Atomer, molekyler og tilstande - 1

Naturens byggesten

1 Introduktion

Dette kursus har to formål: Det skal give en baggrundsviden om stofs sammensætning, samt give en introduktion til adskillige nyttige begreber, som I får brug for som nanoteknologer. Begreberne udvælges naturligvis med henblik på at give jer en faglig baggrund for emnerne i P1-projektet.

Denne første lektion og store dele af den nedenstående tekst er i alt væsentligt en kopi af en tilsvarende forelæsning og forelæsningsnote fra 2003 [1], skrevet af Thomas Bastholm Lynge, som afholdt kurset sidst, og som jeg skylder stor tak for at stille materialet fra sidste år til rådighed.

2 Atomet

Ordet 'atom' stammer fra græsk, 'atomos', som betyder 'udelelig'. Begrebet blev introduceret af Demokrit ca. 400 f.Kr. for at beskrive de mindste byggesten, et stof er lavet af.

Opfattelsen af atomer som små, udelelige kugler holdt sig helt op til slutningen af 1800-tallet. I 1897 udførte J. J. Thompson et katodestråleforsøg (prototypen på et TV-apparat), som påviste eksistensen af små, negativt ladede partikler. Thompson foreslog (selvom han egentlig ikke havde belæg for det), at partiklerne var revet løs fra katodematerialets atomer, som dermed åbenbart ikke var udelelige.

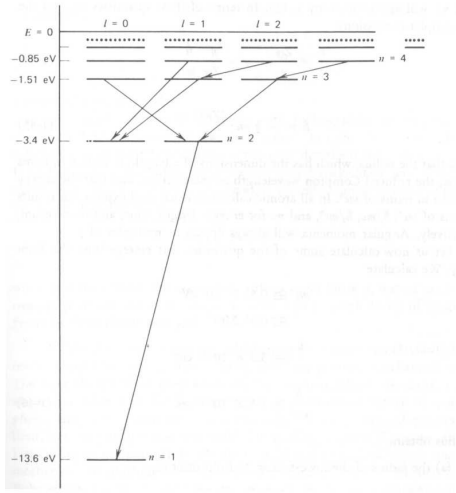
Opdagelsen af disse elektroner fik Thompson til at fremsætte den såkaldte rosinkagemodel, hvor de små, negativt ladede elektroner var jævnt fordelt i en positiv masse, som tilsammen udgjorde atomet.

Men i 1911 opdagede Rutherford, at tunge positivt ladede He-kerner kunne reflekteres fra selv et tyndt metalfolie, så den positive ladning i foliet måtte være koncentreret i en kerne.

Denne opdagelse førte til planetmodellen, hvor elektroner cirklede omkring den positive atomkerne som planeter om en stjerne. Planetmodellen førte dog til nye spørgsmål/problemer:

- Accelerede ladninger udstråler energi, hvilket ville føre til at elektronerne skulle spiralere ind i kernen i løbet af 10^{-12} s! Med andre ord synes planetmodellen at forudsige, at atomer er ustabile.

- Atomer udsender/absorberer kun lys med bestemte bølgelængder (spektrallinier) (måles f.eks. ved at sende hvidt lys gennem en sky af brintatomer), svarende til at der kun eksisterer bestemte elektronbaner. Hvordan skal det forklares?



Figur 1: Illustration af energiniveauerne i brint, givet ved Bohrs model. Eksistensen af baner nummereret med l kommer fra en diskussion af elliptiske baner. Pilene viser de dominerende overgange, dvs. hvilke baner elektronerne oftest hopper mellem. Figuren er fra [2].

3 Niels Bohrs model for brintatomet (1913)

Niels Bohr 'løste' dette problem ved at postulere:

> 1) Elektronen bevæger sig i planetagtige baner pga. den elektriske tiltrækning fra den positive kerne.
>
> 2) Kun bestemte baner er tilladte, givet ved $m_e v R = n\hbar$, $n = 1, 2, 3, ...$, hvor $\hbar = h/(2\pi)$. Når en elektron befinder sig i en sådan bane, udsender den ingen stråling (selvom den er accelereret), og dens energi er derfor konstant.
>
> 3) Stråling i form af fotoner udsendes/absorberes i forbindelse med at elektronen skifter bane. Da kun bestemte baner og dermed bestemte elektronenergier er tilladte, 'forklarer' det spektrallinierne.

Større baneradius svarer til større energi. Tilstanden med den mindste energi (mindste baneradius) kaldes *grundtilstanden*, og de øvrige tilstande kaldes *eksiterede* tilstande:

$$E_n = \frac{-13,6 \text{ eV}}{n^2}, \; n = 1, 2, 3, ... \tag{1}$$

Her er nulpunktet for energiskalaen valgt for en fri elektron, sådan at de 13,6 eV svarer til ioniseringsenergien for et brintatom. Se figur 1. Med denne såkaldte kvantisering af brintelektronernes energi kunne Bohr forklare brints spektrallinier.

4 Atomkernen

I 1919 foreslog Rutherford, at atomkerner var opbygget af brintkerner (idag kendt som protoner), men i 1932 fremkom målinger, der viste at ladningen af He-kerner ganske vist svarede til ladningen af to brintkerner, men massen svarede til fire brintkerner. Det antydede eksistensen af en neutral kernepartikel med samme masse som protonen. Atomkernen er således også delelig, idet den består af to typer nukleoner: positivt ladede protoner og neutrale neutroner. Status i 1932 var således, at verden ansås for opbygget af tre elementarpartikler: e^-, p^+, og n.

5 Partikelfamilier

Siden da har forsøg med partikelacceleratorer vist et mere broget billede med mere end 300 forskellige partikler opdelt i partikelfamilier:

- Feltpartikler/bosoner
  - Gravitoner (tyngdekraften)
  - $W^\pm$ og Z^0 (den svage kernekraft)
  - Fotoner (elektromagnetiske kræfter)
  - Gluoner (den stærke kernekraft)
- Ikke-feltpartikler/fermioner
  - Hadroner: Består af kvarker (se nedenfor) og er således ikke elementarpartikler.

    Mesoner (to kvarker)

    Baryoner (tre kvarker): Protoner, neutroner, m.fl.
  - Leptoner: Elektroner, myoner og tauoner med tilhørende neutrioner: (e^-, ν_e), (μ^-, ν_μ), (τ^-, ν_τ). Disse er elementarpartikler uden indre struktur og udstrækning (punktpartikler).

6 Kvarker

Alle hadroner består af kvarker, som menes at være elementarpartikler. Der eksisterer følgende seks typer af kvarker, med tilhørende ladning:

$$u \text{ (up): } q = +\tfrac{2}{3}e,\ d \text{ (down): } q = -\tfrac{1}{3}e$$
$$c \text{ (charm): } q = +\tfrac{2}{3}e,\ s \text{ (strange): } q = -\tfrac{1}{3}e$$
$$t \text{ (top): } b\ q = +\tfrac{2}{3}e,\ b \text{ (bottom): } q = -\tfrac{1}{3}e$$

Baryoner består som ovenfor nævnt af tre kvarker. En proton består således af to up- og en down-kvark ($p = uud$), mens en neutron består af en up- og to down-kvarker ($n = udd$).

De seks leptoner og seks kvarker udgør de 12 elementarpartikler, som vi idag mener alt stof er opbygget af. Hertil kommer antistof, som er opbygget af 12 tilsvarende antipartikler (antikvarker, antileptoner).

7 Partikler som bølger

7.1 Diffraktion

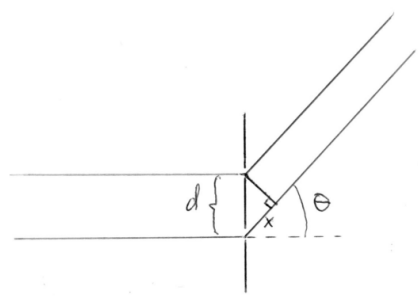
Interferens opstår når bølger møder hinanden; konstruktiv interferens er når bølgetop falder sammen med bølgetop, og bølgen forstærkes. Destruktiv interferens er det modsatte: bølgetop falder sammen med bølgedal, og bølgen udslukkes. Dette simple princip kan bruges til at forklare diffraktion, f.eks. spredning af laserlys i bestemte retninger ved at sende det gennem et gitter. Betragt situationen skitseret i figur 2: Lys med bølgelængde λ sendes ind fra venstre mod et gitter med gitterafstand d. For at få en diffrakteret stråle udsendt i en retning drejet vinklen θ i forhold til den indkommende stråle, kræver vi konstruktiv interferens mellem de to stråler på figuren. Det opnås, hvis stykket x svarer til et helt antal bølgelængder:

$$x = n\lambda, \tag{2}$$

hvor n er et helt tal. Ved hjælp af figur 2 og simpel algebra fås

$$\sin\theta = \frac{n\lambda}{d}, \tag{3}$$

hvoraf vi ser at kun bestemte vinkler vil opfylde kravet om konstruktiv interferens. Diffraktion er således et bølgefænomen.



Figur 2: Illustration af diffraktionsbetingelsen for lys indkommende fra venstre mod et gitter med gitterafstand d.

[Elektrondiffraktionsforsøg: Elektroner accelereres op og sendes gennem et kulstofgitter. Det herved opståede interferensmønster påviser elektronernes bølgeegenskaber].

7.2 Partikel-bølge-dualitet

Elektroner opfører sig i nogle tilfælde som partikler, i andre tilfælde som bølger. Når partikler beskrives som bølger, karakteriseres de ved deres bølgelængde λ, hvis sammenhæng med partiklens impuls ($p = mv$) er givet ved de Broglie-relationen

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{4}$$

de Broglie-relationen (4) blev eksperimentelt bekræftet i 1926, da elektrondiffraktionsforsøget blev udført første gang af Davisson og Germer. I de følgende år observeredes bølgeegenskaber for protoner og neutroner samt for brint og helium, som alle viste sig at opfylde (4).

Men det er ikke kun partikler, der har bølgeegenskaber. Lys, som normalt betragtes som elektromagnetiske bølger, har også partikelegenskaber. Det foreslog Einstein, idet man så kunne forklare den fotoelektriske effekt: Lys kan slå elektroner løs fra et fast stof. Elektronernes maksimale energi afhænger ikke af lysets intensitet, men derimod af dets bølgelængde. Dette forklares ved at beskrive lyset som en strøm af partikler, kaldet fotoner (γ), som hver især bærer energien $E_\gamma = h\nu = \hbar\omega$, og har en impuls givet ved (4). Også andre forsøg med lys forklares kun ved at tilskrive lyset partikelegenskaber.

Universet består således af stof (partikler) og stråling (elektromagnetiske bølger), og begge dele er fundamentalt set kendetegnet ved at have både partikel- og bølgeegenskaber ('partikel-bølge-dualitet'). Vores hjerner kan kun konstruere mentale billeder med udgangspunkt i vores sanser, og derfor må vi ty til at lade to intuitivt modstridende mentale billeder supplere hinanden for at kunne 'forstå' begreber som lys og elektroner.

8 Kvantemekanik

Problemerne med forståelsen af brintatomet (hvorfor er det kun nogle planetbaner, der er tilladte?), ideerne vedrørende partikel-bølge-dualitet, samt andre resultater, gjorde det ved det 20. århundredes begyndelse klart, at den klassiske fysik ikke rakte. Omkring 1925 blev den klassiske fysiks 'afløser', kvantemekanikken, grundlagt. Det er vigtigt at forstå, at kvantemekanikken ikke med et slag har gjort al klassisk fysik forældet og forkert - det er på ingen måde tilfældet! Tværtimod kan klassisk fysik i mange henseender betragtes som et grænsetilfælde af kvantemekanikken; det giver således stadig ingen mening at starte hele kvantemekanikmaskineriet for at regne på en bolds fald i tyngdefeltet.

Kvantemekanikken baserer sig på en bølgebeskrivelse af partikler, og bryder på nogle punkter radikalt med vores intuitive opfattelse af verden omkring os. Nogle af disse punkter opridses i det følgende.

8.1 Sandsynligheder og Schrödingerligningen

Kvantemekanikkens måske væsentligste 'nyskabelse' er, at den indfører et element af tilfældighed. Ifølge kvantemekanikken kan man 'kun' beregne *sandsynligheden* for at finde en partikel (med f.eks. en bestemt energi) i et givet område; det er ikke muligt at beregne præcist, hvor partiklen er! Sandsynligheden beskrives ved hjælp af en såkaldt bølgefunktion, der typisk benævnes $\psi(\mathbf{r})$. Ifølge 'Borns fortolkningsregel' er sandsynligheden for at finde en partikel beskrevet ved bølgefunktionen ψ i et lille volumen ΔV omkring positionen $\mathbf{r} = (x, y, z)$ givet ved $|\psi(\mathbf{r})|^2 \Delta V$. Denne ide kræver sandsynligvis stor tilvænning; hvis det kan være en trøst, var Albert Einstein heller aldrig helt glad ved tanken!

Og hvor kommer bølgefunktionen så fra? Ja, den bestemmes ved hjælp af Schrödingerligningen:

$$H\psi = E\psi, \tag{5}$$

hvor E er partiklens energi, og H er den såkaldte Hamiltonoperator. Som Schrödingerligningen fremstår her, er alle besværlighederne gemt i Hamiltonoperatoren, og den må I vente med at høre om, til I rigtigt skal lære kvantemekanik! Men det kan røbes, at man for at bestemme bølgefunktionen ψ skal løse en andenordens-differentialligning.

I et atom er hver *tilstand* beskrevet med sin egen bølgefunktion; en elektron i grundtilstanden beskrives f.eks. med ψ_{1s}, mens en elektron i en bestemt eksiteret tilstand kunne beskrives med en anden bølgefunktion, ψ_{2s}. De forskellige tilstande 'nummereres' med såkaldte *kvantetal* (her: $1s$, $2s$), hvilket vi vender tilbage til næste gang.

8.2 Heisenbergs usikkerhedsrelation

Et andet vigtigt resultat fra den kvantemekaniske beskrivelse af partikler er Heisenbergs usikkerhedsrelation:

$$\Delta x \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m}, \tag{6}$$

hvor $\Delta x \equiv \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}$. Notationen $\langle x \rangle$ betegner middelværdien af x, og Δx angiver således spredningen, eller usikkerheden, på x. Tilsvarende er Δv_x usikkerheden på partiklens hastighed. Denne ligning siger altså, at hvis vi forsøger at bestemme en elektrons position meget nøjagtigt, kan vi ikke samtidigt bestemme dens hastighed meget nøjagtigt! Hvis vi ved præcist, hvor en partikel er, ved vi ikke, hvor den er på vej hen - og omvendt.

Den nedre grænse $\hbar/2m$ er en *principiel* grænse, som gælder for selv det idelle (og dermed ikke-eksisterende) måleinstrument. Den dominerende usikkerhed på langt de fleste målinger vil således være af praktisk art i form af måleusikkerheder. Endvidere er det kun de allermindste partikler, der har så lille masse m, at $\hbar/2m$ bliver væsentlig større end nul. Dermed har Heisenbergs usikkerhedsrelation ikke nogen praktisk betydning for f.eks. en billardbal.

Det forholder sig dermed sådan, at elektronen i brintatomet ikke bevæger sig i velbestemte, planetagtige baner, som oprindeligt foreslået af Bohr, eller i noget andet, deterministisk mønster. Hvis vi forsøger at måle positionen af elektronen i et brintatom i forhold til kernen, og måler 10.000 gange, vil vi finde elektronen i 10.000 forskellige punkter fordelt omkring kernen i et mønster svarende til sandsynligheden for at finde elektronen i området! Fordelingen af målte positioner angiver tilsammen den såkaldte elektron(ladnings)tæthed.

8.3 Usikkerhedsrelation for energi

Heisenbergs usikkerhedsrelation kan omskrives til

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{7}$$

Energi kan således kun måles med vilkårlig stor nøjagtighed, hvis man *principielt set* har uendelig lang tid til det (et stabilt system). En elektron i sin grundtilstand vil forblive i grundtilstanden (medmindre den forstyrres). Der er således i princippet uendelig lang tid til rådighed til at bestemme grundtilstandens energi ($\Delta t \to \infty$), og dermed kan denne bestemmes eksakt ($\Delta E \to 0$). For

en eksiteret tilstand er Δt begrænset af henfaldstiden, og dermed er energien af en eksiteret tilstand behæftet med en *principiel* usikkerhed ΔE. De eksiterede energiniveauer har således en vis bredde, og denne 'forbredning' forklarer (sammen med andre forhold) den endelige bredde af spektrallinier, som observeres eksperimentelt.

9 Einsteins skepsis

Enhver måling forstyrrer det system, der måles på. Hvis man f.eks. måler afstanden til månen med en laserstråle, vil man (pga. lysets impuls) skubbe til månen og dermed ikke måle den faktiske afstand. Eksempler som dette bruges indimellem som forklaring på de principielle måleusikkerheder. Men størrelsen af denne helt klassiske forstyrrelse kan beregnes, og man kan dermed korrigere. Det er ikke tilfældet med de ovenfor omtalte usikkerheder. Hvis vi måler en partikels position meget præcist, ved vi ikke længere, hvor den er på vej hen. Det er ifølge Bohrs Københavnerfortolkning et udtryk for, at måleprocessen virker forstyrrende ind på *uforudsigelig* vis, hvilket på fundamental vis gør op med den klassiske determinisme. Ifølge Bohr antager en elektron simpelthen først en position i det øjeblik, vi måler dens position!

Denne ikke-deterministiske Københavnerfortolkning var genstand for heftige diskussioner mellem Albert Einstein og Niels Bohr. Einstein var et meget religiøst menneske og kunne derfor ikke forliges med tilfældighedsaspektet i kvantemekanikken. Til sin død i 1955 forfægtede han, at uforudsigelighedsaspektet måtte være en matematisk konstruktion, som beviseligt gav de rigtige resultater, men som ikke var udtryk for den ultimative fysiske virkelighed. Einstein foreslog blandt andet, at der måske var en verden styret af deterministiske principper "skjult" bag det, vi sanser. Gennem årene udtænkte han mange tankeeksperimenter, som han mente gjorde op med Bohrs Københavnerfortolkning, og hver gang ville Bohr (i hvert fald ifølge ham selv) skyde det ned; typisk med et argument om forkerte forudsætninger:

Einstein: "Vi kender ikke elektronens position, men lad os nu antage, at den befinder sig her..."

Bohr: "Jamen, kære lille Albert. Det giver slet ikke mening at antage elektronens position. Den befinder sig ikke nogetsteds, førend vi måler dens position!"

Einstein: "Gud spiller ikke med terninger."

Bohr: "Hold op med at fortælle Gud, hvad han skal og ikke skal gøre."

Næste uge

Næste gang skal vi se på, hvordan atomer laver kemiske bindinger for at danne molekyler.

Litteratur

[1] T. B. Lynge, *Forelæsningsnoter*, 2003.

[2] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, 1974.

Opgaver, lektion 1

Opgave 1

Udregn de Broglie-bølgelængden for:

a) en elektron med kinetisk energi $E_K = 100$ eV,

b) en proten med kinetisk energi $E_K = 100$ eV,

c) et kilo sukker på vej hjem fra Netto.

Opgave 2

Lad os for simpelheds skyld betragte en en-dimensional (1D) verden. I denne verden placeres en partikel i en kasse, som har endevægge ved hhv. $x = 0$ og $x = a$. Kassen har altså længden a. Partiklen befinder sig i grundtilstanden, og det opgives at bølgefunktionen i det tilfælde er givet ved:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right).$$

a) Hvor i kassen er det mest sandsynligt at finde partiklen?

b) Hvad er sandsynligheden for at finde den et eller andet sted i kassen?

Opgave 3

Kan man tænke sig en baryon med ikke-heltallig ladning?

Opgave 4

Hvad er bølgelængden af det lys, der kan eksitere et brintatom fra grundtilstanden til den første eksiterede tilstand?