperatoren⁸

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

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 lineær algebra. Ligningen kan skrives som $(H - E_n I)\psi_n(0) = 0$, og vi finner den tilhørende karakteristiske ligningen ved å

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

⁸Merk at på grunn av muligheten for henfall er ikke egenverdiene reelle tall.

kreve at determinanten til $H - EI$ er null:

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

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

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

De tilhørende egenvektorene (egentilstandene) kan skrives som

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

$$\psi_2(0) \equiv K_2^0(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} K^0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{K}^0 \end{pmatrix} \right]. \quad (9.22)$$

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

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

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:

$$\begin{aligned}
\psi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} K_1^0 + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} K_2^0 \right) \\
&= \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} \right) \begin{pmatrix} K^0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&\quad + \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{K}^0 \end{pmatrix}. \quad (9.25)
\end{aligned}$$

Sannsynligheten $P_{K^0}(t)$ for å finne et K^0 -meson, og ikke \bar{K}^0 , ved en måling ved tiden t er da som vanlig gitt ved absoluttverdikvadratet av den numeriske

faktoren før tilstanden $(K^0, 0)$. Vi regner ut absoluttverdikvadratet:

$$\begin{aligned}
P_{K^0}(t) &= \frac{1}{4} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \right) \left(e^{\frac{i}{\hbar} E_1^* t} + e^{\frac{i}{\hbar} E_2^* t} \right) \\
&= \frac{1}{4} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} (E_1 - E_1^*) t} + e^{-\frac{i}{\hbar} (E_2 - E_1^*) t} + e^{-\frac{i}{\hbar} (E_1 - E_2^*) t} + e^{-\frac{i}{\hbar} (E_2 - E_2^*) t} \right) \\
&= \frac{1}{4} \left(e^{-(\Gamma + \Gamma_{12}) t} + e^{\frac{i}{\hbar} (2M_{12}) t} e^{-\Gamma t} + e^{-\frac{i}{\hbar} (2M_{12}) t} e^{-\Gamma t} + e^{-(\Gamma - \Gamma_{12}) t} \right) \\
&= \frac{1}{4} \left[e^{-(\Gamma + \Gamma_{12}) t} + e^{-(\Gamma - \Gamma_{12}) t} + e^{-\Gamma t} \left(e^{\frac{i}{\hbar} (2M_{12}) t} + e^{-\frac{i}{\hbar} (2M_{12}) t} \right) \right] \\
&= \frac{1}{4} \left[e^{-(\Gamma + \Gamma_{12}) t} + e^{-(\Gamma - \Gamma_{12}) t} + 2e^{-\Gamma t} \cos \left(\frac{2M_{12}}{\hbar} t \right) \right], \tag{9.26}
\end{aligned}$$

hvor vi har brukt at

$$E_1 - E_1^* = -\frac{i\hbar}{2} (\Gamma + \Gamma_{12}) - \frac{i\hbar}{2} (\Gamma + \Gamma_{12}) = -i\hbar (\Gamma + \Gamma_{12}), \tag{9.27}$$

$$E_2 - E_2^* = -\frac{i\hbar}{2} (\Gamma - \Gamma_{12}) - \frac{i\hbar}{2} (\Gamma - \Gamma_{12}) = -i\hbar (\Gamma - \Gamma_{12}), \tag{9.28}$$

$$\begin{aligned}
E_2 - E_1^* &= M - M_{12} - \frac{i\hbar}{2} (\Gamma - \Gamma_{12}) - \left(M + M_{12} + \frac{i\hbar}{2} (\Gamma + \Gamma_{12}) \right) \\
&= -2M_{12} - i\hbar\Gamma, \tag{9.29}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_1 - E_2^* &= M + M_{12} - \frac{i\hbar}{2} (\Gamma + \Gamma_{12}) - \left(M - M_{12} + \frac{i\hbar}{2} (\Gamma - \Gamma_{12}) \right) \\
&= 2M_{12} - i\hbar\Gamma. \tag{9.30}
\end{aligned}$$

Ekspontialkomponentene 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

$$T_{\text{osc.}} = \frac{2\pi\hbar}{\Delta E}, \tag{9.31}$$

hvor størrelsen $\Delta E = 2M_{12}$ er forskjellen i hvileenergi mellom egentilstandene.

Oscillasjonstiden er målt eksperimentelt til å være $T_{\text{osc.}} = 1.16$ ns. Dette kan sammenlignes med den gjennomsnittlige levetiden, som for K_S er $\tau_{K_S} = 8.95 \times 10^{-2}$ ns, og for K_L , $\tau_{K_S} = 51.1$ ns.⁹ De fleste K -mesoner vil altså henfalle før de oscillerer, men noen klarer 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

$$\Delta E = \frac{2\pi\hbar}{T_{\text{osc.}}} = \frac{2\pi\hbar c}{T_{\text{osc.}} c} = \frac{2\pi \cdot 193.7 \text{ MeV fm}}{1.16 \text{ ns} \cdot 3.00 \times 10^{14} \text{ fm/ns}} = 3.50 \times 10^{-12} \text{ MeV}, \tag{9.32}$$

en svært liten del av massen til et K -meson, som er målt til $m_K = 497.614 \text{ MeV}/c^2$.

⁹Derav navnene "K-short" og "K-long".

¹⁰Egentlig er M hvileenergi og ikke masse, derfor bruker vi enheten MeV i svaret.

9.4 Oscillasjon av nøytrinoer

Vi som bor her på jorda blir daglig truffet av milliarder på milliarder av nøytrinoer fra sola, helt uten å merke noe til de. Dette er i hovedsak elektronnøytrinoer, ν_e , som produseres i de fusjonsprosessene som driver sola, slik som for eksempel



hvor to protoner blir til et døytron (en kjerne med ett proton og ett nøytron), et positron og et nøytrino. Det var lenge et mysterium at vår beste modell for solas fysikk forutsa at vi burde bli truffet av en strøm (fluks) på $\phi = 5 \cdot 10^6$ nøytrinoer $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$, mens det vi måler er $\phi = (1.75 \pm 0.14) \cdot 10^6$ nøytrinoer $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. Det er altså som om vi har mistet noen nøytrinoer et sted.

Dette kan forklares ved 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 . Det kan beskrives med det samme kvantemekaniske maskineriet som for mesonene, men siden nøytrinoene, så vidt vi vet, ikke henfaller, så kan vi gjøre den forenklingen at matrisen $\Gamma = 0$.

Da nøytrinoene er relativistiske, må vi i tillegg bruke relativistisk kvantemekanikk, som vi ikke har vært inne på i dette kurset. Vi kan imidlertid gjøre et lite triks ved å rekkeutvikle energien E_i til et nøytrino av type i i bevegelsesmengden p_i ,

$$E_i = \sqrt{p_i^2 c^2 + m_i^2 c^4} = p_i c \sqrt{1 + \frac{m_i^2 c^4}{p_i^2 c^2}} \simeq p_i c + \frac{1}{2} \frac{m_i^2 c^4}{p_i c} + \dots \quad (9.34)$$

Hvis vi nå antar, som rimelig er, at nøytrinoene har mye mer bevegelsesmengde enn hvileenergi,¹¹ så er $p_i c \gg m_i c^2$ og dermed kan vi med god samvittighet sløyfe alle leddene som kommer etter det andre. Det vil si at forskjellen i energi mellom to nøytrinoer produsert med samme bevegelsesmengde, som skyldes forskjellen i masse, er

$$\Delta E = \frac{(m_i^2 - m_j^2)c^4}{2E}. \quad (9.35)$$

Vi kan nå gjenta den samme betraktningen som for mesoner over, men med tilstander som er vektorer med tre komponenter, en for hver av nøytrinoene. Riktignok med enda mer sølete algebra. Det vil igjen vise seg at sannsynligheten for å finne den sammen tilstanden, ν_e , etter en tid t , oscillerer som en cosinusfunksjon, se for eksempel ligning (9.26). Sannsynligheten for oscillasjon mellom to nøytrinoer med masse m_1 og m_2 er på formen

$$P(t) \propto \cos\left(\frac{\Delta E}{\hbar} t\right) = \cos\left(\frac{m_1^2 - m_2^2}{2\hbar E} t\right). \quad (9.36)$$

Underskuddet på elektronnøytrinoer fra sola gjør oss da i stand til å si at det må finnes en masseforskjell mellom to av nøytrinoene på $\Delta m^2 = m_1^2 - m_2^2 \sim 5 \times 10^{-5} \text{eV}^2$. Dersom nøytrinoene hadde lik masse ville det ikke vært noen oscillasjoner. Konklusjonen er at minst en av nøytrinoene har masse, selv om vi ikke vet hvilken, eller hva denne massen er.¹²

¹¹I prosessen (9.33) er gjennomsnittsennergien $E \simeq 0.4 \text{ MeV}$.

¹²Vi har senere målt en annen slik oscillasjon for nøytrinoer produsert i atmosfæren fra kosmisk stråling, som involverer forskjellige nøytrinoer, slik at vi vet at minst to av nøytrinoene har masse.

Bibliografi

- [1] Paul Davies og Julian Brown, *Superstrings: A theory of everything?*, Cambridge University Press (1988).
- [2] E.J.S. Fonseca, C.H. Monken og S. Pádua, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 2868.
- [3] W. Gerlach, O. Stern, Zeitschrift für Physik **9**: 349–352.
- [4] Stern-Gerlach experiment by Theresa Knott.
https://en.wikipedia.org/wiki/File:Stern-Gerlach_experiment.PNG
- [5] http://en.wikipedia.org/wiki/File:NMR_splitting.gif
- [6] http://en.wikipedia.org/wiki/File:Standard_Model_of_Elementary_Particles.svg
- [7] G. Aad *et al.* [ATLAS Collaboration], Phys. Lett. B **716** (2012) 1 [arXiv:1207.7214 [hep-ex]].
- [8] S. Chatrchyan *et al.* [CMS Collaboration], Phys. Lett. B **716** (2012) 30 [arXiv:1207.7235 [hep-ex]].
- [9] J. Beringer *et al.* [Particle Data Group Collaboration], Phys. Rev. D **86** (2012) 010001.