

## TILLEGG 8

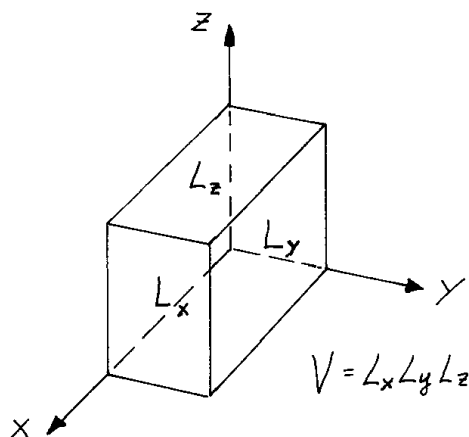
# 8. Tre-dimensjonal boks. Ideelle Fermi- og Bose-gasser

I dette Tillegget starter vi med tredimensjonal boks (8.1), som er relevant bl.a når vi skal diskutere en ideell gass av fermioner (8.2) og den ideelle Bose-gassen (8.3).

## 8.1 Tredimensjonal boks

[Hemmer 5.2, Griffiths s 193, B&J s 331]

### 8.1.a Energinivåer



Figuren skal forestille en tredimensjonal boks med volum  $V = L_x L_y L_z$ , der potensialet er null innenfor og uendelig på utsiden. For å finne egenfunksjoner og energinivåer tar vi utgangspunkt i de velkjente resultatene for den endimensjonale boksen:

$$\psi_{n_x}(x) = \sqrt{2/L_x} \sin k_{n_x} x; \quad k_{n_x} L_x = n_x \pi, \quad n_x = 1, 2, \dots$$

$$\widehat{H}_x \psi_{n_x}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{n_x}(x) = E_{n_x} \psi_{n_x}(x), \quad E_{n_x} = \frac{\hbar^2 k_{n_x}^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_x^2} n_x^2.$$

I det tredimensjonale tilfellet er Hamilton-operatoren  $\widehat{H} = \widehat{H}_x + \widehat{H}_y + \widehat{H}_z$ , hvor alle de fire operatorene kommuterer. Som energieigenfunksjoner kan vi da bruke produkttilstandene

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{L_y} \cdot \sin \frac{n_z \pi z}{L_z}, \quad (\text{T8.1})$$

som er simultane egenfunksjoner til  $\widehat{H}$ ,  $\widehat{H}_x$ ,  $\widehat{H}_y$  og  $\widehat{H}_z$  (og som er lik null på alle veggene). Energieigenverdiene er

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right). \quad (\text{T8.2})$$

Energieigenfunksjonene  $\psi_{n_x n_y n_z}$  er normerte, og også ortogonale, fordi vi har bare én slik funksjon for hver kombinasjon av kvantetallene  $n_x, n_y, n_z$ . (Husk regelen side 28 i Hemmer.) Operatorene  $\widehat{H}, \widehat{H}_x, \widehat{H}_y$  og  $\widehat{H}_z$  danner altså et **komplett sett av kommuterende operatører**, slik vi definerte det i Tillegg 2.

### 8.1.b Symmetri fører til degenerasjon

Dersom to eller tre av sidekantene  $L_x, L_y$  og  $L_z$  gjøres like, vil noen av de eksiterte energinivåene  $E_{n_x n_y n_z}$  “flyte sammen”, dvs vi får degenererte energinivåer. Er for eksempel  $L_x = L_y \neq L_z$ , får tilstandene  $\psi_{211}$  og  $\psi_{121}$  samme energi. Er *alle* sidekantene like, blir degenerasjonsgraden enda større. (Prøv sjøl å finne degenerasjonsgraden for de laveste energinivåene, og se B&J side 333.)

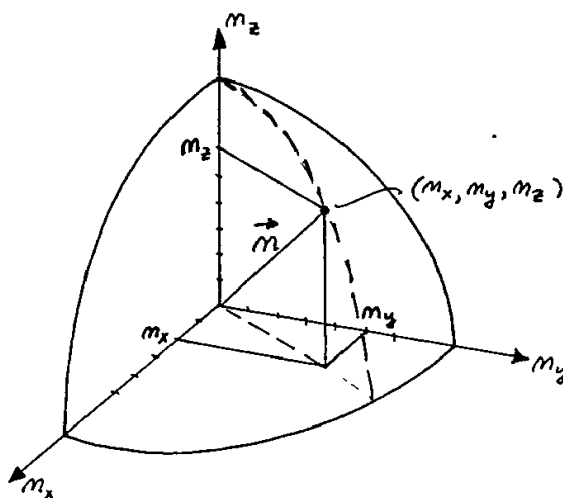
Moralen er at degenerasjonsgraden øker med økende grad av symmetri. Dette ser vi også for den tredimensjonale harmoniske oscillatoren (jf Hemmer s 84).

**En liten oppgave:** For en todimensjonal kvadratisk boks finner du raskt at energiene er proporsjonale med  $n_x^2 + n_y^2$ . Bruk dette til å finne degenerasjonsgradene for de tre første eksiterte nivåene. [Svar: 2,1,2.] Kan du finne et energinivå med degenerasjonsgrad 3? (Hint: Sjekk nivået med  $n_x^2 + n_y^2 = 50$ .)

### 8.1.c Tilstandstettheten

En viktig anvendelse av den tredimensjonale boksen har vi i den kvantemekaniske beskrivelsen av **ideelle gasser**. Vi betrakter da et makroskopisk volum  $V = L_x L_y L_z$  som inneholder et stort antall av identiske partikler (eller store antall av flere slags partikler). Gassen er ideell i den grad vi kan se bort fra vekselvirkningen mellom partiklene. For et makroskopisk volum blir avstandene mellom energinivåene svært små, og i den statistiske behandlingen av slike mange-partikkel-systemer spiller antall kvantetilstander (bølgefunksjoner) pr energi-enhet en sentral rolle. Det er dette som kalles tettheten av tilstander, eller **tilstandstettheten**.

Vi har én romlig tilstand  $\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z)$  for hver kombinasjon  $n_x, n_y, n_z$  av positive heltall. Hver slik kombinasjon svarer til en “enhets-celle” (med volum 1) i “**n**-rommet”.



Forenkler vi til et kubisk volum,  $V = L^3$ , slik at  $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ , er antallet  $N_{\text{rom}}(E)$  av romlige bølgefunksjoner med energi mindre enn  $E$  nokså nøyaktig gitt ved antall enhets-celler i en åtte-dels kule med radius (se figuren)

$$|\mathbf{n}| = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \sqrt{\frac{2mEL^2}{\pi^2 \hbar^2}}.$$

Antallet er altså

$$\begin{aligned} N_{\text{rom}}(E) &= \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{3/2} = \frac{4\pi}{3} \left( \frac{2mEL^2}{4\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \\ &= \frac{4\pi}{3} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} V E^{3/2}. \end{aligned} \quad (\text{T8.3})$$

Tilstandstettheten,  $g_{\text{rom}}(E)$ , definerer vi som antall tilstander pr energi-enhet,

$$g_{\text{rom}}(E) = \frac{N(E + dE) - N(E)}{dE} = \frac{dN}{dE} = 2\pi \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} V E^{1/2}. \quad (\text{T8.4})$$

Hemmer viser på side 85 at denne formelen holder også for  $L_x \neq L_y \neq L_z$ . Mer generelt kan det vises at den faktisk holder for nokså vilkårlig form på volumet  $V$ .

Det at  $g_{\text{rom}}(E)$  øker med energien (som  $\sqrt{E}$ ) er karakteristisk for tre dimensjoner. Går vi tilbake til den *endimensjonale* boksen, så forteller formelen  $E = (\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2)n^2 = (h^2 / 8mL^2)n^2$  at avstanden mellom nivåene øker med energien, og da må tilstandstettheten *avta*: Her er jo antallet egenfunksjoner med energi mindre enn  $E$

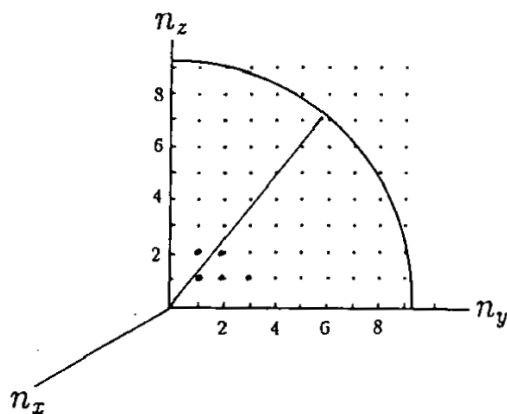
$$N_{\text{rom}}^{(1)}(E) = n = \sqrt{\frac{8mL^2}{h^2} E},$$

og da avtar tilstandstettheten med økende energi som

$$g_{\text{rom}}^{(1)}(E) = \frac{dN}{dE} = \sqrt{\frac{2m}{h^2}} \cdot L \cdot E^{-1/2}. \quad (\text{T8.5})$$

For partikler som er tvunget til å bevege seg i *to* dimensjoner (på en flate  $A = L^2$ ), følger det tilsvarende fra formelen  $E = (h^2 / 8mL^2)(n_y^2 + n_z^2)$  at antallet tilstander med energi mindre enn  $E$  er

$$N_{\text{rom}}^{(2)}(E) = \frac{1}{4} \cdot \pi(n_y^2 + n_z^2) = \frac{2\pi mL^2}{h^2} E. \quad (\text{T8.6})$$



Tilstandstettheten er her *konstant*,

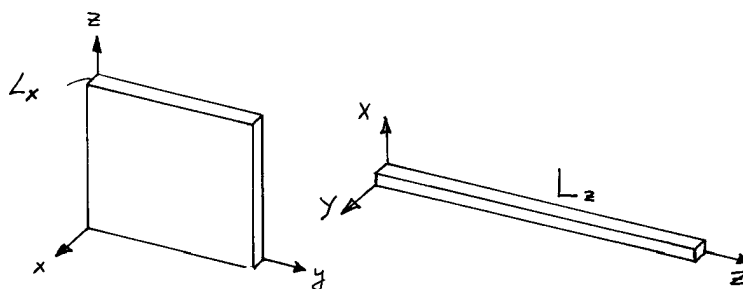
$$g_{\text{rom}}^{(2)}(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2\pi m}{h^2} \cdot L^2. \quad (\text{T8.7})$$

Som Hemmer understreker på side 86 er én- og to-dimensjonale systemer slett ikke rene teorikonstruksjoner. Ved å velge en i og for seg tredimensjonal boks (brønn) med veldig liten  $L_x$ , mens  $L_y$  og  $L_z$  er store eller til og med makroskopiske, kan vi f.eks oppnå at energibeløpet  $\pi^2\hbar^2/(2mL_x^2)$  i formelen

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL_x^2} n_x^2 + \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL_y^2} n_y^2 + \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL_z^2} n_z^2$$

blir veldig mye større enn  $\pi^2\hbar^2/(2mL_y^2)$  og  $\pi^2\hbar^2/(2mL_z^2)$ . Dette kan bety at partikkelen (eller partiklene) som befinner seg i en slik sjikt-formet brønn i praksis aldri eksiteres til tilstander med  $n_x > 1$ .  $x$ -delen av bølgefunksjonen er i så fall hele tiden  $\psi_1(x) = \sqrt{2/L_x} \sin \pi x/L_x$ , og det “skjer ingen ting” med bevegelsen i  $x$ -retningen. Derimot trengs det mye mindre energi for å eksitere frihetsgradene i  $y$ - og  $z$ -retningene. Så “fysikken vil foregå i disse to retningene”, og systemet er effektivt sett todimensjonalt.

Tilsvarende kan vi gjøre et system effektivt sett endimensjonalt ved å velge både  $L_x$  and  $L_y$  veldig små, mens den “longitudinale” dimensjonen  $L_z$  er stor (som vist til høyre i figuren):



Energiene som svarer til de lavest-liggende (longitudinale) tilstandene  $\psi_{n_z}(z)$  blir da veldig små sammenlignet med de energiene som trengs for å eksitere de transversale frihetsgradene. Dette betyr at det kan “foregå interessant fysikk” i den longitudinale frihetsgraden ( $z$ -retningen), mens de transversale frihetsgradene er “fastfrosset”, dvs effektivt sett ute av bildet.

### 8.1.d Periodiske grensebetingelser

(Hemmer s 86, Griffiths s 199, B&J s 331)

For den “endimensjonale” boksen ovenfor har vi sett at de ordinære grensebetingelsene (“boks-betingelsene”  $\psi(0) = \psi(L_z) = 0$ ) gir energieigenfunksjoner i form av stående bølger,  $\psi_{n_z}(z) = \sqrt{2/L_z} \sin(\pi n_z z/L_z)$ . Som forklart side 86–87 i Hemmer, erstatter en ofte disse stående bølgene med impuls-eigenfunksjoner,

$$\psi(z) = \frac{1}{\sqrt{L_z}} e^{ikz},$$

samtidig med at en erstatter “boks-betingelsene” med såkalte **periodiske grensebetingelser**:

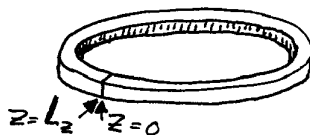
$$\boxed{\psi(0) = \psi(L_z),} \quad \implies \quad e^{ikL_z} = 1 \quad \implies \quad kL_z = 2\pi n, \quad \implies \quad (\text{T8.8})$$

$$k_n = \frac{2\pi n}{L_z}, \quad p_n = \hbar k_n = \frac{nh}{L_z}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Disse energieigenfunksjonene er normerte, og det er lett å sjekke at de også er ortogonale (fordi de er impulsegenfunksjoner med hver sin impulsegenverdi  $p_n$ ):

$$\int_0^{L_z} \psi_{n_1}^*(z) \psi_{n_2}(z) dz = \delta_{n_1 n_2}. \quad (\text{T8.9})$$

I mange problemstillinger er det like relevant å bruke periodiske grensebetingelser som de opprinnelige. For den “endimensjonale” boksen ovenfor kan vi motivere dette med at fysikken i boksen ikke endres vesentlig, bortsett fra randeffekter, om vi “bøyer den sammen” til en ring.

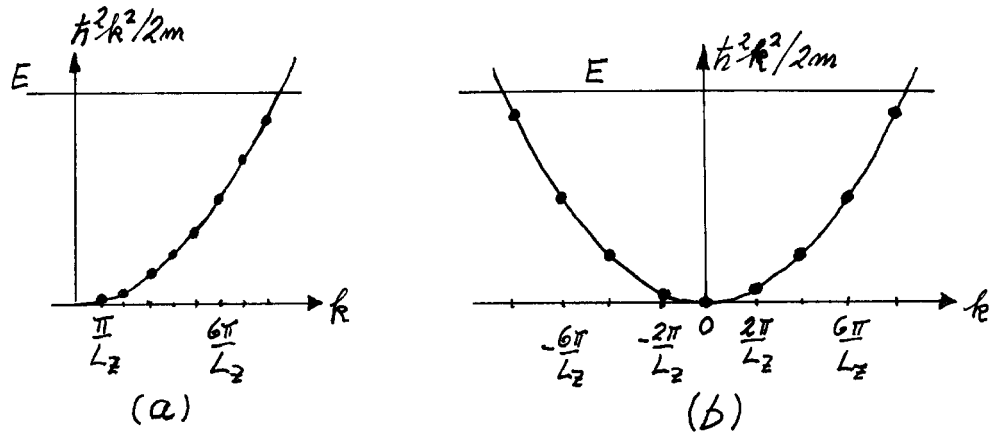


Da er det betingelsen  $\psi(0) = \psi(L_z)$  som er relevant. For makroskopiske  $L_z$  betyr slike randeffekter lite.

For en tredimensjonal boks (som vi f.eks kan bruke i en forenklet modell for ledningselektronene i et metallstykke) blir det vanskelig å forestille seg en “sammen-bøyning”, men konklusjonen om randeffekter står ved lag, så lenge vi er interessert i bulk-egenskapene til ledningselektronene og holder oss borte fra overflate-effekter.

I mange problemstillinger er periodiske grensebetingelser *mer* relevante enn boks-betingelsene. Dette gjelder bl.a for tredimensjonale spredningsberegninger. Da er det relevant å representere innkommende og utgående partikler ved impulsegenfunksjoner. Slike beregninger blir ofte enklere om en plasserer systemet sitt inne i et endelig (tenkt) hjelpevolum. En bruker da periodiske grensebetingelser, som gir ordinær normering og diskrete impulser.

I disse og andre sammenhenger er det et viktig poeng at de periodiske grensebetingelsene gir de samme tilstandstetthetene som boks-betingelsene. I én dimensjon så vi ovenfor at bølgetallene  $k_n = 2\pi n/L_z$  med periodiske grensebetingelser ligger dobbelt så langt fra hverandre (se figur (b) nedenfor) som bølgetallene  $k_{n_z} = \pi n_z/L_z$  med boks-betingelser (se figur (a) nedenfor).



Men som vi ser av figuren, kompenseres dette av at de førstnevnte kan være både positive og negative. Derfor blir antall tilstander  $N_{\text{rom}}^{(1)}(E)$  med energi mindre enn  $E$  det samme, enten vi bruker den ene eller den andre typen grensebetingelser, og det samme vil da gjelde for tilstandstettheten.

La oss med det samme sjekke hvordan periodiske grensebetingelser fungerer i tre dimensjoner. De ortonormerte impulsegenfunksjonene er da

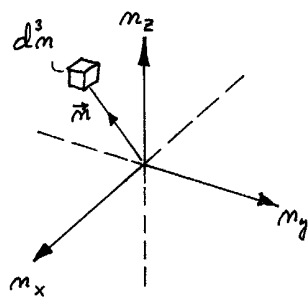
$$\psi_{n_x n_y n_z} = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (\text{T8.10})$$

der

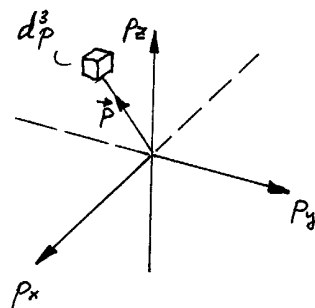
$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, \quad p_x = \hbar k_x = \frac{h}{L_x} n_x, \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

og tilsvarende for  $k_y$  og  $k_z$ . En grei måte å beregne tilstandstettheten på er følgende: Fra relasjonene  $k_x = 2\pi n_x/L_x$  osv har vi at  $dk_x = 2\pi \cdot dn_x/L_x$  osv, slik at

$$d^3k = dk_x dk_y dk_z = \frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z} dn_x dn_y dn_z = \frac{(2\pi)^3}{V} d^3n.$$



**n-rommet**



**p-rommet**

**n-rommet** omfatter nå alle de åtte oktantene (i motsetning til den ene oktanten side 2). I dette rommet har vi én tilstand pr "enhets-celle". Antallet tilstander i volumeelementet  $d^3n$  i dette rommet er altså lik  $d^3n$ . Fra sammenhengen ovenfor mellom  $d^3k$  og  $d^3n$  kan vi da

slå fast at antallet impulegentilstander i volumelementet  $d^3k$  i  $\mathbf{k}$ -rommet (dvs antallet i elementet  $d^3p$  i  $\mathbf{p}$ -rommet) er

$$dN_{\text{rom}} = d^3n = \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{V d^3p}{h^3}. \quad (\text{T8.11})$$

Denne formelen (og generaliseringen av den i fotnoten nedenfor)<sup>1</sup> er det vanlig å bruke som utgangspunkt for beregninger av tilstandstettheten, både i ikke-relativistisk og relativistisk teori. Formlene (T8.10) og (T8.11) er nemlig gyldige også relativistisk.

La oss prøve å regne relativistisk, med formlene

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \equiv \gamma mc^2, \quad \mathbf{p} = \gamma m\mathbf{v}, \quad (\text{T8.12})$$

$$\frac{c^2\mathbf{p}}{E} = \frac{c^2 \gamma m\mathbf{v}}{\gamma mc^2} = \mathbf{v}, \quad E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4.$$

Fra de to siste har vi at

$$2E dE = c^2 2p dp, \quad \text{dvs.} \quad \frac{dp}{dE} = \frac{E}{c^2 p} = \frac{1}{v}. \quad (\text{T8.13})$$

Bevæpnet med disse formlene merker vi oss først at alle tilstander med energi mindre enn  $E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$  vil svare til punkter i  $\mathbf{p}$ -rommet innenfor en kule med radius  $p$ . Antallet er derfor ifølge (T8.11)

$$N_{\text{rom}}^{(\text{Rel})}(E) = \frac{V}{h^3} \frac{4\pi p^3}{3}. \quad \left( \begin{array}{l} \text{Antall tilstander} \\ \text{med impuls} < p, \\ \text{relativistisk.} \end{array} \right) \quad (\text{T8.14})$$

Dette er den relativistiske generaliseringen av (T8.3). Tilstander med energier i intervallet  $(E, E + dE)$ , dvs med impulser i intervallet  $(p, p + dp)$ , svarer til punkter innenfor et kuleskall i  $\mathbf{p}$ -rommet:

$$dN_{\text{rom}}^{(\text{Rel})}(E) = \frac{V}{h^3} \cdot 4\pi p^2 dp.$$

Den relativistiske formelen for tilstandstettheten blir da (vha (T8.13))

$$g_{\text{rom}}^{\text{Rel}}(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{p^2}{v}. \quad \left( \begin{array}{l} \text{Tilstands-} \\ \text{tettheten,} \\ \text{relativistisk.} \end{array} \right) \quad (\text{T8.15})$$

<sup>1</sup>Det er vanlig å generalisere formelen (T8.11) ovenfor til følgende regel: Antall romlige tilstander i elementet  $d^3r d^3p$  i det 6-dimensjonale **faserommet** er

$$dN = \frac{d^3r d^3p}{h^3}.$$

Det eneste vi trenger å huske i denne regelen er altså at

Hver romlig tilstand okkuperer "volumet"  $h^3$  i **faserommet**.

I den ikke-relativistiske grensen (med  $p^2/v = mp = m\sqrt{2mE}$ ) går denne over i (T8.4):

$$g_{\text{rom}}(E) = 2\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} V E^{1/2}. \quad \left( \begin{array}{l} \text{Tilstands-} \\ \text{tettheten,} \\ \text{ikke-relativistisk.} \end{array} \right) \quad (\text{T8.16})$$

De relativistiske formlene ovenfor holder ikke bare for partikler, dvs for de Broglie-bølger, men også for elektromagnetiske bølger, hvor de periodiske grensebetingelsene gir akkurat de samme tillatte verdiene som ovenfor for bølgetallet  $\mathbf{k}$  (og impulsen  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  til fotonene). Fotoner har  $v = c$  og  $p = E/c = h\nu/c$ . Når vi da tar med en ekstra faktor 2 for å ta hensyn til de to mulige polarisasjons-retningene for hvert foton, finner vi at antallet moder med frekvenser i intervallet  $(\nu, \nu + d\nu)$  for det elektromagnetiske feltet er

$$dN_{\text{ph}} = 2 \frac{V \cdot 4\pi p^2 dp}{h^3} = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu. \quad (\text{T8.17})$$

Denne formelen spiller en viktig rolle i Plancks strålingslov, som vi skal komme tilbake til.



## 8.2 Ideell gass med spin- $\frac{1}{2}$ -fermioner

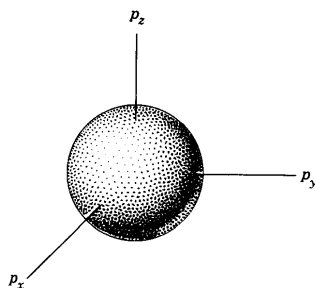
(Hemmer s 195, Griffiths s 193, B&J s 478)

### 8.2.a Generelt om en Fermi-gass ved lav temperatur

I ideell-gass-tilnærmelsen antar vi at det ikke virker noen krefter mellom de  $N$  identiske spin- $\frac{1}{2}$ -fermionene som befinner seg i boks-volumet  $V = L_x L_y L_z$ . (De eneste kreftene er altså de som virker fra veggene.) I betegnelsen *ideell* gass ligger det en innrømmelse: Virkelige gasser er ikke ideelle, og virkelige fermionsystemer er ikke ideelle Fermi-gasser. Men noen av egenskapene til reelle systemer beskrives likevel ganske godt i ideell-gass-tilnærmelsen. Dette skal vi komme tilbake til nedenfor, der vi bl.a bruker denne modellen til en grov beskrivelse av ledningselektronene i et metall.

Dersom de identiske partiklene var *bosoner*, så ville grunntilstanden for dette systemet svare til at alle de ikke-vekselvirkende bosonene befant seg i én-partikkel-tilstanden  $\psi_{111} \propto \sin(\pi x/L_x) \sin(\pi y/L_y) \sin(\pi z/L_z)$  for boksen. For fermioner, derimot, går ikke dette. Ifølge Paulis eksklusjonsprinsipp kan vi bare ha ett fermion i hver kvantemekanisk én-partikkel-tilstand, dvs to spinn- $\frac{1}{2}$ -fermioner i hver *romlig* tilstand. Med et stort antall  $N$  med partikler i volumet  $V$  betyr dette at de fleste av dem tvinges til å okkupere én-partikkel-tilstander med veldig høye kvantetall.

Dette gjelder selv for **grunntilstanden for mange-partikkel-systemet**, som er den tilstanden som svarer til lavest mulig energi for hele systemet. Det er lett å skjønne hva slags tilstand dette er. Vi kan bare forestille oss at vi sender én og én partikkel inn i volumet  $V$  med beskjed om å finne en ledig én-partikkel-tilstand med spinn opp eller ned og med lavest mulig energi (dvs lavest mulig impuls  $|\mathbf{p}|$ ). De første partiklene vil da havne i romlige tilstander  $\psi_{n_x n_y n_z}$  med lave kvantetall, representert ved punkter  $\mathbf{p} = \{p_x, p_y, p_z\} = h\{n_x/L_x, n_y/L_y, n_z/L_z\}$  nær origo i  $\mathbf{p}$ -rommet. Men etter hvert som vi sender inn flere fermioner, blir  $|\mathbf{p}|$  stadig større for første ledige tilstand. Dette ender selvsagt at med at de  $N$  fermionene til slutt okkuperer alle tilstandene innenfor en kule i  $\mathbf{p}$ -rommet (og ingen utenfor denne kula). (En totaltilstand med ledige tilstander inne i kula og opptatte utenfor har høyere total energi.)



De  $N$  fermionene i volumet  $V$  vil altså ha impulser  $|\mathbf{p}|$  som varierer fra null opp til en maksimal impuls  $p_F$  gitt ved radien til denne kula. Denne impulsen kalles **Fermi-impulsen**, og den tilsvarende maksimale kinetiske energien ( $E_F = p_F^2/2m$  i det ikke-relativistiske tilfellet) er den såkalte **Fermi-energien**. For å finne  $p_F$  trenger vi bare å huske at antallet tilstander i volumet  $V$  og i elementet  $d^3p$  i  $\mathbf{p}$ -rommet nå er

$$dN = 2 dN_{\text{rom}} = 2 \frac{V d^3p}{h^3}, \quad (\text{T8.18})$$

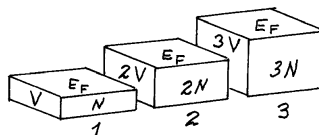
der faktoren 2 tar hensyn til de to spinntilstandene en har for spinn  $\frac{1}{2}$ . Ved å sette partikkeltallet  $N$  lik antallet tilstander innenfor **Fermi-kula** har vi da

$$N = 2 \frac{V}{h^3} \frac{4\pi p_F^3}{3}. \quad (\text{T8.19})$$

Vi kan altså slå fast at selv i grunntilstanden for dette mange-partikkel-systemet har partiklene impulser og energier som varierer fra null opp til maksimal-verdier gitt ved Fermi-impulsen og Fermi-energien, som er

$$p_F = \hbar \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad \text{og} \quad E_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}. \quad (\text{T8.20})$$

På denne måten får Pauli-prinsippet store konsekvenser for Fermi-gassen. Det første vi merker oss er at det er **antallstettheten**  $N/V$  av fermioner som teller. Fermi-energiene er derfor de samme i boks 1 og boks 2 nedenfor, fordi antallstetthetene er like store.



Det samme gjelder om vi “slår 1 og 2 sammen”, til boks 3. Dette illustrerer et mer generelt faktum: Bulk-egenskapene til en Fermi-gass er uavhengige av formen og størrelsen av volumet (og avhenger selvsagt heller ikke av hvilken type grensebetingelser vi bruker i den teoretiske beskrivelsen). Merk ellers at for en gitt antallstetthet  $N/V$  er (den ikke-relativistiske) Fermi-energien  $E_F = p_F^2/2m$  omvendt proporsjonal med massen  $m$  til fermionene. Denne konsekvensen av Paulis eksklusjonsprinsipp er altså mest følbart for lette fermioner.

Legg også merke til at om vi holder  $V$  konstant og øker partikkeltallet  $N$  med f.eks en faktor  $8 (= 2^3)$ , så tvinger eksklusjonsprinsippet fram en dobling av radien  $p_F$  av Fermi-kula, og Fermi-energien  $E_F = p_F^2/2m$  øker med en faktor 4. Da vil også den totale energien  $E_{\text{tot}}$  til mangepartikkelsystemet og gjennomsnittsenergien  $\langle E \rangle = E_{\text{tot}}/N$  øke med en faktor 4.

Samme resultat kan oppnås ved å minske volumet  $V$ , siden  $E_F$  er proporsjonal med  $V^{-2/3}$ . Setter vi  $V = L^3$ , øker hver av boks-energiene og dermed  $E_F$  og  $E_{\text{tot}}$  proporsjonalt med  $1/L^2$  for minkende  $L$ . Denne oppførselen til grunntilstanden for Fermi-gassen er altså en generalisert form for “kvantevillskap”. Nedenfor skal vi se at dette har stor betydning bl.a i hvite dverger.

### Total-energien $E_{\text{tot}}$ og gjennomsnittsenergien $\langle E \rangle$ for fermionene (ikke-relativistisk)

For å beregne den totale kinetiske energien  $E_{\text{tot}}$  i grunntilstanden for  $N$ -fermion-systemet trenger vi bare å summere opp energiene til én-partikkel-tilstandene innenfor Fermi-kula:

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} &= \int E dN = \int_0^{p_F} \frac{p^2}{2m} \cdot 2 \frac{V d^3p}{h^3} && (d^3p = 4\pi p^2 dp) \\ &= \frac{2V}{h^3} \frac{4\pi}{2m} \int_0^{p_F} p^4 dp = \underbrace{\frac{2V}{h^3} \frac{4\pi p_F^3}{3}}_N \frac{3}{5} \underbrace{\frac{p_F^2}{2m}}_{E_F}. \end{aligned}$$

Totalenergien er altså

$$E_{\text{tot}} = \frac{3}{5} N E_F, \quad (\text{T8.21})$$

og gjennomsnittet av de kinetiske energiene til de  $N$  fermionene er

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F. \quad (\text{T8.22})$$

[Du bør kanskje forsikre deg om at integralet  $E_{\text{tot}} = \int_0^{E_F} E g(E) dE$ , med  $g(E) = 2g_{\text{rom}}(E)$ , gir samme resultat.]

**En liten oppgave:** En boks med volum  $V = L^3$  inneholder 14 elektroner. Hva er den høyeste én-partikkel-energien (Fermi-energien) når systemet befinner seg i grunntilstanden, som er den tilstanden som gir lavest total energi for de 14 elektronene? Hva er gjennomsnittsennergien til de 14 elektronene i grunntilstanden? [Svar: Høyeste én-partikkel-energi for  $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 9$ . Gjennomsnittlig er  $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 6.857$ .]

### Kvantetrykket

Dersom vi holder  $N$  konstant og lar  $V$  øke litt, så *minker* den totale indre energien, fordi  $E_{\text{tot}}$  går som  $V^{-2/3}$ :

$$E_{\text{tot}} = \frac{3}{5} N \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} \equiv \text{konstant} \cdot V^{-2/3}.$$

Med

$$\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial V} = -\frac{2}{3} \cdot \text{konstant} \cdot V^{-5/3} = -\frac{2}{3} \frac{E_{\text{tot}}}{V},$$

finner vi at en infinitesimal volumøkning  $\Delta V$  gir en endring

$$\Delta E_{\text{tot}} = \frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial V} \Delta V = -\frac{2}{3} \frac{E_{\text{tot}}}{V} \Delta V$$

av  $E_{\text{tot}}$ , som altså minker med beløpet  $|\Delta E_{\text{tot}}|$ . For å skjønne hvor denne energien blir av må vi huske på at Fermi-gassen utøver et trykk på veggene til volumet  $V$ . Så energien  $|\Delta E_{\text{tot}}|$  blir ikke borte, men brukes til å utføre et arbeid  $P\Delta V = -\Delta E_{\text{tot}}$  på "omgivelsene". Fermi-gassen utøver altså et trykk på veggene til boksen, gitt ved

$$P = -\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial V} = \frac{2}{3} \frac{E_{\text{tot}}}{V}. \quad (\text{T8.23})$$

Innsatt finner vi at

$$P = \frac{2}{5} \frac{N}{V} E_F = \frac{\pi^{4/3} \hbar^2}{15m} \left( 3 \frac{N}{V} \right)^{5/3}. \quad (\text{T8.24})$$

Her har vi gått ut fra at mangepartikkelsystemet hele tiden befinner seg i grunntilstanden, som svarer til at alle tilstandene innenfor Fermi-kula er besatt. Dette er strengt tatt bare korrekt i grensen  $T \rightarrow 0$ . I denne grensen går trykket til en *klassisk* ideell gass mot null, som  $P_{\text{kl}} = Nk_B T/V$ .<sup>2</sup> I motsetning til dette klassiske trykket går trykket vi har funnet ovenfor

<sup>2</sup> $k_B = 1.38066 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 0.8617 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$  er Boltzmanns konstant.

ikke mot null når  $T \rightarrow 0$ . Dette trykket har altså ingen ting med termiske bevegelser å gjøre, men skyldes bølgenaturen til partiklene, kombinert med Paulis eksklusjonsprinsipp. Det kalles gjerne **kvantetrykket** eller **Pauli-trykket**. En enda bedre betegnelse ville kanskje være **eksklusjons-trykket**, for det er jo eksklusjonsprinsippet som gjør Fermi-kula så stor og trykket så høyt.

Selv for temperaturer  $T > 0$  viser det seg at eksklusjonstrykket er mye større enn det trykket vi ville vente å finne ifølge den klassiske ideelle gassloven  $P = NkT/V$ . Dette gjelder så lenge vi holder oss til hva vi kan kalle “lave” temperaturer. Hva som menes med dette vil bli forklart nedenfor.

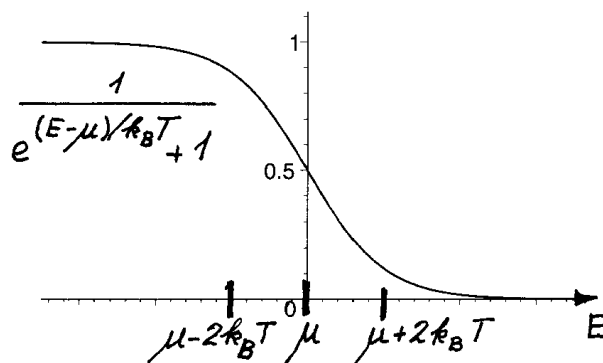
### Fermi-gassen ved “lave” temperaturer. Fermi–Dirac-fordelingen

For å beskrive tilstanden til dette mange-partikkel-systemet av identiske fermioner ved en temperatur  $T > 0$  må vi gå *ut over* kvantemekanikken, og hente inn noen sentrale resultater fra **kvante-statistikk** (quantum statistical mechanics):<sup>3</sup>

For “lave” temperaturer, dvs når det “termiske” energibeløpet  $k_B T$  er lite i forhold til Fermi-energien  $E_F$ , er endringene små i forhold til grunntilstanden: Noen få av fermionene er blitt eksitert, fra tilstander *like innenfor* **Fermi-flata** ( $E_F - k_B T \lesssim E < E_F$ ) til tilstander *like utenfor* ( $E_F < E \lesssim E_F + k_B T$ ). Sannsynligheten for å finne en tilstand besatt er altså blitt litt mindre enn 1 like innenfor Fermi-flata. Til gjengjeld er den noe større enn null like utenfor. Denne sannsynligheten (for en gitt én-partikkel-tilstand) kaller vi **besettelsestallet**; den gir det *gjennomsnittlige* antallet  $\langle n \rangle$  av fermioner i vedkommende tilstand. (Selv ved likevekt har en fluktuasjoner. En tilstand kan derfor være opptatt av et fermion det ene øyeblikket og ledig i det neste.) Dette besettelsestallet må ligge mellom null og 1. Ifølge statistisk mekanikk er det gitt av den såkalte **Fermi–Dirac-fordelingen**:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}, \quad \left( \begin{array}{l} \text{Fermi–Dirac-} \\ \text{fordelingen} \end{array} \right) \quad (\text{T8.25})$$

Denne fordelingsloven sier at besettelsestallet generelt avtar med økende energi. Vi ser også at overgangen fra store til små besettelsestall skjer i et energi-intervall av størrelsesorden noen få  $k_B T$ , slik vi var inne på i beskrivelsen ovenfor. Som vist i figuren nedenfor er dette intervallet sentrert omkring energi-verdien  $\mu$ , som er den energien hvor  $\langle n \rangle$  passerer 50%.



<sup>3</sup>jf TFY4230 Statistisk fysikk.

Denne energiverdien  $\mu$  kalles det **kjemiske potensialet** for det aktuelle fermion-systemet. Fordelingsloven kompliseres av at  $\mu$  i prinsippet avhenger av temperaturen, samt av de øvrige systemparametrene ( $V$ ,  $m$  og  $N$ ). Heldigvis er det slik at

For "lave" temperaturer,  $k_B T \ll E_F$ , kan vi i praksis sette

$$\mu(T) \approx \mu(0) = E_F. \quad (\text{T8.26})$$

Dette kan begrunnes:

(i) I grensen  $T \rightarrow 0$  ser vi av formelen for  $\langle n \rangle$  og fra figuren ovenfor at endringen fra  $n = 1$  til  $n = 0$  skjer helt brått: Vi har i denne grensen

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{dN}{dE} = \begin{cases} g(E) & \text{for } E < \mu(0), \\ 0 & \text{for } E > \mu(0). \end{cases}$$

For  $T = 0$  er altså alle tilstander med  $E < \mu(0)$  (og ingen for  $E > \mu(0)$ ) besatt. Men dette var jo definisjonen av Fermi-energien. Følgelig er

$$\mu(0) = E_F. \quad (\text{T8.27})$$

Fermi-Dirac-fordelingen gir oss altså grunntilstanden i grensen  $T = 0$ , slik vi måtte forlange.

(ii) At det kjemiske potensialet  $\mu$  avhenger av temperaturen kan vi forstå ved følgende resonnement: Med  $g(E)dE$  tilstander i intervallet  $(E, E + dE)$  er det forventede antallet fermioner i dette intervallet

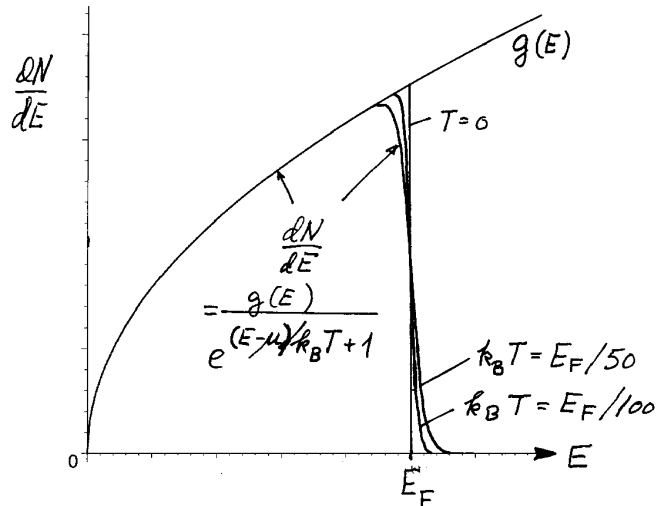
$$dN = \langle n \rangle g(E)dE = \frac{g(E)dE}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}. \quad (\text{T8.28})$$

Integrert over alle energier skal dette gi det totale antallet  $N$  av fermioner i volumet  $V$ :

$$N = \int_0^\infty \frac{g(E)dE}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}. \quad (\text{T8.29})$$

For gitte verdier av  $V$  og  $m$  er tilstandstettheten  $g(E)$  en bestemt funksjon av energien. For en gitt temperatur  $T$  kan integralet da bare bli lik  $N$  for én bestemt verdi av  $\mu$ . (Velger vi  $\mu$  større enn fasitverdien for en gitt  $T$ , blir integralet større enn  $N$ ; velger vi  $\mu$  for liten, blir integralet mindre enn  $N$ .) For en annen verdi av  $T$  må vi velge en annen  $\mu$  for at integralet skal bli lik  $N$ .

(iii) At avviket mellom  $\mu(T)$  og  $\mu(0) = E_F$  er lite for  $k_B T \ll E_F$  kan vi forstå fra figuren nedenfor:

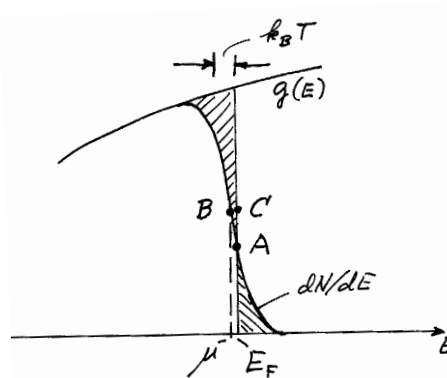


Denne viser antallet tilstander pr energi-enhet,  $g(E) \propto \sqrt{E}$ , og det forventede partikkeltallet pr energi-enhet,

$$\frac{dN}{dE} = g(E) \langle n \rangle = \frac{g(E)}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1},$$

for tre tilfeller:  $k_B T/E_F = 0$ ,  $1/100$  og  $1/50$ . Her merker vi oss at arealet under kurven for  $T = 0$  (dvs under  $g(E)$  opp til  $E = E_F$ ) er lik partikkeltallet  $N$ . Det samme gjelder selvsagt for arealene under de to kurvene for  $T > 0$ . (Jf integralet (T8.28).)

Dette betyr at de to skraverte arealene i figuren nedenfor, over og under punktet A, må være like store. (Disse arealene er henholdsvis lik antall *ledige* tilstander innenfor Fermi-flata og antall *besatte* utenfor.)



Punktet B i figuren svarer til at  $dN/dE$  er 50% av  $g(E)$ , så abscissen til B er det kjemiske potensialet  $\mu$ . Punkt C ligger midt på " $E_F$ -linja". I figuren har vi overdrevet forskjellen mellom  $\mu$  og  $E_F$  og avstanden mellom A og C. For at de to arealene skal bli like må A opplagt ligge svært nær C, dvs *nesten* midt på " $E_F$ -linja". (*Litt* under, fordi  $g(E)$  avtar svakt med energien.) Ordinaten til A må altså være svært nær halvparten av  $g(E_F)$ :

$$\left. \frac{dN}{dE} \right|_{E_F} = \frac{g(E_F)}{e^{(E_F-\mu)/k_B T} + 1} \approx \frac{1}{2}g(E_F),$$

dvs  $e^{(E_F-\mu)/k_B T} \approx 1$ , dvs  $E_F - \mu \ll k_B T$ . Det kan vises at avviket er av andre orden i

$k_B T/E_F$ :

$$\mu(T) \approx E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right] \quad (k_B T \ll E_F). \quad (\text{T8.30})$$

Som antydnet *avtar* altså  $\mu$  med økende temperatur, men bare til andre orden i “litenhetsparameteren”  $k_B T/E_F$ . Når denne er liten kan vi derfor for de fleste formål bruke (T8.25),  $\mu(T) \approx \mu(0) = E_F$ .<sup>4</sup>

Fra diagrammene ovenfor kan en også skjønne at for  $k_B T \ll E_F$  er økningen i totalenergien  $E_{\text{tot}}$  liten i forhold til verdien for  $T = 0$ , som er  $\frac{3}{5} N E_F$ . *Brøkdelen* av eksiterte fermioner (jf de skraverete arealene) er av størrelsesorden lik litenhetsparameteren  $k_B T/E_F$ , og det samme kan vi si om energiøkningen for disse ( $\sim k_B T$ ) i forhold til gjennomsnittsenergien  $\langle E \rangle$ . Også økningen av  $E_{\text{tot}}$  blir derfor en andre-ordens effekt. Det kan vises at

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{tot}}(0) + N \frac{\pi^2}{4} \frac{k_B^2 T^2}{E_F} \left( = \frac{3}{5} N E_F \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right] \right). \quad (\text{T8.31})$$

Dette betyr bl.a at trykket  $P = 2E_{\text{tot}}/3V$  av Fermi-gassen ved “lav” temperatur er bare ørlite grann større enn for  $T = 0$ , dvs nesten utelukkende et eksklusjonstrykk; den “termiske delen” av partikkelbevegelsen gir en svært liten økning (“liten til andre orden”) av trykket. I dette ligger det også at det kvantemekaniske trykket er mye høyere enn det klassiske trykket som følger fra den ideelle gassloven: Vi finner at forholdet mellom disse er

$$\frac{P}{P_{\text{kl}}} = \frac{2E_{\text{tot}}/3V}{N k_B T/V} \approx \frac{2}{5} \frac{E_F}{k_B T} \quad (k_B T \ll E_F). \quad (\text{T8.32})$$

Konklusjonen på denne diskusjonen er at den “kalde” Fermi-gassen (med  $T \ll E_F/k_B \equiv T_F$ ) på mange måter oppfører seg som i grunntilstanden (for  $T = 0$ ), med

$$P = \frac{\pi^{4/3} \hbar^2}{15m} \left( 3 \frac{N}{V} \right)^{5/3} \quad (T \ll E_F/k_B \equiv T_F). \quad (\text{T8.33})$$

Denne relasjonen er altså med god tilnærmelse **tilstandsligningen** for Fermi-gassen for  $T$  mye mindre enn **Fermi-temperaturen**,  $T_F \equiv E_F/k_B$ .<sup>5</sup>

Det viser seg at den ideelle Fermi-gass-modellen kan brukes med en viss grad av suksess på flere viktige fysiske systemer. Vi har alt nevnt ledningselektronene i metaller, hvor modellen gir viktig innsikt som en første tilnærmelse, selv om den kommer alvorlig til kort på dette feltet. Et annet eksempel er **kjerne-materie** i kjerner og nøytronstjerner, hvor denne enkle modellen også gir en viss innsikt. Det samme gjelder som nevnt for elektroner i hvite dverger, som er “langtkomne” og sterkt komprimerte stjerner, der elektrontettheten er svært høy. I alle disse tilfellene viser det seg at de aktuelle temperaturene er “lave” i forhold til Fermitemperaturene  $T_F \equiv E_F/k_B$ .

<sup>4</sup>Et lite tanke-eksperiment avslører at det kjemiske potensialet  $\mu(T)$  blir vesentlig mindre enn  $E_F$  og kanskje til og med negativt, dersom temperaturen er tilstrekkelig høy: Varmer vi opp Fermi-gassen til ekstremt høye temperaturer,  $T \gg E_F/k_B$ , vil så godt som alle fermionene bli eksitert til én-partikkel-tilstander med høye energier. Siden vi har et ubegrenset antall tilstander å ta av, skjønner vi da at besettelsestallene godt kan bli mindre enn 50% til og med for de “laveste” én-partikkel-tilstandene (med  $E \approx 0$ ). Ifølge (T8.25) må da  $\mu(T)$  være lavere enn de laveste energiene, dvs mindre enn null.

<sup>5</sup>Fermi-temperaturen  $T_F \equiv E_F/k_B$  er systemavhengig. Det er den temperaturen hvor  $k_B T$  blir lik systemets Fermi-energi  $E_F$ . Dette betyr bl.a at  $T_F$  øker med tettheten  $N/V$ .

## 8.2.b Fri-elektron-modellen for ledningselektroner i metaller

(Hemmer s 195, Griffiths s 193, B&J s 483)

I et metall er mesteparten av elektronene bundet til atomkjernene, og danner sammen med disse et tredimensjonalt krystall-gitter av positive ioner. De resterende elektronene, kalt **ledningselektronene**, beveger seg nokså fritt inne i metallet. Fordi ladningene til disse elektronene i gjennomsnitt nøytraliseres av plussladningene til ionene (nøytralt metallstykke), vil ledningselektronene tilnærmet bevege seg rundt som “nøytrale” fermioner.

Det virkelige potensialet som “sees” av det enkelte ledningselektronet er bestemt av ionegitteret og blir derfor et tredimensjonalt periodisk eller nesten periodisk potensial, avhengig av om krystallen er perfekt eller nesten perfekt. I **fri-elektron-modellen** erstattes dette potensialet med en konstant gjennomsnittsverdi, slik at metallstykket betraktes som en eneste stor brønn, med makroskopiske dimensjoner. En slik makroskopisk brønn kan med svært god tilnærming betraktes som en boks. Dermed har vi forenklet til en modell der ledningselektronene opptrer som “nøytrale” fermioner som beveger seg fritt inne i boksen, altså en ideell fermigass-modell.

### Antallstettheter og Fermi-energier

Fermi-energien (T8.20) for ledningselektronene kan skrives på formen

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} (3\pi^2 a_0^3 \frac{N}{V})^{2/3},$$

der  $\hbar^2/2m_e a_0^2 = 13.6 \text{ eV}$  er Rydberg-energien. Ved å skrive formelen på denne måten skjønner vi straks at  $E_F$  må bli av “atomær” størrelsesorden, fordi volumet  $V/N$  pr ledningselektron må være av samme størrelsesorden som atom-volumet, dvs  $a_0^3$  eller deromkring.

For en mer nøyaktig beregning av  $N/V$  trenger vi å kjenne antallet  $Z_l$  av ledningselektroner pr atom. Dette tallet varierer fra 1 til 5 for de forskjellige grunnstoffene. Dessuten må vi ha tak i det nøyaktige antallet av atomer pr volumenhet,  $N_a/V$ , som avhenger av massetettheten  $\rho_m$  og atommassen. Den siste er

$$m = \frac{A}{N_A},$$

der  $A$  er atomvekten (gram pr mol) og  $N_A = 0.6022 \times 10^{24}$  atomer pr mol er **Avogadrostall**. Da  $mN_a = \rho_m V$ , har vi at

$$\frac{N_a}{V} = \frac{\rho_m}{m} = N_A \frac{\rho_m}{A}.$$

Antallstettheten av ledningselektroner er altså

$$\frac{N}{V} = Z_l \frac{N_a}{V} = N_A \frac{Z_l \rho_m}{A}. \quad (\text{T8.34})$$

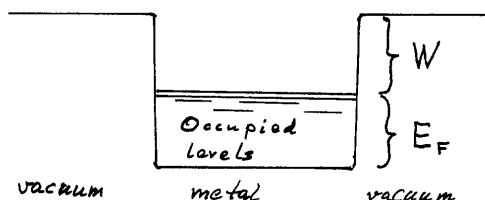
Vha denne formelen finner en at  $N/V$  i metaller varierer fra  $0.91 \times 10^{22}$  pr  $\text{cm}^3$  for cesium til  $24.7 \times 10^{22}$  pr  $\text{cm}^3$  for beryllium. Tabellen nedenfor gir  $N/V$  og de resulterende Fermi-energiene  $E_F$  for et utvalg av metaller. Som du ser er  $E_F$  ganske riktig av typisk “atomær” størrelsesorden.



Grunnstoff	$Z_c$	$N/V$ ( $10^{22}\text{cm}^{-3}$ )	$E_F$ (eV)	$T_F$ ( $10^4$ K)	$W$ (eV)
Li	1	4.70	4.74	5.51	2.38
K	1	1.40	2.12	2.46	2.22
Cu	1	8.47	7.00	8.16	4.4
Ag	1	5.86	5.49	6.38	4.3
Au	1	5.90	5.53	6.42	4.3
Be	2	24.7	14.3	16.6	3.92
Al	3	18.1	11.7	13.6	4.25

(Fra Ashcroft & Mermin, *Solid State Physics*.)

Tabellen inkluderer også Fermi-temperaturene  $T_F = E_F/k_B$ , og frigjøringsarbeidene  $W$ ; de siste er hentet fra eksperimenter. Frigjøringsarbeidet er den energien som må tilføres et elektron nær Fermi-flaten for at det skal unnsnippe fra metallet. I denne modellen er altså summen av  $W$  og  $E_F$  dybden av det brønnpotensialet vi bruker. Som vi ser er denne dybden typisk av størrelsesorden 10 eV.



Det mest slående trekket ved resultatene ovenfor er at de høye elektrontetthetene gir Fermi-energi som er mye høyere enn det karakteristiske “termiske” energibeløpet  $k_B T$  ved romtemperatur, som er  $k_B T \approx 0.025$  eV  $\approx 1/40$  eV. En annen måte å uttrykke dette på er å konstatere at Fermi-temperaturene  $T_F$  er av størrelsesorden  $10^4 - 10^5$  K. Dette betyr at Fermi-gassen av ledningselektroner virkelig er svært “kald” ( $T \ll T_F$ ) for et metall ved romtemperatur.

### Eksklusjonstrykk og bulk-modul

For et metall som kopper svarer Fermi-energien  $E_F = 7.00$  eV og antallstettheten  $N/V = 8.47 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$  til et eksklusjonstrykk

$$P = \frac{2}{3} \frac{E_{\text{tot}}}{V} \approx \frac{2}{5} \frac{N}{V} E_F = 2.37 \times 10^{29} \text{eV/m}^3 = 3.80 \times 10^{10} \text{N/m}^2.$$

Dette er et formidabelt trykk, av størrelsesorden  $4 \times 10^5$  atmosfærer. Med et slikt trykk blir den tilsvarende **isoterme kompressibiliteten**,

$$\kappa_T \equiv -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T,$$

svært liten. Den inverse av kompressibiliteten er den tilsvarende **bulk-modulen** for elektron-gassen,

$$B_{\text{el.gass}} \equiv \frac{1}{\kappa_T} = -V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T,$$

og denne blir da svært stor: <sup>6</sup> Siden  $P$  er proporsjonal med  $V^{-5/3}$ , finner vi at

$$B_{\text{el.gass}} = \frac{5}{3} P = 6.33 \times 10^{10} \text{ N/m}^2.$$

Dette er altså bulk-modulen for elektrongassen alene; vi har sett bort fra ionegitteret som utgjør resten av metallet. Eksperimentelt viser det seg at bulk-modulen for metallet i sin helhet er  $B_{\text{Cu}} = 13.4 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ . Moralen er at eksklusjonstrykket i elektrongassen står for en stor del av “motstanden” som metallet yter mot å bli komprimert.

[I likevekt ved normalt trykk og temperatur er den stabile tilstanden til metallet resultatet av et komplisert samspill mellom eksklusjonsprinsippet, som forsøker å utvide metallet, tiltrekningen mellom ledningselektronene og ionegitteret og “Pauli-frastøtningen” mellom elektronskyene i ionegitteret og ledningselektronene og mellom ionene innbyrdes.]

## Termiske egenskaper

Resultatet

$$E_{\text{tot}} \approx E_{\text{tot}}(0) + N \frac{\pi^2}{4} \frac{k_B^2 T^2}{E_F} \quad (k_B T \ll E_F)$$

fra fri-elektron-modellen gjør det også mulig å beregne **varmekapasiteten** for ledningselektronene,

$$C_V = \frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial T} = N k_B \left( \frac{1}{2} \pi^2 \frac{k_B T}{E_F} \right). \quad (\text{T8.35})$$

Denne er mye mindre enn det klassiske resultatet for elektrongassen, som er  $3Nk_B/2$ . <sup>7</sup> Varmekapasiteten til metallet ved normale temperaturer skyldes derfor nesten utelukkende bidragene fra ionenes bevegelse; bidraget fra ledningselektronene er en faktor

$$\frac{\frac{1}{2} \pi^2 k_B T / E_F}{3/2} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B T}{E_F} \sim 10^{-2}$$

mindre enn det en venter klassisk. Før utviklingen av kvantemekanikken var dette avviket mellom klassisk fysikk og eksperimenter et tankekor.

<sup>6</sup>I én dimensjon kan vi tilsvarende si at dersom det er vanskelig å trykke sammen en stålstang, så henger dette sammen med at **Youngs modul** er stor for stålet.

<sup>7</sup>Hvert av de “frie” elektronene har tre translasjonsfrihetsgrader. I klassisk statistisk mekanikk lærer en at den midlere kinetiske energien for hver av disse frihetsgradene er  $\frac{1}{2} k_B T$ . Dette kalles ekvipartisjonsprinsippet, og bevises i Statistisk fysikk.

### Bånd-teori for faste stoffer

(Hemmer s 213, Griffiths s 198)

Fri-elektron-modellen ovenfor neglisjerer både den direkte vekselvirkningen mellom ledningselektronene innbyrdes og de kreftene som skyldes periodisiteten i gitteret. Den første feilen er ikke så alvorlig; det er på en måte “eksklusjons-kreftene” som dominerer. Antakelsen om et konstant potensial inne i metallet, derimot, er en stor svakhet, og fører til at modellen ovenfor kommer alvorlig til kort på mange punkter.

Når det konstante potensialet erstattes med mer realistiske periodiske potensialer, gir teorien en rekke overraskende resultater: De tillatte én-partikkel-energiene blir ikke fordelt (kvasi-)kontinuerlig som ovenfor, men opptrer i **energi-bånd**. Med et metallstykke med  $N_{\text{ion}}$  ioner finner en i hvert slikt energibånd  $2N_{\text{ion}}$  tilstander. Mellom disse båndene er det **energi-gap**, hvor en ikke finner noen tilstander. Med denne bånd-teorien for faste stoffer er en i stand til å forklare bl.a forskjellene mellom isolatorer, ledere og halvledere. Denne teorien er en viktig del av **fastes stoffers fysikk**.

### 8.2.c Elektroner i hvite dverger (ikke pensum)

(Hemmer s 196, Griffiths s 218, B&J s 484)

Når fusjonsprosessene i en ordinær stjerne dør ut etter at alt “brennstoff” er forbrukt, vil stjerna etter hvert bli avkjølt. De indre delene klarer da ikke lenger å motstå “gravitasjonstrykket”, og stjerna vil kollapse til en **hvit dvergstjerne**. Det som kan få en slik gravitasjonskollaps til å stoppe er eksklusjonstrykket fra elektronene, som øker med tettheten. I stjerneplasmaet er det for såvidt også andre typer fermioner: protoner, nøytroner og tyngre kjerner. Men som vi har sett er både Fermi-energien  $E_F$  og eksklusjonstrykket  $P = \frac{2}{3} \frac{N}{V} E_F$  omvendt proporsjonale med fermionmassen  $m$ . Derfor gir elektronene det overlegent største bidraget til dette trykket.

For å forstå hvordan dette henger sammen bruker vi en forenklet modell (se Griffiths og B&J) hvor en stjerne med totalmasse  $M$  antas å ha konstant massetetthet. Antall nukleoner med masse  $m_n$  er da  $N_n \approx M/m_n$ . For hvert nukleon vil vi ha et visst antall  $q$  av fermioner (elektroner). I en hvit dverg er alle atomene fullt ionisert.  $q$  vil derfor være litt mindre enn 0.5, fordi massetallene for de opprinnelige atomene er noe større enn  $2Z$  i gjennomsnitt. Vi har altså et totalt antall  $N_f = qN_n$  av fermioner (elektroner) med masse  $m_f$  ( $m_e$ ) i stjernevolumet  $V = \frac{4}{3}\pi R^3$ . Dette svarer ifølge (T8.20) til en Fermi-impuls

$$p_F = \frac{\hbar}{R} \left( \frac{9\pi}{4} qN_n \right)^{1/3}. \quad (\text{T8.36})$$

Regner vi nå ikke-relativistisk, med en Fermi-energi  $E_F = p_F^2/2m_f$ , så blir den totale kinetiske energien  $E_{\text{kin}} = \frac{3}{5} N_f E_F$  til dverg-stjerna omvendt proporsjonal med kvadratet av stjernegraden:

$$E_{\text{kin}} = \frac{a}{R^2}, \quad \text{med} \quad a = \frac{3}{5} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} (qN_n)^{5/3} \frac{\hbar^2}{2m_f}. \quad (\text{T8.37})$$

[I dette estimatet har vi neglisjert den kinetiske energien til protoner og kjerner. Siden temperaturen i en hvit dverg er av størrelsesorden  $10^6 - 10^7$  K, vil hver av disse partiklene bidra til  $E_{\text{kin}}$  med et beløp av størrelsesorden  $k_B T \sim 1$  keV, som er mye mindre enn  $E_F = p_F^2/2m_e$ .] Det koster altså energi, i form av en økning av  $E_{\text{kin}}$ , dersom stjerna skal trekke seg sammen.

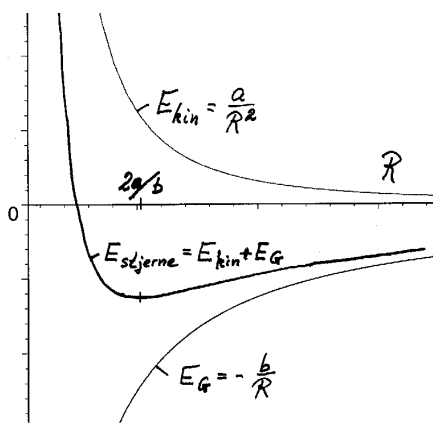
Samtidig frigjøres det *potensiell* energi (gravitasjonsenergi) under sammentrekningen. Når vi regner med konstant tetthet, er det lett å vise at den potensielle energien for en gitt  $R$  er

$$E_G = - \int \frac{Gm(r)dm}{r} = -G \int_0^R \frac{(\rho \cdot 4\pi r^3/3)(\rho \cdot 4\pi r^2)dr}{r} = -\frac{3}{5} \frac{GM^2}{R} \equiv -\frac{b}{R}, \quad (\text{T8.38})$$

der  $G$  er gravitasjonskonstanten. Som funksjon av  $R$  er altså stjernas totale energi

$$E_{\text{stjerne}} = E_{\text{kin}} + E_G = a/R^2 - b/R. \quad (\text{ikke-relativistisk}) \quad (\text{T8.39})$$

Dette illustreres i diagrammet nedenfor.



Endringen av den totale energien ved en endring  $\Delta R$  er

$$\Delta E_{\text{stjerne}}(R) = \frac{dE_{\text{stjerne}}}{dR} \Delta R = \left( -\frac{2}{a}R^3 + \frac{b}{R^2} \right) \Delta R = -\Delta R \frac{b}{R^3} \left( \frac{2a}{b} - R \right).$$

For  $\Delta R < 0$  er det første leddet på høyresiden positivt og representerer økningen i kinetisk energi. Det andre leddet er negativt og forteller at den potensielle energien avtar (blir mer negativ) når  $R$  avtar. For  $R > 2a/b$  ser vi at det siste beløpet er størst, slik at sammentrekningen kan fortsette. For  $R = 2a/b$  er vi kommet til et likevektspunkt. En videre sammentrekning ville frigjøre mindre gravitasjonsenergi enn det som trengs for å gi den nødvendige økningen av den kinetiske energien. Derfor stopper prosessen opp for  $R = 2a/b$ : Stjerna stabiliserer seg der hvor den totale energien har sitt minimum.

Denne forenklede modellen indikerer at kollapsen ender med en hvit dverg med radius

$$R = \frac{2a}{b} = \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{q^{5/3} \hbar^2}{G m_f m_n^2 N_n^{1/3}}. \quad (\text{T8.40})$$

Her er  $m_f$  og  $m_n$  hhvis elektron- og nukleonmassene, og antallet  $q$  av elektroner pr nukleon er omlag  $\frac{1}{2}$ . De numeriske faktorene i denne beregningen trenger ikke å være helt korrekte, fordi vi har forenklet ganske kraftig ved bl.a å regne med konstant tetthet og ikke-relativistisk teori. Men hovedbudskapet er korrekt: Radien avtar med økende nukleontall, som  $N_n^{-1/3}$ . Jo tyngre stjerne, desto mindre hvit dverg. Innsetting av tallverdier gir en radius  $R \sim 10^2 - 10^3$  km

<sup>8</sup>Merk at denne beregningen er helt analog med beregningen av den potensielle energien for en homogen kuleformet ladningsfordeling.

(dvs noe mindre enn jordradien) for en stjerne med én solmasse  $M_\odot$ .<sup>9</sup> Mer realistiske beregninger gir noe større radier, av størrelsesorden 5000 km for én solmasse. De hvite dvergene er altså svært kompakte objekter, med massetettheter av størrelsesorden  $10^6$  g pr  $\text{cm}^3$ .

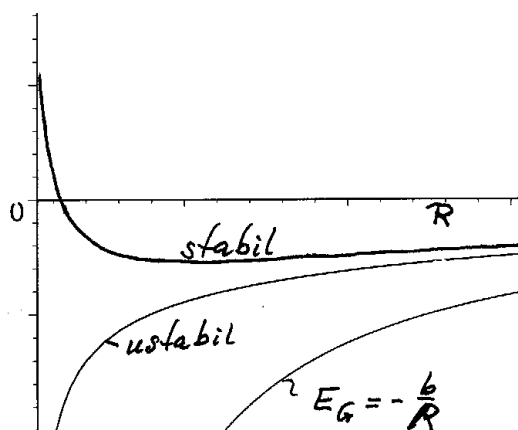
Faktum er at tettheten er så høy at Fermi-gassen lett blir relativistisk i de sentrale delene av stjerna. For relativistiske elektroner vil den kinetiske energien  $E_{\text{kin}}$  øke langsommere med avtagende  $R$  enn i regnestykket ovenfor. Dette skjønner vi ved å gå til den ultra-relativistiske grensen, hvor  $E_F \approx cp_F$ . En ny beregning av den kinetiske energien (se nederst side 9) vil i denne grensen gi  $\langle E \rangle \approx \frac{3}{4}cp_F = \frac{3}{4}E_F$ , og  $E_{\text{kin}} = N_f \langle E \rangle \approx \frac{3}{4}qN_n cp_F$ . Med

$$p_F = \frac{\hbar}{R} \left( \frac{9\pi}{4} qN_n \right)^{1/3} \quad \text{og} \quad E_G = -\frac{3}{5} \frac{Gm_n^2}{R} N_n^2$$

fra beregningen ovenfor, ser vi at både den kinetiske og den potensielle energien vil gå som  $1/R$  for små  $R$ :

$$E_{\text{stjerne}} \approx \frac{a_{\text{rel}}}{R} - \frac{b}{R} \approx \frac{1}{R} \left[ \frac{3\hbar c}{4} \left( \frac{9\pi}{4} q^4 \right)^{1/3} N_n^{4/3} - \frac{3}{5} Gm_n^2 N_n^2 \right].$$

For store  $R$  gjelder den ikke-relativistiske beregningen fortsatt. For store men avtagende  $R$  vil altså  $E_{\text{stjerne}}$  fortsatt avta et stykke innover. Men skal vi være sikret stabilitet, må energien begynne å vokse igjen for tilstrekkelig små  $R$ . Uttrykket ovenfor viser at dette ikke er noen selvfølge. Dette uttrykket vokser som  $1/R$  for avtagende  $R$  dersom hakeparentesen er positiv. I motsatt fall går det mot  $-\infty$  for små  $R$ . Figuren nedenfor viser gravitasjonsenergien  $E_G = -b/R$  og prinsippskisser av den totale stjerneenergien for ett tilfelle som gir stabilitet og ett hvor den nevnte hakeparentesen er negativ, slik at systemet er ustabil.



Dette betyr rett og slett at eksklusjonstrykket fra elektronene kan gi en stabil hvit dverg bare dersom hakeparentesen er positiv. Igjen er de numeriske faktorene usikre, men essensen er klar: Fordi den kinetiske energien går som  $N_n^{4/3}$ , mens den potensielle energien er proporsjonal med kvadratet av nukleontallet  $N_n$ , er vi sikret stabilitet bare dersom  $N_n$  ikke er for stor, dvs for

$$N_n \leq \left[ \frac{5\hbar c}{4Gm_n^2} \left( \frac{9\pi}{4} q^4 \right)^{1/3} \right]^{3/2} \sim 2 \times 10^{57}. \quad (\text{T8.41})$$

<sup>9</sup>Solas masse er  $M_\odot = 1.989 \times 10^{30}$  kg. Radien er  $R_\odot = 6.96 \times 10^5$  km.

Tyngre stjerner enn dette vil altså ikke ende opp som hvite dverger. Dette ble vist av S. Chandrasekhar in 1931, som fant den såkalte **Chandrasekhar-grensen**,

$$M \approx 1.4(2q)^2 M_{\odot}.$$

Stjerner med større masse enn dette vil fortsette kollapsen, og ved de store elektrontetthetene som da oppstår blir invers  $\beta$ -desintegrasjon,  $e^- + p \rightarrow n + \nu$ , energetisk fordelaktig. Dette fjerner noen av elektronene og reduserer eksklusjonstrykket fra elektronene, slik at ustabiliteten øker. Den frigjorte energien, bl.a fra de emitterte nøytrinoene, antas å skape en eksplosjon kjent som en supernova. Under denne blir de ytre delene av stjerna slynget ut, mens den indre kjernen ender opp som en nøytronstjerne, der alle elektronene er oppspist av invers  $\beta$ -desintegrasjon. En slik nøytronstjerne kan igjen betraktes som en Fermi-gass, der stabiliteten nå må sikres av eksklusjonstrykket fra nøytronene. Forutsatt at denne nøytrongassen ikke er relativistisk, kan vi igjen bruke den ikke-relativistiske formelen (T8.40) (nå med  $q = 1$  og  $m_f = m_n$ ) til å beregne radien som gir stabilitet. Dette gir radier som er en faktor  $\sim 1000$  mindre enn for de hvite dvergene, dvs noen få km. De resulterende massetetthetene viser seg å bli noe større enn for kjerne-materie, av størrelsesorden  $10^{44}$  nukleoner pr  $\text{m}^3$ , eller  $10^{15} \text{ g/cm}^3$ . Selv om en nøytronstjerne kan ha en temperatur rundt  $10^9 \text{ K}$ , så utgjør den en "kald" Fermi-gass. Ved slike tettheter er nemlig Fermi-temperaturen mye høyere,  $\sim 10^{11} \text{ K}$ .

Men igjen er det slik at nøytronene blir relativistiske dersom massen er for stor, og da kan stjerna kollapse til et **svart hull**. Masse-grensen antas her å ligge på ca  $3M_{\odot}$ . Beregning av denne grense-massen krever at en tar hensyn bl.a til generell relativitetsteori og vekselvirkningen mellom nøytronene, dvs det holder ikke å betrakte nøytrongassen som ideell.

**En liten oppgave:** Ved tilstrekkelig store tettheter vil en kald Fermi-gass bli relativistisk. For å få et begrep om hvilke tettheter som skal til kan vi finne ut hvor stor tetthet  $N/V$  som gir en Fermi-impuls  $p_F$  lik  $mc$ . (For en ikke-relativistisk Fermi-gass er  $p_F \ll mc$ . For en ultra-relativistisk gass er  $p_F \gg mc$ .) Vis at denne tettheten er

$$\frac{N}{V} = \frac{8\pi}{3\lambda_C^3},$$

der  $\lambda_C = h/mc$  er Compton-bølgelengden for fermionene med masse  $m$ . Finn denne  $N/V$ -verdien for elektroner, og for nøytroner. (Oppgitt: Fermi-impulsen er  $p_F = \hbar(3\pi^2 N/V)^{1/3}$ , Compton-bølgelengden for elektroner er  $2.426 \cdot 10^{-12} \text{ m}$  og  $m_n/m_e \approx 1838$ . Svar: Mye større enn f.eks tettheten av ledningselektroner:  $0.59 \cdot 10^{36} \text{ m}^{-3}$  for elektroner, og  $3.6 \cdot 10^{45} \text{ m}^{-3}$  for nøytroner. Sistnevnte svarer til en massetetthet på ca  $6 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$ .)

## 8.2.d Fermigass-modellen for kjerner

(B&J s 510, Brehm & Mullin s 695)

Nukleonene (protoner og nøytroner) i en kjerne holdes som tidligere nevnt sammen av den **sterke** men veldig kort-rekkende nukleon-nukleon-kraften. Denne tiltrekkende kraften er (nødvendigvis) mye sterkere enn Coulomb-frastøtningen mellom protonene. Den totale bindingsenergien i en kjerne er noenlunde proporsjonal med **massetallet**  $A$ , og er på det meste (for jern) 8–9 MeV pr nukleon.

**Kjerneradien**  $R$  går som

$$R \approx R_0 A^{1/3}, \quad \text{der } R_0 \approx 1.07 \text{ fm.}$$

Dette betyr at kjernevolumet er tilnærmet proporsjonalt med  $A$ ,

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3 \approx A \cdot \frac{4}{3}\pi R_0^3.$$

Hvert nukleon opptar altså et volum  $\approx \frac{4}{3}\pi R_0^3$  ( $\sim$  volumet av et proton) i alle kjerner. For å forklare dette viser det seg at en tvinges til å anta at nukleon-nukleon-kraften er sterkt frastøtende for små avstander,  $r \leq 0.4\text{--}0.5$  fm. (Se B&J s 507.)



I og med at hvert nukleon opptar omtrent det samme volumet  $4\pi R_0^3/3$  i alle kjerner, er det fristende å tenke på kjernen som en samling av tettpakkede “kuler”, én for hvert nukleon. Da kan vi også fristes til å tenke på kjernen som en “statisk” samling av slike “kuler”. Men selvsagt er et slikt bilde helt uholdbart kvantemekanisk. Nukleonene kan definitivt ikke ligge i ro. Uskarphetsprinsippet (“kvantevillskapen”) og Pauli-prinsippet gjør at de må bevege seg ganske fort!

Vi kan danne oss et grovt bilde av denne bevegelsen ved å betrakte protonene og nøytronene hver for seg som ideelle Fermi-gasser, i et volum  $V$  avgrenset av overflata til kjernen. Dette er den såkalte **fermigass-modellen for kjerner**, der vi i første omgang ser bort fra vekselvirkningen mellom nukleonene. I denne enkle modellen danner kjernevolumet en kuleformet brønn, med en dybde som kommer ut som  $\sim 50$  MeV. Med  $Z$  protoner og  $N$  nøytroner i volumet  $V = A \cdot \frac{4}{3}\pi R_0^3$  finner vi fra (T8.36) at Fermi-impulsen for protonene er

$$p_F^{(p)} = \hbar \left( 3\pi^2 \frac{Z}{V} \right)^{1/3} = \frac{\hbar}{R_0} \left( \frac{9\pi}{4} \frac{Z}{A} \right)^{1/3}, \quad (A = Z + N) \quad (\text{T8.42})$$

og tilsvarende for nøytronene. De to Fermi-energiene blir da

$$E_F^{(p)} = \frac{\hbar^2}{2MR_0^2} \left( \frac{9\pi}{4} \frac{Z}{A} \right)^{2/3} \quad \text{og} \quad E_F^{(n)} = \frac{\hbar^2}{2MR_0^2} \left( \frac{9\pi}{4} \frac{N}{A} \right)^{2/3}. \quad (\text{T8.43})$$

Med  $M \approx 939 \text{ MeV}/c^2 \approx 1840 m_e$ ,  $R_0 \approx 1.07 \text{ fm}$  og  $N/A \sim Z/A \sim 1/2$  finner vi at disse energiene er anslagsvis

$$E_F^{(p)} \sim E_F^{(n)} \sim 43 \text{ MeV.}$$

Dette viser at hastigheten til nukleonene er av størrelsesorden

$$v = c \sqrt{\frac{2E}{Mc^2}} \sim c \sqrt{1/20} \sim 0.2 c.$$

Vi kan altså med rimelig god samvittighet behandle dem ikke-relativistisk, men vi ser at de ikke akkurat beveger seg sakte!

Med denne enkle modellen kan vi også forklare hvorfor de mest stabile kjernene foretrekker tilnærmet samme protontall som nøytrontall,  $N \sim Z$ . Dette gjelder først og fremst for lette kjerner. For de tyngre finner vi en preferanse for større  $N$  enn  $Z$ . Men *det* henger sammen med Coulomb-frastøtningen mellom protonene, som vi foreløpig har sett bort fra (i og med at vi neglisjerer all vekselvirkning mellom fermionene).

Fra uttrykkene ovenfor følger det at den totale kinetiske energien til de to gassene er

$$E_{\text{kin}} = \frac{3}{5}Z \cdot E_F^{(p)} + \frac{3}{5}N \cdot E_F^{(n)} = k[(Z/A)^{5/3} + (N/A)^{5/3}],$$

der

$$k \equiv \frac{3}{5}A \cdot \frac{\hbar^2}{2MR_0^2} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}, \quad \text{og} \quad N = A - Z.$$

En kjerne kan “gjøre om” nøytroner til protoner eller omvendt ved  $\beta$ -desintegrasjon eller den inverse prosessen. (Se Brehm & Mullin s 692 og 761.) Derfor er det relevant å holde massetallet  $A$  konstant, og variere  $Z$  og  $N = A - Z$  for å finne minimum av  $E_{\text{kin}}$ . Det er lett å se at minimum oppnås for  $Z = N = A/2$ : Ved å sette  $Z = \frac{1}{2}A - x$  og  $N = \frac{1}{2}A + x$ , og bruke binomialutviklingen finner vi at

$$\begin{aligned} \left(\frac{Z}{A}\right)^{5/3} &= \left(\frac{1}{2}\right)^{5/3} \left(1 - \frac{2x}{A}\right)^{5/3} = \left(\frac{1}{2}\right)^{5/3} \left(1 - \frac{10x}{3A} + \frac{20x^2}{9A^2} + \dots\right), \\ \left(\frac{N}{A}\right)^{5/3} &= \left(\frac{1}{2}\right)^{5/3} \left(1 + \frac{2x}{A}\right)^{5/3} = \left(\frac{1}{2}\right)^{5/3} \left(1 + \frac{10x}{3A} + \frac{20x^2}{9A^2} + \dots\right), \end{aligned}$$

Innsatt gir dette

$$E_{\text{kin}} \approx \frac{3}{20}(9\pi)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2MR_0^2} \frac{1}{A} \left[A^2 + \frac{20}{9}(\frac{1}{2}A - Z)^2\right],$$

som er minimal for  $Z = N = \frac{1}{2}A$ , slik vi skulle vise.

Andre-ordens-leddet i dette uttrykket går som

$$\frac{(9\pi)^{2/3}}{6} \frac{\hbar^2}{MR_0^2} \frac{(\frac{1}{2}A - Z)^2}{A}.$$

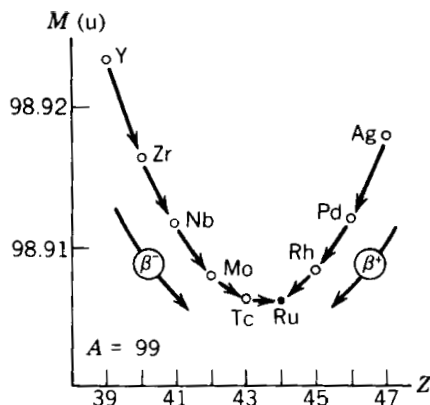
Dette leddet kan vi sammenligne med det såkalte **symmetri-leddet** i en *empirisk* formel for atom-masser,

$$\begin{aligned} M(^A\text{X}) &= Z M(^1\text{H}) + (A - Z)M_n \\ &- \left[ a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_4 \frac{(\frac{1}{2}A - Z)^2}{A} + \epsilon_5 \right] / c^2. \end{aligned} \quad (\text{T8.44})$$

(Se Brehm & Mullin s 691-699.) Her representerer hakeparentesen den totale bindingsenergien i kjernen. Vi ser at det fjerde leddet i hakeparentesen er akkurat av den typen vi har funnet ovenfor. Den enkle fermigass-modellen gir altså en kvalitativ teoretisk forklaring av dette empiriske leddet. Det tredje empiriske leddet tar hensyn til Coulomb-frastøtningen mellom protonene. Også dette kan begrunnes teoretisk; beregningen er helt analog med utregningen av gravitasjonsenergien i (T8.38).

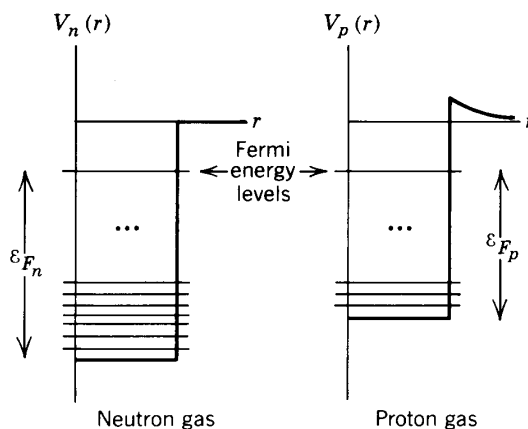
Fra disse to leddene tilsammen følger det at den mest stabile **isobaren** (for fastholdt  $A$ ) vil ha noe større  $N$  enn  $Z$ , særlig for store  $A$ . Et eksempel er  ${}^{238}_{92}\text{U}$ . Figuren viser isobarer for  $A = 99$ .





Her ser vi hvordan ustabile kjerner kan endre atomnummer i retning av den mest stabile isobaren, via  $\beta^-$ -desintegrasjon eller invers  $\beta^-$ -desintegrasjon. (Se Brehm & Mullin s 692 og 761.)

Coulomb-frastøttingsleddet ovenfor kan trekkes inn i fermigass-modellen ved at en “hever” brønnpotensialet for protonene, som vist i figuren til høyre nedenfor. Den mest stabile isobaren kan karakteriseres ved at Fermi-nivåene blir liggende like høyt, som vist i figuren. I denne situasjonen er (den kinetiske) Fermi-energien for nøytronene større enn for protonene, i samsvar med at nøytrontallet  $N$  er større enn protontallet  $Z$ .



## 8.3 Ideell Bose-gass

### 8.3.a Bose–Einstein-fordelingen

(Griffiths s 214, Brehm & Mullin s 552)

Paulis eksklusjonsprinsipp er som vi husker en konsekvens av eksperimentelle fakta: Naturen krever at identiske fermioner (partikler med spinn  $1/2$ ,  $3/2$ ,  $5/2$  osv) beskrives med bølgefunksjoner som er *antisymmetriske* med hensyn på ombytte av et vilkårlig par av partikkelindekser. (Uansett hvilke to fermioner vi bytter om — enten det er nr 1 og 2 eller nr 4 og 7 — så skal bølgefunksjonen bytte fortegn.) En slik bølgefunksjon kan skrives som en determinant, og vi husker at denne automatisk blir lik null dersom vi prøver å putte mer enn ett fermion inn i samme én-partikkel-tilstand. Determinanten tar altså automatisk vare på Pauli-prinsippet. (Se Hemmer s 189–192 eller Griffiths s 179.)

Vi husker også at for identiske bosoner (partikler med spinn 0, 1, 2, osv) må bølgefunksjonene tilsvarende være *symmetriske* med hensyn på ombytte av partikkelindekser. Da er det ingen ting som hindrer oss i å plassere mer enn ett boson i samme tilstand. Tvert imot har bosonene en tendens til å *foretrekke* dette.

I kvantestatistikk (jf Statistisk fysikk) kommer dette til uttrykk i **Bose–Einsteins fordelingslov**. Denne sier at når et system av identiske bosoner er i likevekt ved temperaturen  $T$ , så er det forventede eller gjennomsnittlige besettestallet i en én-partikkel-tilstand med energi  $E$  gitt ved

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} - 1}. \quad \left( \begin{array}{l} \text{Bose–Einstein-} \\ \text{fordelingen} \end{array} \right) \quad (\text{T8.45})$$

Formelt skiller denne seg fra Fermi–Dirac-fordelingen bare ved fortegnsskiftet i siste ledd i nevneren. Men dette fortegnet har stor betydning: Det betyr bl.a at besettestallet blir større enn 1 for

$$(E - \mu)/k_B T < \ln 2.$$

Her er  $\mu$  igjen det **kjemiske potensialet**. For systemer der antallet  $N$  av bosoner er bevart (som for eksempel for en gass av helium-4-atomer i et volum  $V$ ), bestemmes  $\mu(T)$  implisitt av relasjonen

$$N = \int_0^\infty \frac{g(E)dE}{e^{(E-\mu)/k_B T} - 1}. \quad (\text{T8.46})$$

Som i den tilsvarende relasjonen (T8.29) for fermioner, er  $g(E)dE$  her antall *tilstander* i intervallet  $(E, E + dE)$ , og selve integranden er det forventede antallet *bosoner* med energier i dette intervallet. Også for bosoner vil derfor det kjemiske potensialet avhenge av temperaturen (i tillegg til de øvrige systemparametrene).

For de (masseløse) fotonene er antallet ikke bevart; når vi varmer opp en bakerovn øker fotontallet kraftig. I statistisk fysikk lærer en at det kjemiske potensialet da er lik null. Betrakter vi en svingemode med frekvens  $\nu$  og én av de to mulige polarisasjonsretningene for det elektriske feltet — eller som vi sier i kvantemekanikk, en tilstand med energi  $E = h\nu$  — så sier Bose–Einsteins fordelingslov at besettestallet (antall fotoner) i denne tilstanden er

$$\langle n \rangle_f = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (\text{fotoner}) \quad (\text{T8.47})$$

### 8.3.b Maxwell–Boltzmann-fordelingen

Vi skal straks komme tilbake til fotonene, men først et lite tanke-eksperiment. Dersom en gass av massive bosoner (ikke fotoner) eller av fermioner varmes opp til en veldig høy temperatur, kan vi alle forestille oss at de fleste partiklene vil bli eksitert til høye energier. Som vi var inne på i fotnoten side 15, kan hver partikkel da velge mellom et veldig stort antall av ledige tilstander. Resultatet er at det blir nokså glissent mellom de *besatte* tilstandene; besettelsestallene

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} \mp 1} \quad (\text{T8.48})$$

blir til slutt mye mindre enn 1 når temperaturen er blitt tilstrekkelig høy. Eksponensialfunksjonen i nevneren ovenfor er da mye større enn 1, slik at besettelsestallene er tilnærmet gitt ved

$$\boxed{\langle n \rangle \approx e^{-(E-\mu)/k_B T}} \quad \left( \begin{array}{l} \text{Maxwell–Boltzmann-} \\ \text{fordelingen} \end{array} \right) \quad (\text{T8.49})$$

enten det dreier seg om bosoner eller fermioner. Denne formelen er i statistisk fysikk kjent som **Maxwell–Boltzmanns fordelingslov**. Moralen er at for tilstrekkelig høye temperaturer (eller tynne gasser) spiller det ingen rolle om partiklene er fermioner eller bosoner. Historisk ble Maxwell–Boltzmann-fordelingen funnet lenge før kvantemekanikken. Den kan utledes ved klassiske betraktninger, og forutsetter i motsetning til kvantemekanikken at en kan skjelve mellom de identiske partiklene.

Her skal vi nå merke oss en viktig konsekvens av denne fordelingsloven. Dersom vi sammenligner to én-partikkel-tilstander  $\psi_a$  og  $\psi_b$ , og forholdene er slik at formelen ovenfor er gyldig, så følger det at forholdet mellom de to besettelsestallene er

$$\frac{\langle n \rangle_b}{\langle n \rangle_a} = e^{-(E_b - E_a)/k_B T}. \quad (\text{T8.50})$$

Moralen i denne formelen er at tilstanden med lavest energi er “mest populær” når systemet er i likevekt ved temperaturen  $T$ . Og vi ser at forskjellen i popularitet blir større jo større energiforskjellen  $E_b - E_a$  er i forhold til  $k_B T$ . Faktoren ovenfor kalles en Boltzmann-faktor, og er på mange måter klassisk statistisk mekanikk i et nøtteskall.

### 8.3.c Plancks strålingslov

Så tilbake til fotonene. Som nevnt side 8, er grensebetingelsene for elektromagnetiske bølger i et hulrom (f.eks en boks) essensielt de samme som for de Broglie-bølgene. Derfor er antall svingemoder (tilstander) i faserom-elementet  $V d^3 p$  gitt ved (T8.11) multiplisert med en faktor 2, som tar hensyn til de to ortogonale polarisasjonene,

$$dN = 2V d^3 p / h^3;$$

Med  $d^3 p = 4\pi p^2 dp$  og  $p = E/c = h\nu/c$  finner vi da at antall *moder* i frekvensintervallet  $(\nu, \nu + d\nu)$  er

$$dN = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu. \quad (\text{T8.51})$$

Det forventede antallet fotoner i hver mode er gitt av (T8.47). Derfor er det forventede antallet fotoner i intervallet  $(\nu, \nu + d\nu)$

$$n(\nu)d\nu = \frac{8\pi V}{c^3} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (\text{T8.52})$$

Ved å multiplisere med fotonenergien  $h\nu$  og dividere med volumet  $V$ , finner vi **energitettheten** (energi pr volumenheter) fra fotonene i frekvensintervallet  $d\nu$ :<sup>10</sup>

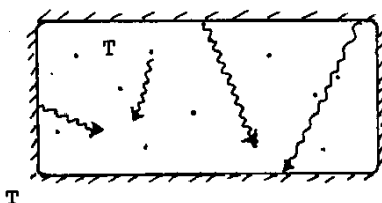
$$\boxed{u(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}} \quad \left( \begin{array}{l} \text{Plancks} \\ \text{strålingslov} \end{array} \right) \quad (\text{T8.53})$$

Dette er **Plancks strålingslov**, som ble funnet i 1900. Her ble Plancks konstant  $h$  introdusert for første gang, og dette var på en måte startskuddet for utviklingen av kvantemekanikken (Se Hemmer s 9, og notatet “Tillegg 1”).

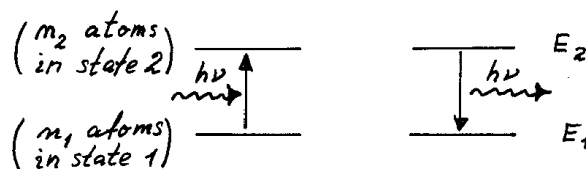
### 8.3.d Einsteins $A$ - og $B$ -koeffisienter

(Griffiths s 311, Brehm & Mullin s 170)

Figuren viser en boks som inneholder både fotoner og atomer, i likevekt ved temperaturen  $T$ .



Selv når systemet er i likevekt foregår det her hele tiden absorpsjon og emisjon av fotoner ved veggene, og også ved at enkelte atomer eksiteres eller de-eksiteres. La oss betrakte to av de mange mulige tilstandene for atomene,  $\psi_1$  og  $\psi_2$ , med energiene  $E_1$  og  $E_2$ . Antallene av atomer som befinner seg i tilstandene 1 og 2 kan vi kalle hhvis  $n_1$  og  $n_2$ . Atomene kan “hoppe” mellom disse tilstandene ved å absorbere eller emittere et foton med energi  $h\nu = E_2 - E_1$ :



På den måten kan antallene i prinsippet fluktuere, men ved likevekt (og når disse antallene er store) er forholdet mellom dem svært nøyaktig bestemt av Boltzmann-faktoren

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-(E_2 - E_1)/k_B T} = e^{-h\nu/k_B T}. \quad (\text{T8.54})$$

<sup>10</sup> $u(\nu)$  er altså energi pr volum- og frekvens-enhet.

Samtidig kan vi merke oss at energitettheten (energi pr volum- og frekvens-enhet) for de fotonene som er involvert ved overgangene mellom 1 og 2 er

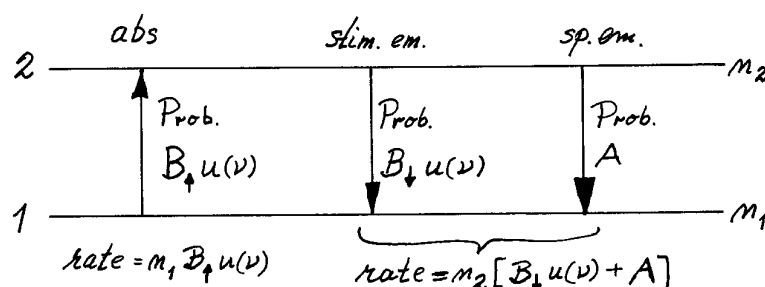
$$u(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \equiv \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \langle n \rangle_f, \quad (\text{T8.55})$$

ifølge Plancks lov.

Selv ved likevekt skjer det hele tiden en “transport” av atomer opp og ned mellom de to tilstandene: Fotonene med frekvens  $\nu$  vil hele tiden eksitere *noen* av atomene fra tilstand 1 til tilstand 2. Sannsynligheten pr tidsenhet for at et atom i tilstand 1 skal absorbere et av disse fotonene må være proporsjonal med sjansen for å møte et slikt foton, dvs med energitettheten  $u(\nu)$ :

$$P_{\text{abs}} = B_{\uparrow} u(\nu), \quad (\text{T8.56})$$

der  $B_{\uparrow}$  er en proporsjonalitetskonstant. Antallet atomer som blir eksitert pr tidsenhet skulle da bli  $n_1 P_{\text{abs}} = n_1 B_{\uparrow} u(\nu)$ :



Denne “strømmen” (antall pr tidsenhet; eng.: rate) av atomer som eksiteres ville isolert sett øke  $n_2$  og minke  $n_1$ . Men denne tendensen motvirkes av at hvert av atomene i tilstand 2 har en viss sannsynlighet for å havne i tilstand 1 via **spontan emisjon** av et foton med frekvens  $\nu$ . I betegnelsen “spontan” ligger det at dette er noe som skjer uavhengig av om det er andre fotoner til stede. Derfor er sannsynligheten uavhengig av  $u(\nu)$  og konstant,  $P_{\text{sp.em}} = A$ . “Strømmen” som de-eksiteres blir da  $n_2 A$ . Men som vi skal se vil ikke denne oppveie den første strømmen. Einstein, som opprinnelig etablerte dette resonnetet og innførte de såkalte **Einstein-koeffisientene**  $A$  og  $B$ , måtte “finne opp” enda et bidrag, såkalt **stimulert emisjon**, der stimulansen kommer fra fotonene med frekvens  $\nu$ . Også denne sannsynligheten måtte da være proporsjonal med sjansen for å møte et av disse fotonene. Einstein antok derfor at

$$P_{\text{stim}} = B_{\downarrow} u(\nu), \quad (\text{T8.57})$$

med en tredje koeffisient,  $B_{\downarrow}$ . Dette skulle gi en induert “strøm”  $n_2 B_{\downarrow} u(\nu)$  av de-eksiterte atomer. (I 1917 var dette et overraskende grep: Når atomer utsettes for stråling, kan det ikke bare hende at de absorberer noe av denne; de kan også gi fra seg stråling!)

For å se hvordan Einstein kom fram til dette kan vi samle de tre bidragene. Netto-“strømmen” fra 1 til 2 blir

$$\frac{dn_2}{dt} = n_1 B_{\uparrow} u(\nu) - n_2 (B_{\downarrow} u(\nu) + A).$$

Ved likevekt er både  $n_1$  og  $n_2$  konstante (bortsett fra ubetydelige fluktuasjoner, som nevnt). Vi finner altså sammenhengen

$$n_1 B_{\uparrow} u(\nu) = n_2 (B_{\downarrow} u(\nu) + A),$$

som viser at de tre Einstein-koeffisientene ikke er uavhengige. Her er det nå lurt å løse mhp  $u(\nu)$ , og bruke at forholdet  $n_2/n_1$  er gitt av Boltzmann-faktoren ovenfor. Dette gir

$$u(\nu) = \frac{A}{B_{\downarrow}} \frac{1}{(B_{\uparrow}/B_{\downarrow}) e^{h\nu/k_B T} - 1}.$$

Denne formelen kunne Einstein sammenligne med Plancks strålingslov (T8.55). Konklusjonen var at de to  $B$ -koeffisientene må være like, mens  $A/B$  kommer ut proporsjonal med tredje potens av frekvensen:

$$\boxed{\begin{aligned} B_{\uparrow} &= B_{\downarrow} \equiv B, \\ \frac{A}{B} &= \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} = \langle n \rangle_f. \end{aligned}} \quad \left( \begin{array}{l} \text{Einstein-} \\ \text{koeffisientene} \end{array} \right) \quad (\text{T8.58})$$

På denne måten klarte Einstein å vise at sannsynlighetene for absorpsjon og stimulert emisjon må være like, gitt ved  $Bu(\nu)$ .

Fra den siste relasjonen ovenfor følger det at forholdet mellom sannsynlighetene for *stimulert* emisjon og *spontan* emisjon er lik besettelsestallet:

$$\frac{P_{\text{stim}}}{P_{\text{sp.em}}} = \frac{Bu(\nu)}{A} = \langle n \rangle_f = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (\text{T8.59})$$

Betydningen av dette kan illustreres med et par eksempler:

(i) Anta at vi har et eksitert atom i en boks ved romtemperatur ( $k_B T \sim 0.025$  eV), og ser på en optisk overgang, som svarer til emisjon av et foton i det synlige området, med  $h\nu \sim 2$  eV. Da er  $h\nu/k_B T \sim 80$ , og de relevante besettelsestallene  $\langle n \rangle_f \approx e^{-h\nu/k_B T} \sim e^{-80}$  er så små at sannsynligheten for stimulert emisjon blir helt ikke-eksisterende. Emisjonen må skje spontant.

(ii) Dreier det seg derimot om en overgang i mikrobølgeområdet, blir  $h\nu/k_B T \sim 10^{-4}/0.025 \sim 1/250$ . Da er besettelsestallene store,

$$\langle n \rangle_f = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \approx \frac{k_B T}{h\nu} \sim 250.$$

I slike tilfeller vil derfor stimulert emisjon dominere kraftig over den spontane.

Relasjonene (T8.26) ble som nevnt funnet av Einstein alt i 1917. Etter utviklingen av kvantemekanikken og kvanteelektrodynamikken (som bl.a beskriver vekselvirkningen mellom ladde partikler og fotoner) ble en i stand til å regne på slike prosesser som spontan emisjon osv. Slike beregninger verifiserer Einstein-relasjonene, og gir også resultatene for selve koeffisientene, ikke bare *forholdene* mellom dem.

Disse beregningene viser bl.a at sannsynligheten pr tidsenhet for spontan emisjon er

$$A = \alpha \frac{4\omega^3}{3c^2} |\mathbf{d}|^2, \quad (\text{T8.60})$$

der  $\omega = 2\pi\nu$ ,  $\alpha$  er finstrukturkonstanten og  $\mathbf{d}$  er det såkalte **dipolmomentet** for overgangen mellom de to tilstandene  $\psi_1$  og  $\psi_2$ ,

$$\mathbf{d} = \int \psi_2^* \mathbf{r} \psi_1 d^3r. \quad (\text{T8.61})$$

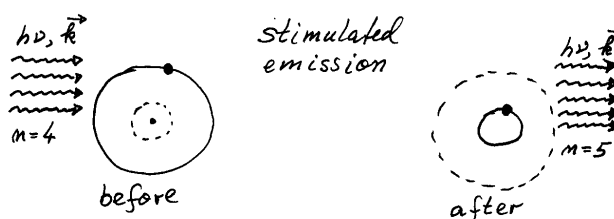
Denne formelen gjelder i den såkalte **dipol-tilnærmelsen**, som krever at foton-bølgelengden  $\lambda = c/\nu$  er mye større enn utstrekningen (radien)  $R$  av tilstandene. Dette er en rimelig god tilnærming for de fleste atomære overganger.

De kvanteelektrodynamiske beregningene bekrefter det som Einstein kom fram til i 1917 — at den spontane emisjonen suppleres med industert emisjon når det alt er fotoner med frekvens  $\nu$  til stede. Det viser seg at den totale sannsynligheten pr tidsenhet ( $w_{em}$ ) til en mode hvor det alt befinner seg  $n$  fotoner er gitt ved en formel som inneholder en proporsjonalitetsfaktor  $n + 1$ . For  $n = 0$  beskriver denne formelen spontan emisjon. Den totale emisjons-sannsynligheten er altså generelt  $n + 1$  ganger større enn den spontane,  $w_{em} = (n + 1)w_{sp}$ . Sannsynligheten for stimulert emisjon, som er differansen mellom disse, blir da

$$w_{stim} \equiv w_{em} - w_{sp} = nw_{sp}, \quad (\text{T8.62})$$

i overensstemmelse med (T8.59).

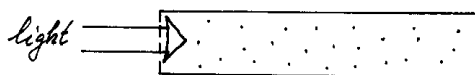
Moralen er at når et atom er blitt eksitert, så skjer de-eksitasjonen raskere dersom emisjonen kan skje til elektromagnetiske svingemoder som alt inneholder fotoner, og *mye* raskere dersom disse fotontallene er store. Dersom det fotonet som skal emitteres kan velge mellom flere aktuelle moder, vil det foretrekke den som på forhånd har det største fotontallet  $n$ . Fotoner er altså (i likhet med andre bosoner) sosiale av seg; de foretrekker selskap, i motsetning til fermionene som er noen enstøinger.



### 8.3.e Maser og laser

(B&J s 735, avsn. 3-9 i Brehm & Mullin)

MASER er et akronym for **M**icrowave **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation. LASER står for det samme med **L**ight istedenfor **M**icrowave. Begge disse innretningene benytter seg av stimulert emisjon, vanligvis fra atomer eller molekyler.



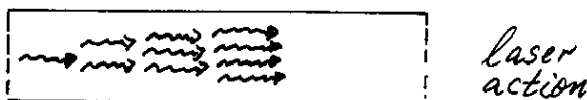
Figuren skal forestille en beholder med atomer i gassform, ved temperaturen  $T$ . Denne gassen utsettes for en monokromatisk lysstråle med bølgelengde  $\lambda$  og frekvens  $\nu = c/\lambda$ , valgt slik at fotonenergien  $h\nu$  er lik energidifferansen mellom to tilstander 1 og 2 for atomene. Her snakker vi altså om synlig lys og fotoner i det optiske området. Den vel avgrensede lysstrålen kan vi forestille oss inneholder fotoner i et lite utvalg av moder, med bølgetallsvektorer ( $\mathbf{k}_i$ ) som har nesten samme retning (som lysstrålen) og størrelse  $|\mathbf{k}_i| = 2\pi/\lambda = 2\pi\nu/c$ . Fotontallene i disse modene kan være store, mye større enn de som er karakteristiske for likevekten ved temperaturen  $T$ . De sistnevnte er

$$\langle n \rangle_f = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \approx e^{-h\nu/k_B T} \ll 1.$$

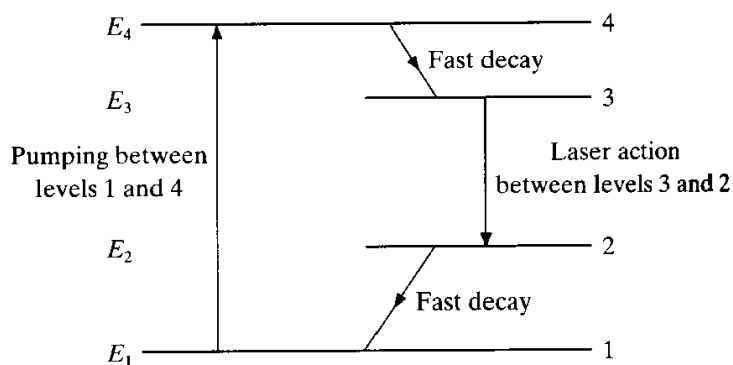
(Merk at det *totale* systemet inne i beholderen, med lysstrålen inkludert, *ikke* er i likevekt.)

Spørsmålet er nå: Vil lysstrålen bli forsterket eller ikke? Svaret er at sannsynligheten for at hvert av de  $n_1$  atomene i tilstand 1 absorberer et foton *fra* strålen er like stor som sannsynligheten for at hvert av de  $n_2$  atomene i tilstand 2 stimuleres til å emitte et foton *til* strålen, ifølge Einstein. Siden  $n_2$  ved likevekt er en faktor  $e^{-h\nu/k_B T}$  mindre enn  $n_1$ , kan vi da konkludere med at det absorberes langt flere fotoner enn de som blir emittert. Lysstrålen blir altså svekket. Den *spontane* emisjonen kan ikke redde denne situasjonen, fordi de spontant emitterte fotonene sprer seg i alle retninger.

Dette resonnetet forteller også hva som må til for å gi *forsterkning* av lysstrålen. Vi må på en eller annen måte bringe samlingen av atomer ut av likevekt, og slik at  $n_2$  blir *større* enn  $n_1$ . Dette kalles **populasjons-inversjon**.



Å konstruere en maser eller en laser går derfor ut på å finne en mekanisme som kan gi populasjonsinversjon for to utvalgte energinivåer. Figuren nedenfor illustrerer den prinsipielle virkemåten for en såkalt 4-nivå-laser.



Principle of the four-level laser.

Med en passende “pumpe”-mekanisme eksiteres atomer fra grunntilstanden 1 til nivå 4.<sup>11</sup> Tilstand 4 er valgt slik at den spontane overgangen fra nivå 4 til nivå 3 går veldig raskt. Tilstand 3, derimot, bør ha lang levetid, slik at spontane overganger fra 3 til 2 er lite sannsynlige. Dersom nå den siste overgangen, de-eksitasjonen fra 2 til 1 også går raskt, kan en oppnå at det danner seg en “kø” på nivå 3, med flere atomer i denne tilstanden enn i tilstand 2, altså populasjonsinversjon mellom 2 og 3. Med en lysstråle med den rette frekvensen i forhold til energidifferansen  $E_3 - E_2$  kan en nå oppnå **laser-virkning** (laser action).

I en slik gass-laser bruker en i praksis et speilarrangement til å oppnå forsterkning i et sett av nærliggende moder med nesten parallelle bølgetall  $\mathbf{k}$ . På denne måten kan en produsere nesten monokromatisk og svært koherent lys.

<sup>11</sup> “Pumping” kan gjøres f.eks vha elektrisk utladning eller en lyskilde med tilstrekkelig intensitet.