PHYS119 SAMMENDRAG

av Augustin Winther ©
v. 2024-12-13

Definisjon | **Lov/Teori**

Ekstra info

Kan inneholde feil og mangler.

Noen av tingene her er ikke i pensum, men er likevel relatert.

Kontaktinfo finnes på:
winther.io

Arbeid på system
$\Delta W = -p\Delta V$

Tilført varme
$\Delta Q = C\Delta T$

Isolert system kan ikke utveksle energi eller materie. Et **lukket system** kan utveksle energi, men *ikke* materie.

Termodyn. prosess er **reverserbar** viss systemet og omgivelsene kan gå tilbake til initialtilstanden.

Termodyn. entropi
For en reverserbar syklisk termodynamisk prosess har man $\oint \frac{\delta Q}{T} = 0$
hvor T uniform temp. til systemet, og δQ er en reverserbar liten mengde tilført varme.
Man definerer $dS = \frac{\delta Q}{T}$ og har $\Delta S = \int_i^f \frac{dQ}{T}$

Termisk likevekt
To systemer er i termisk likevekt om det er ingen varmeutveksling mellom de når de er i «termisk kontakt» (varme kan utveksles, men skjer ikke).

Et system er i termisk likevekt med seg selv om temperaturen innad i systemet er uniform og endres ikke over tid.

Termodynamikkens 0. lov
Om to termodynamiske system A og B begge er i termisk likevekt med et tredje system C. Da er A og B i termisk likevekt med hverandre.

Termodynamikkens 1. lov
Energien til et *lukket system* er bevart. Dvs. summen av arbeid utført på et system, og varme tilført systemet, er lik endring av systemets indre energi.
$\Delta U = \Delta W + \Delta Q$

Termodynamikkens 2. lov
Enhver naturlig termodynamisk prosess fører til at den totale entropien til et system enten øker eller forblir konstant. $\Delta S \geq 0$.

Termodynamikkens 3. lov
Nernst-Einstein forumulering:
$0 < S(T, x) - S(0, x + \Delta x) < \infty$ når
$0 < T < \infty\,, |x| < \infty\,, |\Delta x| < \infty$
hvor x representerer en uavhengig termodynamisk egenskap som f.eks. volum, trykk, etc.

Idealgassloven
$pV = nRT = Nk_BT$
n er antall mol
N er antal partikler

TERMODYNAMIKK og MIKRO- og MAKROTILSTANDER

Mikrotilstand
En spesifikk konfigurasjon av et system beskrevet av oppførselen til alle delene av systemet (f.eks. partiklers posisjon og hastighet i en gass. Mikroskopiske egensk.)

Makrotilstand
Tilstand til et system beskrevet ved makroskopiske egenskaper (f.eks. temperatur, volum og trykk til en gass).

Flere mikrotilstander kan stå bak samme makrotilstand.

Antall mikrotilstander som gir samme makrotilstand representeres med Ω og kalles gjerne **«multiplisiteten»** til makrotilstanden.

Termodynamisk likevekt
Ingen makroskopisk strømning av materie eller energi innad i et system, eller mellom systemer.

Et system i termodynamisk likevekt med seg selv opplever ingen makroskopiske endringer, ei heller en tendens mot makroskopiske endringer.

Systemer i termodynamisk likevekt med hverandre er i termisk, mekanisk, kjemisk og strålings likevekt samtidig.

Statistisk likevekt
Et system er i statistisk likevekt om dets statistiske egenskaper (gj.snitt og sannsynlighetsfordelinger) ikke endrer seg over tid. De makroskopiske egenskapene er konstante. De mikroskopiske kan endre seg.

Om systemets sannsynlighetsfordeling er en funksjon av bare konserverte egenskaper, da er systemet i statistisk likevekt.

Q = varme	U = indre energi	p = trykk
W = arbeid	R = gasskonst.	V = volum

Statistisk entropi
Generelt (**Gibbs entropi**): $S = -k_B \sum p_i \ln p_i$
hvor k_B er Boltzmannkonstanen, og p_i er sannsynligheten for den i-ende mikrotilstand.

Om alle p_i er like har man:
$S = k_B \ln \Omega$ (Boltzmann formulering)

Absolutt temperatur
$1/T = dS/dQ$

Entalpi
$H = U + pV$

Helmholtz' frie energi: $F = U - TS$

Varmekapasitet
$C = dQ/dT$

Konst. volum:	Konst. trykk:
$C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$	$C_p = \frac{\partial U}{\partial T} + p\frac{\partial V}{\partial T}$

Fundamental postulatet i stat. mek,
For et *isolert system* i statistisk likevekt, så har alle mikrotilstander like store sannsynlighet.

Den ergodiske hypotesen
Over en lang nok tid vil et *isolert system* bruke like lang tid i hver *tilgjengelig mikrotilstand*.

Statistisk ensemble: sett av mikrotilstander som alle kan representere en gitt makrotilstand.
Mikrokanonisk ensemble: statistisk ensemble for et lukket system.
Kanonisk ensemble: statistisk ensemble for et system i termisk likevekt med et varmereservoar med konstant temperatur.

Termodyn. entropi ekvivalent med stat. entropi

SANNSYNLIGHETSFORDELING

Sannsynlighetsfordeling

En matematisk beskrivelse av sannsynligheten til en hendelse.

F.eks.: Sannsynligheten for å få «kron» ved et myntkast er $P(\text{«kron»}) = 1/2$

Diskret sannsynlighetsfordeling

En sannsynlighetsfordeling av en tilfeldig variabel som bare kan ta for seg en endelig mengde mulige verdier.

La X være en tilfeldig variabel i det tellbare settet A.
Sannsynligheten for at X også er i settet E er lik

$$P(X \in E) = \sum_{x \in E} p_X(x)$$

hvor $p_X(x) = P(X = x)$ er **sannsynlighetsmassen (PMF)** til X.

Kontinuerlig sannsynlighetsfordeling

En sannsynlighetsfordeling av en tilfeldig variabel som kan ta for seg en uendelig mengde mulige verdier.

La X være en tilfeldig variabel i $\mathbb{R}$.
Sannsynligheten for at X er i intervallet $E = [a, b] \subset \mathbb{R}$, er lik

$$P(X \in E) = P(a \leq X \leq b) = \int_a^b f_X(x)dx$$

hvor $f_X(x)$ er **sannsynlighetstettheten (PDF)** til X.

Man kan tenke på $f_X(x)dx$ som sannsynligheten for at X er i intervallet $[x, x + dx]$: $P(x - dx \leq x \leq x + dx) = f_X(x)dx$

Kumulativ sannsynlighetsfordeling (CDF)

Sannsynligheten for at en tilfeldig variabel X er mindre eller lik en gitt verdi x:

$$F_X(x) = P(X \leq x)$$

Om X er kontinuerlig har man: $F_X(x) = \int_{-\infty}^{x} f_X(t)dt$
Om X er diskree har man: $F_X(x) = \sum_{x_i \leq x} p_X(x_i)$

Det som oftest ønskelig at $p_X(x)$ og $f_X(x)$ er slik at:
$\lim_{x \to -\infty} F_X(x) = 0$ og $\lim_{x \to \infty} F_X(x) = 1$ (**normalisering**)

Merk at $P(a < X \leq b) = F_X(b) - F_X(a)$,
og at om X er kont. så har man $f(x) = dF_X(x)/dx$

Sannsynlighetsfordeling for TO diskree tilfeldige variabler

La X og Y være to tilfeldige diskree variabler.
Sannsynligheten for at X og Y er i settet E er:

$$P\big((X,Y) \in E\big) = \sum\sum_{(x,y) \in E} p_{XY}(x,y)$$

hvor $p_{XY}(x,y) = P(X = x \text{ og } Y = y)$ er sannsynlighetsmassen til X og Y.

Gitt $E = \{(x,y) : x \in E_x,\ y \in E_y\}$ da er

$$P\big((X,Y) \in E\big) = \sum_{x \in E_X} \sum_{y \in E_Y} p_{XY}(x,y)$$

Sannsynlighetsfordeling for TO kont. tilfeldige variabler

La X og Y være to tilfeldige kont. variabler.
Sannsynligheten for at X og Y er i settet E er:

$$P\big((X,Y) \in E\big) = \iint_{(x,y) \in E} f_{XY}(x,y)dxdy$$

hvor $f_{XY}(x,y) = \frac{\partial^2 F_{XY}(x,y)}{\partial x \partial y}$ er sannsynlighetstettheten for X og Y.

Gitt $E = \{(x,y) : x \in [a,b],\ y \in [c,d]\}$ da er

$$P\big((X,Y) \in E\big) = \int_a^b \int_c^d f_{XY}(x,y)dxdy$$

Uavhengige variabler

Generelt er to tilfeldige variabler X og Y uavhengige viss og bare viss:

$$F_{XY}(x,y) = F_X(x) \cdot F_Y(y)$$

Spesielt er to diskre tilfeldige variabler X og Y uavhengige viss og bare viss:

$$p_{XY}(x,y) = p_X(x) \cdot p_Y(y)$$

Spesielt er to kontinuerlige variabler X og Y uavhengige viss og bare viss:

$$f_{XY}(x,y) = f_X(x) \cdot f_Y(y)$$

Sum av to tilfeldige uavh. variabler

Gitt to tilfeldige *uavhengige* variabler X og Y, og gitt summen $Z = X + Y$, så har man

Sannsynlighetsmasse (X og Y begge diskree):

$$p_Z(z) = \sum_A p_X(x)p_Y(z - x)$$

Sannsynlighetstetthet (X og Y begge kont.):

$$f_Z(z) = \int_A f_X(x)f_Y(z - x)dx$$

hvor A er settet med alle mulige X verdier.

Produkt av to tilfeldige uavh. variabler

Gitt to tilfeldige *uavhengige* variabler X og Y, og gitt produktet $Z = XY$, så har man

Sannsynlighetsmasse (X og Y begge diskree):

$$p_Z(z) = \sum_A p_X(x)p_Y(z/x)$$

Sannsynlighetstetthet (X og Y begge kont.):

$$f_Z(z) = \int_A f_X(x)f_Y(z/x)\frac{1}{|x|}dx$$

hvor A er settet med alle mulige X verdier.

Dirac delta funksjonen

Dirac delta funksjonen (δ-fordelingen) kan bli representert som

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \quad \text{slik at} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1$$

Modus

Verdien med størst sannsynlighet. Gitt X er en tilfeldig variabel, så om X er diskret, er modusen lik verdien x hvor $p_X(x)$ er størst, om X er kont., er modusen lik verdien x hvor $f_X(x)$ er størst.

Forventningsverdi (1. moment)

Vektet gjennomsnitt av alle mulige verdier til en tilfeldig variabel X.

Om X er diskret: $\langle X\rangle = \mathrm{E}[X] = \sum_{i=1}^{\infty} x_i p_X(x_i)$

Om X er kontinuerlig: $\langle X\rangle = \mathrm{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x f_X(x)dx$

Varians (2. sentralt moment)

Gitt en tilfeldig variabel X så er variansen

$$\mathrm{V}[X] = \mathrm{E}[(X-\mathrm{E}[X])^2] = \mathrm{E}[X^2] - \mathrm{E}[X]^2$$

Momentene til en funksjon er mål på hvordan grafen ser ut.

Geom. rekke $\displaystyle\sum_{r=0}^{r=n} x^r = \frac{1-x^n}{1-x}$

Matematisk moment

Det n-te moment rundt verdien α for tilfeldig var. X:

$$\mathrm{E}[(X-\alpha)^n] = \begin{cases} \sum (x_i-\alpha)p_X(x_i), & \text{diskret} \\ \int (x-\alpha)f_X(x)dx, & \text{kontinuerlig} \end{cases}$$

«Råmoment» (ofte bare «moment»): $\alpha = 0$

Sentralt moment: $\alpha = \mathrm{E}[X]$

X er en tilfeldig verdi fra settet $\{-13, -7,\ 5,\ 5,\ 5,\ 7,\ 7,\ 11\}$

Modusen er 5. Dette er hva X mest sannsynlig vil være lik.

Forventningsverdien $\mathrm{E}[X] = 2{,}5$ er et mål på hvor sannsynlighetsfordelingen til X er sentrert. Velger man en tilfeldig verdi mange nok ganger vil gj.snittet gå mot $\mathrm{E}[X]$.

Variansen $\mathrm{V}[X] \cong 57{,}8$ er et mål på hvor spredt verdiene i settet er fra forventningsverdien.

Standardavviket $\sigma = \sqrt{\mathrm{V}[X]} \cong 7{,}6$ er et mål for det samme som variansen, men er i samme skala og enhet som settet.

Kvadratisk gj.snitt (RMS) $X_{\mathrm{RMS}} = \sqrt{\mathrm{E}[X^2]} \cong 8$ er et mål på hvor store magnituder verdiene gjennomsnittlig har.

Momentgenererings funksjonalen (MGF)

La X være en tilfeldig variabel med CDF F_X. Da er MGF av F_X lik

$$M_X(t) = \mathrm{E}[e^{tX}]$$

X diskret: $M_X(t) = \sum_{i=1}^{\infty} e^{tx_i} p_X(x_i)$

X kont.: $M_X(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{tx} f_X(x)dx$

Rekkeutvikling av $f(x)$ rundt $x = 0$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n$$

Ved rekkeutvikling har man

$$M_X(t) = 1 + t\mathrm{E}[X] + \frac{t^2\mathrm{E}[X^2]}{2!} + \cdots$$

Den n-te deriverte av $M_X(t)$ ved $t = 0$ gir det n-te moment.

STATISTISK FYSIKK

Kombinasjoner

Gitt et sett med n elementer, så er antall måter man kan velge ut m elementer lik **binomialkoeffisienten**:

$$\binom{n}{m} = \frac{n!}{m!\,(n-m)!} = \text{"}n \text{ choose } m\text{"}$$

Eksempel med spinn:

Gitt N partikler med spinn ↑ eller spinn ↓, så er antall mikrotilstander med M spinn ↑ lik

$$\Omega(M\uparrow) = \binom{N}{M} = \frac{N!}{M!(N-M)!} = \text{"}N \text{ choose } M\text{"}$$

Stirlings approksimasjon:

$$\ln(n!) \cong n\ln(n) - n \iff n! \cong n^n e^{-n}$$

$$\Rightarrow \Omega(M\uparrow) \cong N^N (N-M)^{-(N-M)} M^{-M}$$

Entropien for makrotilstanden med M ↑:

$$S/k_B = \ln\Omega(M\uparrow)$$

$$\cong N\ln(N) - (N-M)\ln(N-M) - M\ln(M)$$

Boltzmannfordeling

Gitt et system A i termisk likevekt med et varmereservoar B med temperatur T (kanonisk ensemble), så er sannsynligheten for å finne systemet A i en gitt mikrotilstand med energi E_n gitt ved

$$P(E_A = E_n) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} = \frac{\Omega_A(E_n)}{\Omega_{AB}(E)} = \frac{\Omega_B(E-E_n)}{\Omega_{AB}(E)}$$

hvor $e^{-\beta E_n}$ kalles «Boltzmann faktoren», der $\beta = \frac{1}{k_B T}$, og E er total energien til hele systemet A og B. Z er normaliserings nevneren, som er den kanoniske partisjonsfunksjonen til systemet.

Partisjonsfunksjonen for kanonisk ensemble

For kanoniske ensembler med diskret energinivåer har man

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_r g_r e^{-\beta E_r}$$

der E_i er energien til den i-ende mikrotilstanden. Man kan også skrive summen på en annen måte det E_r er det r-te energinivået, og g_r er **degenerasjonen** til energinivå E_r (antall mikrotilstander med energi E_r).

Maxwell-Boltzmann fordeling (3D)

Gitt et system med temperatur T i termodynamisk likevekt som inneholder en stor mengde identiske ikke-interagerende, ikke-relativistiske klassiske partikler med masse m, så er *sannsynlighetstettheten* for å finne en partikkel med hastighet nær v lik

$$f(v) = \left(\frac{m}{2\pi}\beta\right)^{3/2} 4\pi v^2 e^{-\beta\frac{1}{2}mv^2}$$

Mest sannsynlig hastighet finner man ved

$$\frac{df}{dv} = 0 \Rightarrow v = v_{\mathrm{mp}} = \sqrt{\frac{2k_BT}{m}}$$

Gjennomsnittlig hastighet finner man ved

$$v_{\mathrm{avg}} = \mathrm{E}[v] = \int_{-\infty}^{\infty} v f(v)dv = \sqrt{\frac{8k_BT}{\pi m}}$$

RMS hastighet finner man ved

$$v_{\mathrm{rms}} = \sqrt{\mathrm{E}[v^2]} = \int_{-\infty}^{\infty} v^2 f(v)dv = \sqrt{\frac{3k_BT}{m}}$$

Maxwell-Boltzmann fordeling energi

Gitt et system med temperatur T som består av N partikler med masse m. Hvis systemet følger Maxwell-Boltzmann fordelingen og dets kriterier, så er energien

$$U = N \cdot E_{\text{particle}} = N \cdot \frac{1}{2} m v_{rms}^2$$

Verdien av v_{rms} avhenger av hvor mange dimensjoner partiklene kan reise i:

1D	2D	3D
$v_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$	$v_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$	$v_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$
$U = \frac{1}{2} N k_B T$	$U = N k_B T$	$U = \frac{3}{2} N k_B T$

Grunnen til at man bruker v_{rms} og ikke v_{avg} er fordi energien til partiklene avhenger av v^2.

$v_{\text{rms}}^2 = \text{E}[v^2]$ gir oss gjennomsnittlig verdi til hastighetene om de var kvadrert. Dette er viktig da en partikkel med $v = 2v_1$ har $2^2 = 4$ ganger større energi enn en partikkel med $v = v_1$. Om man bruker $v_{\text{avg}}^2 = \text{E}[v]^2$, så blir ikke slike ting tatt hensyn til, og man ender opp et gj.snitt som ikke reflekterer at f.eks. en partikkel med $v = 2v_1$ har 4 ganger mer energi enn en partikkel med $v = v_1$.

Gibbs paradoks

To beholdere med ideelle gasser sitter ved siden av hverandre. De har identiske makroskopiske egenskaper og derfor den samme entropier S, og den totale entropien er $2S$. Det åpnes opp for at gassene kan mikse med hverandre. Ingen makroskopiske endringer skjer da de er i likevekt. Beregner man entropien til systemet uten skillevegen for man en entropi som er større enn $2S$. Setter man tilbake skilleveggen er man tilbake til en total entropi på $2S$, som betyr entropien har minsket, som bryter den 2. loven.

Løsning: Man må anta at partiklene er identiske (ikke skillbare), og fjerne over-telling av mikrotilstander. Istedenfor å tenke kombinasjoner må man tenke permutasjoner.

Maksimum entropi prinsippet

I et *isolert system*, så når entropien et maksimum ved termodynamisk likevekt

Minimum energi prinsippet

I et *lukket system* med *konstant entropi*, så når energien et minimum ved termodynamisk likevekt.

Ω til system med skillbare partikler

Vi har et *isolert system* som består av et konstant antall N skillbare partikler, som hver kan legge seg på et definert energinivå E_r. Gitt sannsynligheten for alle mikrotilstander er like, så har man at multiplisiteten til systemets makrotilstand er likt antall måter man kan fordele partiklene på de forskjellige energinivåene:

$$\Omega = N! \prod \frac{(g_r)^{n_r}}{n_r!} = N! \left(\frac{g_1^{n_1}}{n_1!} \cdot \frac{g_2^{n_2}}{n_2!} \cdots \right)$$

hvor n_r er antall partikler med energi E_r, og g_r er degenerasjonen til energinivået E_r. Man har da at $(g_r)^{n_r}$ er likt antall måter man kan plassere n_r partikler på nivå E_r.

Ved metode for maksimering av Ω får man

$$n_r = g_r e^{\lambda_1} e^{\lambda_2 E_r} = A g_r e^{\lambda_2 E_r}$$

hvor $A = e^{\lambda_1}$, og λ_1 og λ_2 er Lagrange multiplikatorer. Ved utledning fra andre lover i termodynamikk får man

$$\lambda_2 = -\beta = -\frac{1}{k_B T}$$

Som gir $n_r = A g_r e^{-\beta E_r}$ og videre

$$N = \sum n_r = A \sum g_r e^{-\beta E_r} = A Z_{\text{sp}}$$

$$U = \sum n_r E_r = A \sum E_r g_r e^{-\beta E_r}$$

Merk at $n_r = A g_r e^{-\beta E_r}$ følger Boltzmannfordelingen: $P(E = E_i) \propto e^{-\beta E_i}$. Med andre ord: Boltzmannfordelingen er fordelingen som maksimerer entropi.

Lagrange multiplikator metoden

For å finne maksimum eller minimum til $f(x)$ (som skjer ved $df/dx = 0$), med betingelsen $g(x) = 0$, så kan man utrykke problemet med Lagrange funksjonen

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) + \lambda \cdot g(x)$$

hvor λ er *Lagrange multiplikatoren*. Man har da at

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0 \quad \text{og} \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = 0$$

gir et utrykk for x som tilsvarer maksimum eller minimum til $f(x)$.

Multiplisitet og observert makrotilstand

Den mest sannsynlige makrotilstanden (altså den mest sannsynlige målingen man gjør av et system), er den makrotilstanden med størst multiplisitet (altså flest mulige mikrotilstander).

Metode for maksimering av Ω

1. Ω er ofte utrykt ved fakulteter ($N!$ osv.), det er derfor lettere å heller finne maksimum til Ω ved å finne maksimum til $\ln \Omega$ ved Stirlings approksimasjon.

2. Finn et utrykk for $d \ln \Omega$ og de eventuelle betingelsene (f.eks. uendret antall tilstander, konstant energi, etc.)

3. Løs differensial ligningen $d \ln \Omega = 0$ med de eventuelle betingelsene lagt til via Lagrange multiplikator metoden.

Partisjonsfunksjon system av partikler

Gitt et system med N partikler, hvor partiklene ikke vekselvirker med hverandre, og gitt partisjonsfunksjonene til partiklene er $Z_{\text{sp},1}$, $Z_{\text{sp},2}$, $Z_{\text{sp},3}$, … , $Z_{\text{sp},N}$, da er partisjonsfunksjonen til systemet:

$$Z = \prod_{j=1}^{N} Z_{\text{sp},j}$$

Om partiklene har like egenskaper, men er skillbare, så er deres **enkelpartikkel-partisjonsfunksjoner** like: $Z_{\text{sp},1} = Z_{\text{sp},2} = \cdots = Z_{\text{sp}}$, og vi har at:

$$Z = \left(Z_{\text{sp}}\right)^N$$

Om partiklene er identiske (altså ikke skillbare) så har det ingenting å si hvilke partikler som er på hvilke energinivåer. For å unngå Gibbs paradokset deler man på $N!$:

$$Z = \left(Z_{\text{sp}}\right)^N / N!$$

Ω til system med identiske partikler

Siden partiklene er identiske, så har det ikke noe å si hvilke partikler som er hvor, bare at det er partikler der. Man må da dele på antall over-tellinger som skyldes skillbarhet ($N!$), og får

$$\Omega = \prod \frac{(g_r)^{n_r}}{n_r!} = \frac{g_1^{n_1}}{n_1!} \cdot \frac{g_2^{n_2}}{n_2!} \cdots$$

hvor n_r er antall partikler med energi E_r, og g_r er degenerasjonen til energinivået E_r

Kvantiserte energier (fra PHYS118)

Partikkel med masse m i uendelig potensialbrønn (1D) med bredde L

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

Partikkel med masse m i uendelig potensial kube (3D) med sidelengder L

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

Partikkel med masse m som harmonisk oscillator (1D):

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

Partikkel med masse m som isotropisk oscillator (3D):

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)$$

hvor $\omega = \sqrt{k/m}$ og $n, n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}_+$

Termodynamiske størrelser fra partisjonsfunksjonen

For kanoniske ensembler så forteller Boltzmann fordelingen oss sannsynligheten for at et system er i en viss tilstand. Partisjonsfunksjonen Z er normaliseringen til denne fordelingen, og inneholder derfor i seg selv informasjon om fordelingen, som igjen kan fortelle oss mye om de termodynamiske størrelsene til systemet. Utledningene under er for diskret tilfelle, men resultatene gjelder også for kontinuerlige tilfeller. La $P_i = P(E = E_i)$ der E er energien til systemet, og E_i er energien til systemet ved den i-ende mikrotilstanden.

Systemets energi E:

$$\mathrm{E}[E] = \sum_i E_i P_i = \sum_i E_i \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Om energien til mikrotilstandene avhenger av en parameter λ slik

$$E_i = \epsilon + \lambda D_i$$

Hvor ϵ er en konst. energi. Da er forventningsverdien til D lik

$$\mathrm{E}[D] = \sum_i D_i P(D = D_i) = \sum_i D_i P_i = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda}$$

Systemets entropi S ved forventningsverdien til systemets energi:

$$S = -k_B \sum_i P_i \ln P_i = k_B(\ln Z + \beta \cdot \mathrm{E}[E]) = \frac{\partial}{\partial T}(k_B T \ln Z)$$

Man skriver gjerne bare at $\mathrm{E}[E] = U$ da det er den energien man forventer å måle gjennomsnittlig etter utallige målinger:

System med partisjonsfunksjon Z	System av N partikler med like partisjonsfunksjoner Z_{sp}
$U = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$	$U = N k_B T^2 \frac{\partial \ln Z_{\mathrm{sp}}}{\partial T} = -N \frac{\partial \ln Z_{\mathrm{sp}}}{\partial \beta}$
$S = k_B \ln Z + \frac{U}{T}$	$S = N\left[k_B \ln Z + \frac{U}{T}\right]$

Entropi for identiske ikke skillbare partikler

For et system med temperatur T med N identiske ikke skillbare partikler, så er

$$S = k_B \left[N \ln Z_{\mathrm{sp}} + NT \frac{\partial \ln Z_{\mathrm{sp}}}{\partial T} - \ln N!\right]$$

Denne ligningen unngår Gibbs paradokset, og blir kalt Sackur-Tetrode ligningen.

Ideell gass

Teoretisk gass bestående av mange partikler i tilfeldig bevegelser som ikke vekselvirker med hverandre, eller har perfekte elastiske kollisjoner.

Partisjonsfunksjonen for ideell gass

For en ideell gass bestående av N identiske partikler i en kube med volum V, hvor gassen har temperatur T og partiklene har masse m, så er enkelpartikkel-partisjonsfunksjon lik

$$Z_{\mathrm{sp}} = V\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$

Energi i ideelle diatomiske gasser

$E = E_{\mathrm{trans}} + E_{\mathrm{rot}} + E_{\mathrm{vib}} = E_t + E_r + E_v$

Energien følger Boltzmannfordelingen, som betyr at antall partikler med energinivå E er

$$n_E = g_E e^{-\beta E}$$

Som pga. de tre energiformene blir

$$n_E = g_{E_t} e^{-\beta E_{\mathrm{t}}} g_{E_r} e^{-\beta E_{\mathrm{r}}} g_{E_v} e^{-\beta E_{\mathrm{v}}}$$

$$\Rightarrow Z_{\mathrm{sp}} = Z_{\mathrm{trans}} \cdot Z_{\mathrm{rot}} \cdot Z_{\mathrm{vib}}$$

For høye temperaturer $T \gg \theta_{\mathrm{rot}}$ har man

$$E = \left(\frac{3}{2} + 1 + 1\right) k_B T = \frac{7}{2} k_B T \Rightarrow E_{\mathrm{tot}} = \frac{7}{2} N k_B T$$

θ_{vib} er flere tusen kelvin, så ved romtemperatur har man

$$E_{\mathrm{tot}} \cong \left(\frac{3}{2} + 1 + 0\right) N k_B T = \frac{5}{2} N k_B T$$

Energiformer for diatomisk molekyl med masse m, fart v, vinkelmoment L og treghetsmoment I, så har man

$E_{\mathrm{trans}} = \frac{1}{2} m v^2$	$E_{\mathrm{rot}} = \frac{L^2}{2I} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$	$E_{\mathrm{vib}} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar n$
$g_{\mathrm{trans}} = 1$	$g_{\mathrm{rot}} = 2l + 1$	$g_{\mathrm{vib}} = 1$
	$\theta_{\mathrm{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I k_B}$	$\theta_{\mathrm{vib}} = \frac{\hbar\omega}{k_B}$

hvor $l, n = 0,1,2, \ldots$ og ω er vibrasjonsfrekvensen. De karakteristiske temperaturene θ sier oss at viss temperaturen er lavere enn dette, så er det veldig lite av den typen energi. Vi har for $T \gg \theta_{\mathrm{rot}}$ stor $L \Rightarrow$ stor $l \Rightarrow l(l+1) \cong l^2$.

IDEELL GASS I KVANTEMEKANIKK: k-rom, E-rom og tilstandstetthet (Density og States)

Vi har en kube med side lengder L som inneholder en gass med identiske ikke vekselvirkende partikler (ideell gass) hver med masse m. Partiklene er frie og følger den tidsuavhengige Schrödinger ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)=E\psi$$

hvor ψ er bølgefunksjonen til en partikkel, og E er energien. Partiklene er begrenset til å være inni boksen og man får krav om at sannsynligheten for at de er utenfor er lik 0. Man lar et av hjørnene til boksen være origo, og en bølgefunksjon som følger dette kravet blir

$$\psi(x,y,z)=\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z y)$$

hvor $k_i=n_i\,\pi/L$ der $n_i=1,2,3,\dots$

Valget av $\sin(\,)$ kommer hovedsakelig av at Schrödinger ligningen er en differensialligning som blir tilfredsstilt av en sinus funksjon (tommelregel: er den andre deriverte lik seg selv gange en konstant, så er det ofte en sinus ligning)

Plugger denne bølgefunksjonen inn i Schrödinger ligninger og får

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+k_y^2+k_z^2\right)=\frac{\hbar^2}{2m}|\mathbf{k}|^2=E$$

Partiklenes energi er avhengig av vektoren $\mathbf{k}=(k_x,k_y,k_Z)$ som lever i et vektorrom vi kaller for ***k*-rommet**. k_i er diskret, som betyr at k-rommet er diskret, man kan derfor se på k-rommet som en samling med punkter avstand π/L mellom hverandre, som alle beskriver en kombinasjon av (k_x,k_y,k_Z), en tilstand med andre ord. Gitt ett volum i dette k-rommet, V_k, så har man ett punkt (en tilstand) innenfor en kube med lengder π/L, altså, en **tilstandstetthet (Density of states)**

$$f=\frac{1}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^3}=\frac{L^3}{\pi^3}$$

Man får da at antall tilstander innenfor V_k er lik $V_k\cdot f$

Energien til en partikkel kan tenkes på som et punkt i det 1-dimensjonalet rommet E-rommet. For hvert punkt i k-rommet finnes det ett tilsvarende punkt i ***E*-rommet**. Tilstandstettheten i E-rommet, $g(E)$, vil være hvor mange energipunkter det er per avstand. Energien til partikkelen er avhengig av lengden (normen) til $\mathbf{k}$. Alle tilstander $\mathbf{k}$ som gir en energi $E\le E'$ krever $|\mathbf{k}|\le\sqrt{\frac{2mE'}{\hbar^2}}$. Alle k-vektorer/tilstander/punkter i k-rommet som tilfredsstiller dette er innenfor en åttendels sfære med volum $V_k'=\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}|\mathbf{k}|^3$ (fordi k verdiene kan bare være positive, så vi er kun i den første åttendelen av en sfære om origo.)

Dette betyr at antall tilstander innenfor $V_k{}'$ er likt antall energier innen intervallet $[0,E']$

$$V_k'\cdot f=\int_0^{E'}g(E)dE$$

Løser man for $g(E)$ får man $g(E)=\frac{m^{3/2}L^3}{\sqrt{2}\hbar^3\pi^2}\sqrt{E}$. Generelt har man: $g_{1D}(E)=C_1 1/\sqrt{E}$, $g_{2D}(E)=c_2$, og $g_{3D}(E)=c_3\sqrt{E}$

Man har at $Z_{\text{sp}}=\sum e^{-\beta E_i}=\sum g(E_n)\Delta E\cdot e^{-\beta E_n}$. Lar man$L\to\infty$ så har vi $\Delta E\to 0$ (altså kont. energi) og vi får integralet

$$Z_{\text{sp}}=\int g(E_n)e^{-\beta E_n}dE_n$$

Løser man dette vil man få enkelpartikkels-partisjonsfunksjonen for ideell gass som vist tidligere i sammendraget.

KVANTESTATESTIKK

Fermion
Sub-atomær partikkel som følger Fermi-Dirac statistikk. De har halv-tallig spin (1/2, 3/2, etc.) og følger Paulis eksklusjonsprinsipp.

Paulis eksklusjonsprinsipp
To eller flere fermioner kan ikke være i samme kvantetilstand samtidig. Uformelt og forenklet: de kan ikke ha identiske egenskaper samtidig.

Fermi energi E_F
Det høyeste energinivået som kan ha ett eller to fermioner ved $T = 0$ til et system som følger Fermi-Dirac statestikk.

Fermigass
Et sett med fermioner som ikke vekselvirker med hverandre, sperret inne i et volum V. Ved $T = 0$ er energien til partiklene mye lavere enn E_F, men pga. Paulis eksklusjonsprinsipp vil fermionene fylle opp høyevere energinivåer for å unngå å være i samme kvantetilstand. Gitt stor nok tetthet av fermioner, så vil det ikke være nok energinåer under E_F, og man vil finne partikler over denne grensen. For en slik gass i en boks med N fermioner med masse m, så har man

$$E_F = (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

Og forventningsverdi til energien til en partikkel er

$$\mathrm{E}[E] = 3/5\, E_F$$

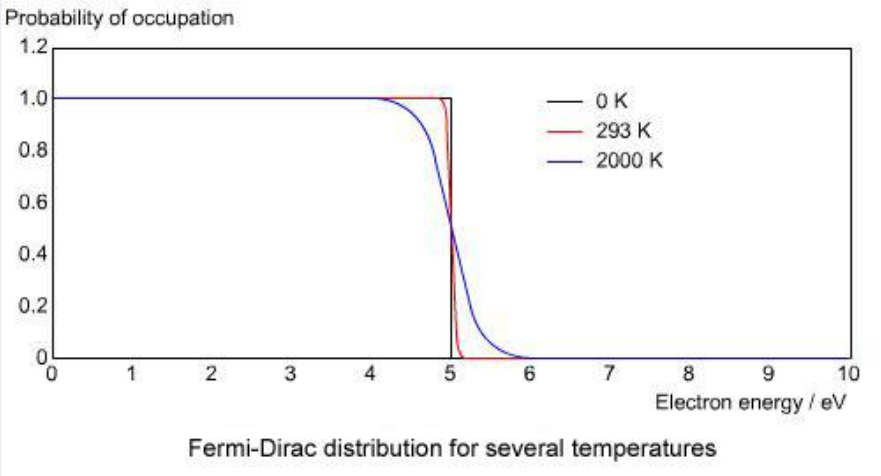
Ved høye nok temperaturer går både Bose-Einstein og Fermi-Dirac statestikk mot Maxwell-Boltzmann fordelingen.

Fermi-Dirac statestikk
Baserer seg på at Fermioner følger Paulis ekslusjonsprinsipp. Man får da i et system av N identiske fermioner i termodynamisk likevekt, at

$$F(E_i) = \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{e^{\beta(E_i-\mu)} + 1}$$

hvor n_i er antall fermioner ved energinivå E_i, g_i er degenerasjonen til E_i, og μ er det kjemiske potensialet. Man omtaler gjerne $F(E_i)$ som **Fermi funksjonen**. Man har her et normaliseringskrav ved $\sum n_i = N$.

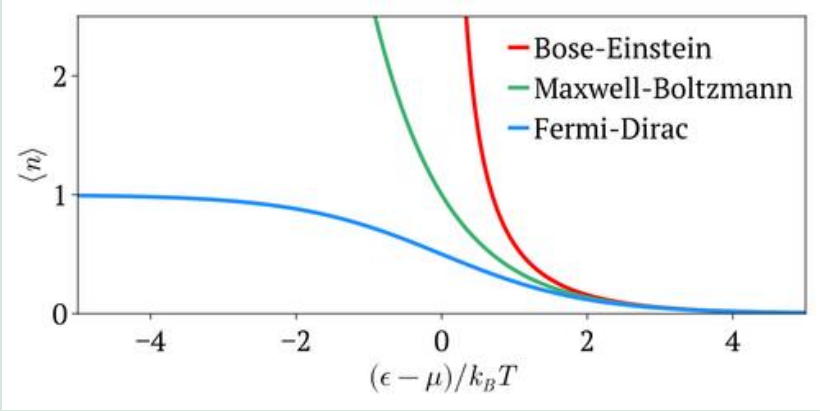
Ved $T = 0$ er μ lik Fermi energien E_F.



Fermi-Dirac distribution for several temperatures

Eksempel av graf av $F(E_i)$ hvor $E_F = 5\text{eV}$

Bilde fra University of Cambridge. Lisens: CC BY-NC-SA 4.0



$\langle n \rangle = n_i$ og $\epsilon = E_i$

System i termodynamisk likevekt med $T > 0$

Boson
Sub-atomær partikkel med heltallig spinn (0, 1, 2, etc.). Disse følger Bose-Einstein statestikk.

Bose-Einstein statestikk
Bosoner følger ikke Paulis eksklusjonsprinsipp, og et utallig antall bosoner kan samle seg på samme energi nivå ved lave temperaturer. Merk at den er veldig lik Fermi-Dirac, og at ved $E_i = E_F$ (som skjer ved $T = 0$), så går den mot uendelig.

$$F(E_i) = \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{e^{\beta(E_i-\mu)} - 1}$$

For fotoner er $\mu = 0$. Dette da $e^{-\beta\mu}$ kommer fra Lagrange multiplikatoren ved kravet om antall partikler. Men siden fotoner kan annihileres og skapes, så setter man multiplikatoren lik 0

$$\alpha = 0 \Rightarrow e^{-\alpha} = e^{-\beta\mu} = 1$$

Plancks strålingslov
Sort stråling kan bli sett på som en «gass» av fotoner i termisk likevekt med legemet som sender ut strålingen. Man tenker på fotonene som innestengt i en kube med volum V og får ved løsning av Schrödinger og bruk av Bose-Einstein statestikk, at energifordelinger er

$$U(E_i)dE_i = \frac{V\, E_i^3}{\pi^2(\hbar c)^3} \frac{1}{e^{\beta E_i} - 1} dE_i$$

Der den totale energien blir

$$U_{\text{tot}} = \int U(E_i)dE_i = \frac{\pi^2 V k_B^4}{15(\hbar c)^3} T^4$$

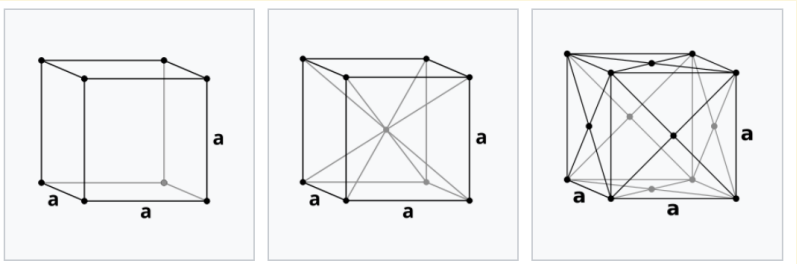
Stefans lov sier at energifluksen gjennom en flate er

$$\eta = \frac{U_{\text{tot}}}{4V} c = \frac{\pi^2 k_B^4}{60\hbar^3 c^2} T^4 = \sigma T^4$$

KRYSTALLER

Krystallstruktur

Kjennetegnes ved at man kan finne en «enhetscelle» i materiale som blir gjentatt i alle retninger. Kalles også «Bravaisgitter».



Simple cubic (P) | Body-centered cubic (I) | Face-centered cubic (F)

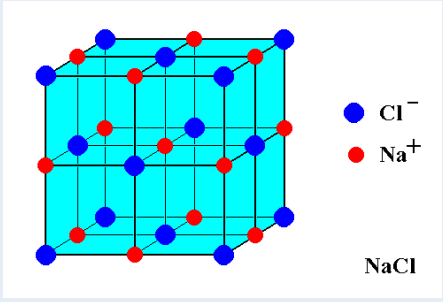
Illustrasjoner av Bas Zoetekouw. Lisens: BSD-2-Clause

Potensiell energi til atomer i NaCl krystallstruktur

Koksalt (NaCl) er en ioneforbindelse i en fcc-struktur (Face-centered cubic). Den potensielle energien en partikkel i krystallet opplever (gitt vi behandler alle atomene som punktladninger) er

$$U = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0}\sum_j \frac{z_j}{r_j} + A$$

der r_j er avstanden til ionet med ladning z_j. A er energien grunnet en frastøtningskraft. Under er enhetscellen til krystallen:



Illustrasjon av «oushida». Lisens: CC BY-SA 4.0

Ser man på situasjonen i 1 dimensjon, med alternerende positiv og negativ ladning, med gitteravstand a, så får man

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\sum_j (-1)^j \frac{2}{ja} + A = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 a}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{(-1)^j}{j} + A = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 a}\ln(1+1) + A$$

2-tallet kommer av at vi addere bidragene symmetrisk om et atom i midten. Man setter $\alpha = 2\ln 2$ kalt **Madelungkonstanten**, og får:

$$U = -\alpha e^2/(4\pi\epsilon_0 a) + A$$

En krystallstruktur hvor atomene har potensiell energi mindre enn 0 er stabil.

Frastøtningskraft i NaCl krystallstruktur

Energien grunnet frastøtningskraften kan parametrisere som

$$A = \frac{B}{r^n}$$

hvor r er avstand mellom ionene. Den totale potensielle energien til ionene i krystallet blir da

$$U = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^n}$$

Denne er minst når $dU/dr = 0$ og $r = r_0 = a$ som gir

$$B = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 n} r_0^{n-1}$$

Får da at

$$U(r) = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{r_0^{n-1}}{nr^n} - \frac{1}{r}\right) \text{ og } U_0 = U(r_0)$$

$$= -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Størrelsene r og n kan måles eksperimentelt (krystallografi). For NaCl har man målt $n \approx 9$ og $r_0 \approx 0{,}291\text{nm}$. Man har funnet $\alpha = 1.748$, og man får da for NaCl at $U_0 \approx -7{,}96\text{eV}$. Tilføres denne energien til et ionepar blir de separert.

Kovalente bånd er formet mellom to ikke-metaller som har deler elektron(er) i deres ytterste skall. Ved romtemperatur er de gjerne i væske eller gass tilstand.

Ioniske bånd er formet mellom et metall og et ikke metall. Også kalt elektrovalent bånd. Disse er formet grunnet den elektrostatiske tiltrekningen mellom hverandre. Ved romtemperatur er de gjerne i fast tilstand.

Van der Waals bindinger

Molekyler i væsker henger sammen grunnet usymetrisk fordeling av ladning i molekylets elektronsky. Molekylene har et dipolmoment som gjør de henger sammen. Dette er Van der Waals bindinger.

Van der Waals energi

En idealisert dipol har to ladninger med motsatt fortegn q og $-q$, plassert i avstand a fra hverandre. Dipolmomentet er $\mathbf{p} = q\mathbf{a}$. Elektrisk felt avtar som $1/r^3$. Man får det elektriske feltet:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\mathbf{p}}{r^3} - \frac{3(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}{r^5}\mathbf{r}\right)$$

Energien i vekselvirkningene mellom to dipoler er proporsjonal med produktet av feltene, da begge feltene avtar med $1/r^3$ får man:

$$U(r) = A/r^{12} - B/r^6$$

hvor A/r^{12} kommer fra frastøtningen. A og B er proporsjonalitets konstanter.

Hydrogenbindinger er veldig sterke, opp til ca. 1/10 av kovalente bindinger. Noe som forklarer vann sitt høye kokepunkt.

METALLER

Båndstruktur
Beskrivelse av energi nivåene elektroner kan og kan ikke ha i faste stoffer.

Bølgefunksjon overlapp
Matematisk konsept som beskriver hvor like to bølgefunksjoner er. Mer overlapp betyr mer likhet.

Elektronvandring
Metaller er krystalliske stoffer bestående av atomer med få elektroner i de ytterste skallene. Bølgefunksjonene til disse elektronene overlapper, som betyr de kan «vandre» nokså fritt mellom atomene. Disse elektronene befinner seg i **ledningsbånde**. De andre elektronene befinner seg i **valensbåndene**.

Elektroner i ledningsbånd som Fermigass
Antar man elektronene i ledningsbåndet ikke vekselvirker med hverandre, så kan man modellere de (gjerne ett eller to elektron pr. atom) som en Fermigass. Modellen avhenger av N/V. Man tar da N til å være antall elektroner i ledningsbåndet per kubikkmeter.

Eksempel med kobber:

Tetthet: $8940\ \mathrm{kg/m^3}$, atomær masse: $63{,}5\mathrm{u}$ ($u = 1{,}66 \cdot 10^{-27}\mathrm{kg}$). Antar ett elekton pr. kobberatom i ledningsbånder

$$\frac{N}{V} = \frac{\text{masse/m}^3}{\text{masse/atom}} = \frac{8940\ \text{kg/m}^3}{63{,}5 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-27}\ \text{kg}} \approx 8{,}48 \cdot 10^{28}\ \text{ledn. elek./m}^3$$

Hadde vi antatt to elektroner i ledningsbåndet hadde vi fått det dobbelte av dette.

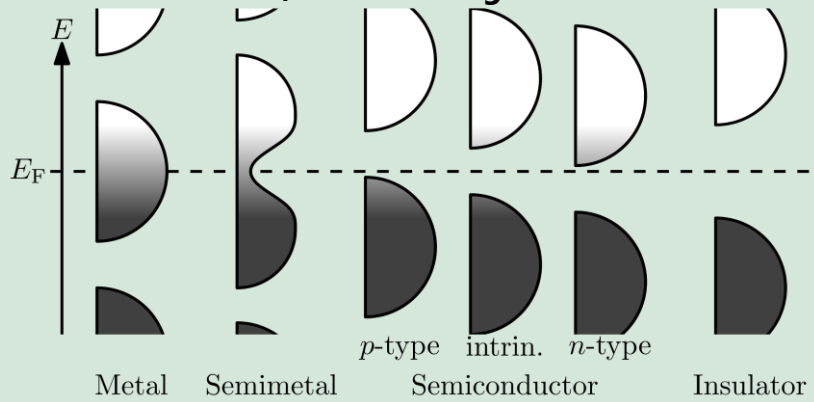
Ledningsevne i halvledere
Når halvledere leder har det kommet elektroner opp i ledningsbåndet fra valensbåndet. Man har da hull (positive ladninger) som beveger seg sakte fra valens bånd til valens bånd, og elektroner som beveger seg raskere fra ledningsbånd til ledningsbånd. Konduktiviteten til stoffet Kan skrives slik

$$\sigma = q_e n_i(\mu_e + \mu_p) = 1/\rho$$

Vor e er elektronladningen, n_i er konsentrasjon av elektroner, mens μ_e og μ_p er mobiliteten til elektroner og hullene. Mobiliteten er relatert til drifthastigheten som $v_d = \mu E$

Doping av halvledere
n-type: Tilsetter småmengde fosfor (symbol: P). Ekstra elektron til overs.
p-type: Tilsetter små mengde bor (symbol: B). Ekstra hull til overs.

Leder, halv-leder og isolator



y-aksen er tilgjengelig energinivå, x-aksen er tilstandstettheten/density of states.
Gradientfargen følger Fermi-Dirac fordelingen.
Helt mørk: energinivå fullt. Helt hvit: energinivå tomt.

Metal: Veldig gode ledere fordi Fermienergien E_F ligger inni en av båndene. Man har god overlapp av lednings- og valensbåndene, ingen (energi)**båndgap** som elektroner må overkomme.

Semi-Metal: Gode ledere, igjen fordi E_F ligger i ett av båndene. Ikke like stor overlapp av lednings og valensbånd som metall.

Halv-leder: Et lite bånd gap mellom ledningsbåndet og valensbåndet. Ingen elektroner kan være i båndgapet. Systemet må varmes opp (eksiteres, også mulig å gjøre med et E-felt) for at elektronene skal overkomme båndgapenergien E_G.

Isolator: Har et stor båndgap som krever mye eksitering for å overkommes.

Ohms lov, resistivitet og drifthastighet
Strøm er ladning dQ per tid dt, og kan skrives som: $I = dQ/dt = nq_eAv_d$
Hvor n er antall frie elektroner per volumenhet, q_e er elektronladningen, A er tverrsnittet på lederen, og v_d er drift hastigheten (snitt hastigheten) til elektronene. Det elektriske feltet $E = V/L$ (hvor V er potensialet på lederen mellom endene, og L er lengden) i lederen fører til en kraft på elektronene, som igjen girt en akselerasjon

$$a = F/m = q_eE/m$$

Denne akserelasjonen pågår helt til elektronet kolliderer etter en tid τ

$$v_d = \tau a = \tau\, q_eE/m$$

$$\Rightarrow I = neAv_d = \frac{nq_eA\tau q_eE}{m} = \frac{nq_e^2\tau}{m}\frac{A}{L}V = \frac{1}{\rho}\frac{A}{L}V = R^{-1}V$$

hvor $\rho = m/(ne^2\tau)$ er resitivitet.

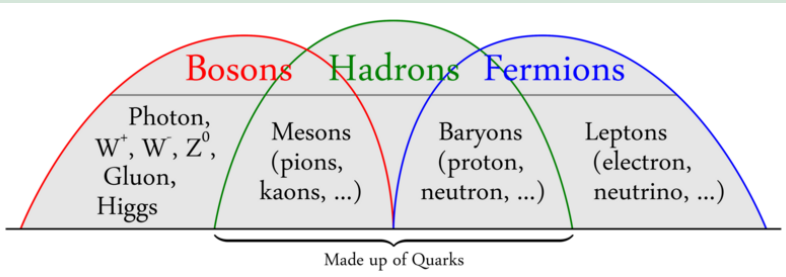
STANDARDMODELLEN

Farge ladninger

Kvarker har **fargeladninger** som fører til sterk tiltrekning til andre kvarker. Fargeladningene er enten rød, grønn eller blå *(også anti-rød, anti-grønn eller anti-blå)*. Kraftformidleren kalles **gluoner**. Det tenkes at kvarkene holdes sammen i et **gluonfelt**. Kvarker kommer alltid i grupperinger som gir **fargenøytralitet**, f.eks. rød+grønn+blå, eller en farge og dens anti-farge.

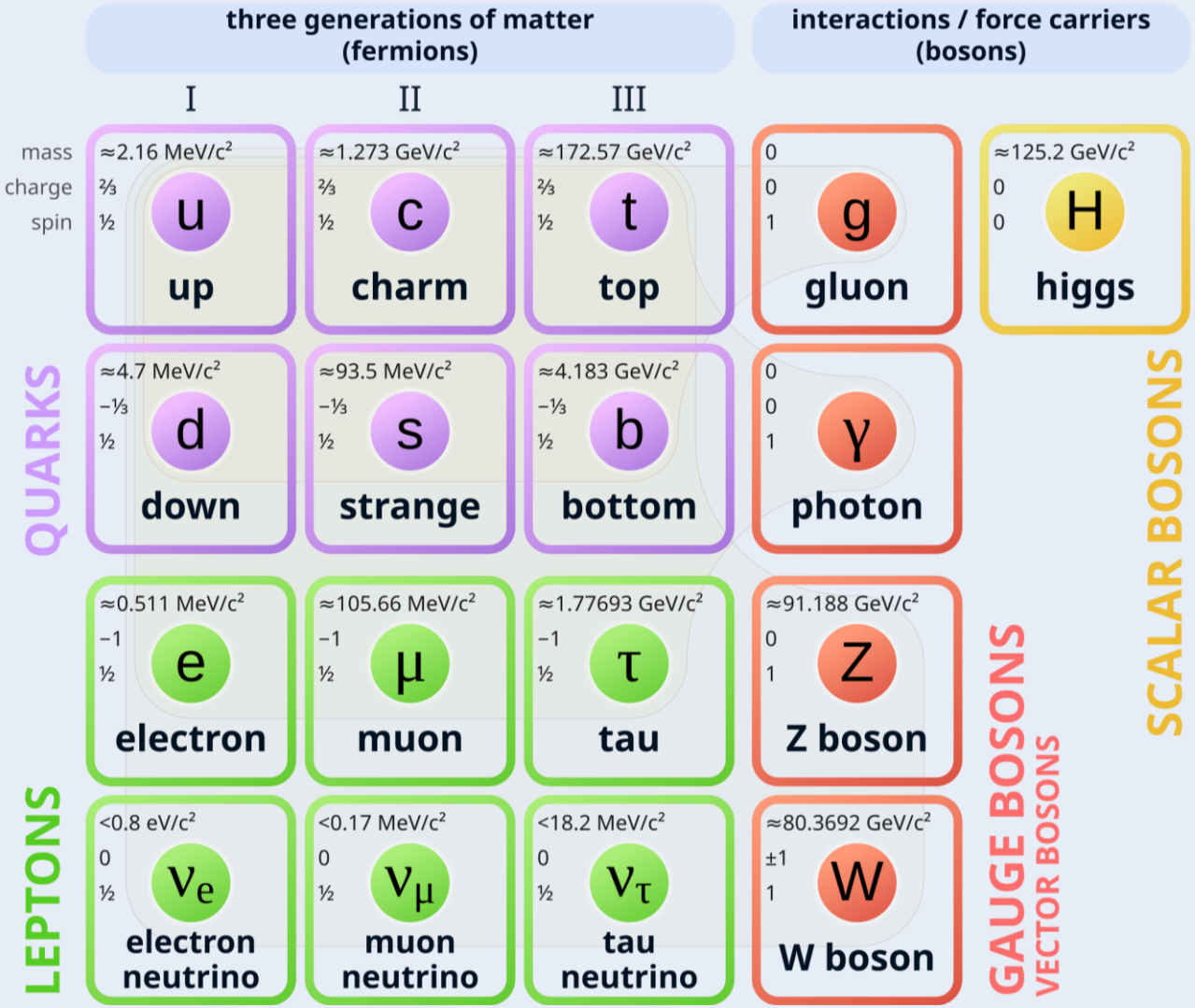
Hadron

Sub-atomær partikkel oppbygd av kvarker. De er enten **baryoner** (odde antall kvarte, oftest 3), og **mesoner** (jevnt antall kvarker, oftest 2).



Elementær/fundamental partikler

Partikler som ikke består av andre partikler. (Det finnes også anti-materie som er de samme bare med motsatt ladning)



Elementær/fundamental krefter

Elektromagnetiske: Fotoner er kraftbererer.

Sterk kraft (fargekraft): Gluoner er kraftberer. Binder kvarker sammen. Det finnes 8 forskjellige gluoner, alle beskrevet av en farge-antifarge kombinasjon (f.eks. rød-antigrønn).

Svak kraft: W^+, W^- og Z gaugebosonene er kraftbererer av den svake kraften mellom alle fermioner, bl.a. ansvarlig for radioaktivitet. W bosonene har ladning, og kobler derfor til den elektromagnetiske kraften.

Tyngdekraft: Ikke forklart av standard modellen enda.

Bevaringslover ved prosesser

Ladning: Summen av elektriske ladninger før og etter er lik.

Leptontall: Leptoner har leptontall +1, anti-lepton har leptontall -1, Summen av leptontall før og etter er lik.

Leptontall-«smaker»: Leptontallene $L_e = 1$ for e^- og ν_e. $L_\mu = 1$ for μ^- og ν_μ, og $L_\tau = 1$ for τ^- og ν_τ er alle individuelt bevart før og etter. Anti-lepton har motsatt torteign på disse.

Baryontall: Baryon består av 3 kvarker, hver kvark tilordnes baryontall 1/3, mest hver antikvar tilordnes baryontall -1/3. Summen av baryontall før og etter er lik.

ATOMKJERNEN

Nukloentall A, protontall Z og nøytrontall N

Atomkjernen består av Z antall protoner (**protontall/atomnummer**) og N antall nøytroner (**nøytrontall**), antall nukleoner blir da $A = Z + N$ hvor A også kalles **massetallet/nukleontallet**. Notasjonsmessig for et grunnstoff med symbol M, skriver man ${}^{A}_{Z}\mathrm{M}$.

Ladningsfordeling

Dette er en god modell for middels tunge og tunge kjerner.

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{(r-c)/a}}$$

hvor $c = 1{,}07\ \mathrm{fm} A^{1/3}$ og $a = 0{,}54$ fm er eksperimentelt bestemte verdier. c er avstanden fra origo til punktet der

$$\rho(r = c) = \frac{1}{2}\rho_0$$

ρ_0 bestemmes ut ifra normeringen av total ladning

$$Zq_e = 4\pi \int_0^\infty r^2 \rho(r) dr$$

hvor q_e er elementerladningen.

Kjerneradius

For mange formål kan radien til en kjerne utrykkes som

$r_A = r_0 A^{1/3}$ hvor $r_0 = 1{,}12$ fm

Massedefekt

Forskjellen mellom massen til en gitt kjerne og summen av massene til samme antall frie protoner og nøytroner.

Q-verdi

Dem utviklede energien i en kjernefysisk reaksjon basert på forskjellen i masser fra start og slutt. Reaksjonen

$A + B \rightarrow C + D$ har Q-verdi

$$Q = \Delta m c^2 = (m_A + m_B)c^2 - (m_C + m_D)c^2$$

$Q < 0 \Rightarrow$ Bare foregå hvis kjerne A eller B har kinetisk energi.
$Q > 0 \Rightarrow$ Utvikles kinetisk energi i prosessen som C og D får.

Hvile-/Invariant-masse

Massen til partikkelen i dens hvilesystem.

Hvile energi

Energien assosiert med hvilemassen $E_0 = m_0 c^2$

Atomærmasse enhet u

1/12 av massen til et ubundet karbon-12 atom som hviler og er i kjernefysisk og elektrofysisk grunntilstand.

$u \cong 1{,}66054 \cdot 10^{-27}\mathrm{kg}$
$\cong 931{,}49\ \mathrm{MeV/c^2}$

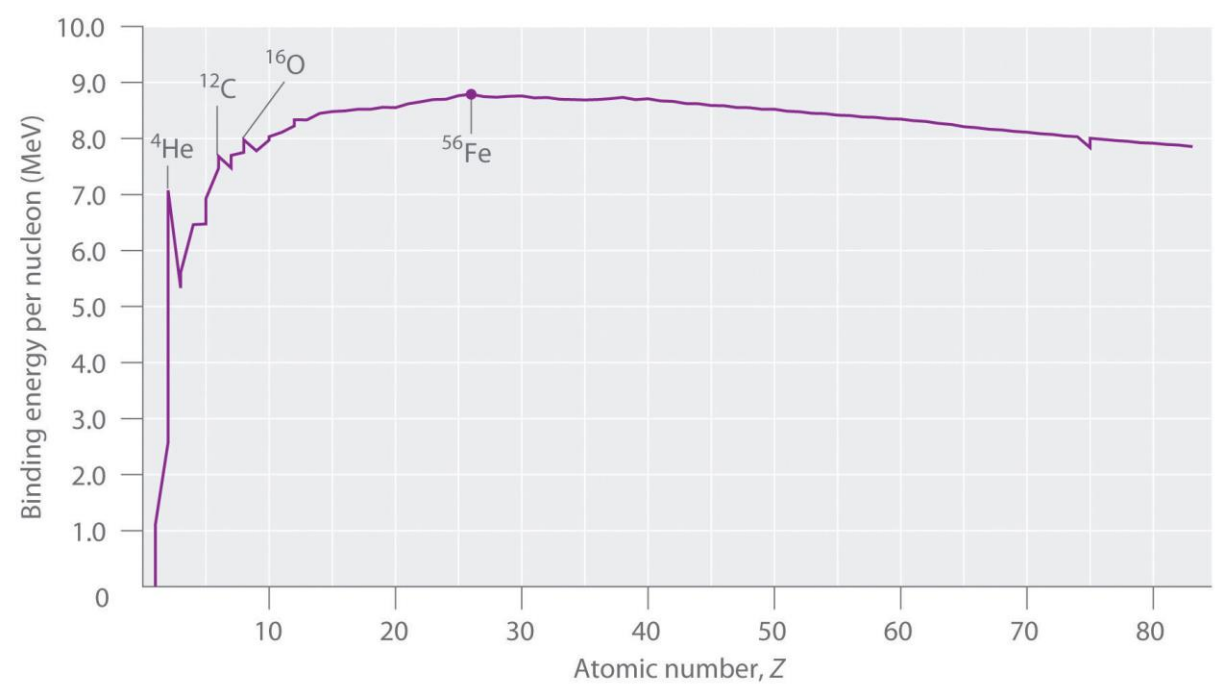
Atomkjernen som Fermigass

Atomkjernen, hvite dverger og nøytronstjerner kan diskuteres godt som fermigasser, hvor E_F vil være lik den kinetiske energien til det høyst liggende nukleonet. Husk at protoner og nøytroner er forskjellige, så man kan ikke bruke summen av antallet deres som N i Fermigass ligningen. Volumet er

$V = 4/3 \cdot \pi r_a^3$

Husk at: $\hbar c = 197{,}33$ MeV fm og $m_p c^2 = 938$ MeV

Bindingsenergi



Graf fra LibreTextsChemestry. Lisens CC BY-NC-SA 3.0

$$E_B = m_{\mathrm{defekt}} c^2$$

Kjernespinn og magnetisk moment

Kjerner har spinn og magnetisk moment. Protoner og Nøytroner er fermioner, ergo. halvtallig spinn $s = 1/2$, som gir egenspinn $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{3/4}\,\hbar$ og videre z-komp. magnetisk moment

$$\boldsymbol{\mu}_p = g_p \frac{q_e}{2m_p}\mathbf{S}_p \ \text{ og } \ \boldsymbol{\mu}_n = g_n \frac{q_e}{2m_n}\mathbf{S}_n$$

hvor $g_p/2 = 2{,}793$ og $g_n/2 = -1{,}913$

Stabilitet

Lette, stabile kjerner har ca. like mange P som N. Jo tyngre, jo flere N enn P.

RADIOAKTIVITET

Stråling
Overføring av energi i form av bølger eller partikler gjennom rommet ellet et materiale.

Radioaktivitet
Ustabile atomkjerner som taper energi via stråling. Også kalt **radioaktivt henfall**.

Alfa partikler er kjerner bestående av 2P og 2N.
Beta partikler er en høy energiske e^+ eller e^-

Radioaktiv halveringstid og levetid
Ustabile kjerner desintegrerer (henfaller) med konstant sannsynlighet per tidsenhet. Man har at antall kjerner N etter en tid t er

$$N(t) = N(0)e^{-\lambda t}$$

hvor λ er **henfallskonstanten** som er karakteristisk for hver ustabil kjerne.
Halveringstiden er tiden $t_{1/2}$ hvor $N(t_{1/2}) = N(0) \cdot 1/2$

$$t_{1/2} = \ln(2)/\lambda$$

Levetiden er den gjennomsnittlige tiden kjernen eksisterer fra den ble skapt

$$\tau = 1/\lambda$$

C-14 datering
Kosmisk stråling av protoner og andre partikler induserer kjernereaksjoner i atmosfæren, bl.a. $n + {}^{14}N \rightarrow p + {}^{14}C$. C-14 har $t_{1/2}$ på 5740 ± 40 år, og henfaller via β^-. Levende materiale tar opp C-14 fra atmosfæren når de lever, når de dør tar de ikke lenger opp, og vi kan måle mengde for å finne alderen til materialet.

Enhet for radioaktivitet
Aktivitet a er gitt i Bequerels (Bq), og er lik antall desintegrasjoner per sekund, altså antall henfall per sekund. Man har

$$N = \frac{a}{\lambda} = \frac{a t_{1/2}}{\ln 2}$$

hvor a er aktivitet i Bq.

Typer radioaktiv henfall
Det mest vanlige radioaktive henfall skjer via disse strålingene:

Alfa henfall (α-stråling): Kjerne sender ut en α-partikkel (samme som en Helium-4 kjerne). Disse er relativt store og massive og kan bli stoppet av et papirark. Denne typen henfall skjer gjerne i de tungeste elementene. Eksempel:

$$^{238}_{92}\mathrm{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\mathrm{Th} + {}^{4}_{2}\mathrm{He}$$

Beta minus henfall (β^--stråling): Et nøytron blir omgjort til et proton, og det blir produsert et elektron og et elektronantinøytrino. Eksempel:

$$^{14}_{6}\mathrm{C} \rightarrow {}^{14}_{7}\mathrm{N} + \mathrm{e}^- + \bar{\nu}_\mathrm{e}$$

Beta pluss henfall (β^+-stråling): Et proton blir omgjort til et nøytron, og det blir produsert et positron og et elektronnøytrino. Eksempel:

$$^{23}_{12}\mathrm{Mg} \rightarrow {}^{23}_{11}\mathrm{Na} + \mathrm{e}^+ + \nu_\mathrm{e}$$

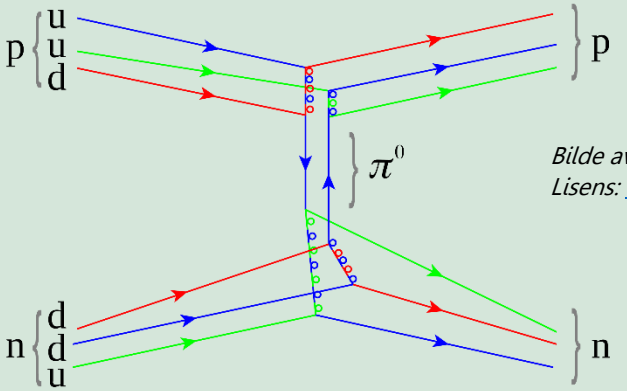
Beta-stråling er mye mindre enn alfa-stråling, og trenger mer for å stoppes, som f.eks. et aluminium skjold.

Gamma henfall (γ-stråling): Forekommer ofte etter alfa eller beta henfall, hvor datterkjernen etter reaksjonen er i en eksitert tilstand. Datterkjernen kan henfalle til en lavere energi tilstand via å sende ut gamma stråling, altså et foton. Eksempel:

$$^{87}_{38}\mathrm{Sr}^* \rightarrow {}^{87}_{38}\mathrm{Sr} + \gamma$$

STERK KJERNEKRAFT

Sterk kjerne kraft er egentlig den samme kraften som den sterke kraften (fargekraften). Det er fargekraften som strekker seg utenfor hadronet, og manifesterer seg som en kraft mellom hadroner. Denne kraften er bert av virtuelle π- og ρ-mesoner.



Bilde av Fred the Oyster
Lisens: CC BY-SA 4.0

Dråpemodellen for B
Nukleoner beveger seg som seige dråper i kjernen. Nukleon med flere naboer har større bindings energi B pga. sterke kjernekraftens korte rekkevidde. Det første bidraget til B er

$$B_V = a_V A = a_V(N+Z)$$

Mange dråper ligger på overflaten av kjernen, og har mindre naboer. Overflate arealet er $\propto A^{2/3}$ så det andre bidraget blir $B_O = -a_o A^{2/3}$. Protoner frastøter hverandre, og har høyere energi, derfor mindre B. Frastøtingen er $\propto Z^2/r$ hvor $r \propto A^{1/3}$ og vi får $B_C = -a_C Z^2/A^{1/3}$. Høy N-P asymmetri fører til mindre B: $B_S = -a_s(N-Z)^2/A$. Om der er odde-odde, like-odde eller like-lik påvirker B: $B_{a_p} = a_p \frac{(-1)^Z - (-1)^N}{\sqrt{A}}$

a_i er empiriske verdier. $B = B_V + B_O + B_C + B_S + B_{a_p}$

Sterkere enn EM siden den forhindrer protoner i å frastøte hverandre i kjernen. Kort rekkevidde ($\sim 10^{-15}$m) siden molekyler kan forklares bare med EM-krefter. **Nøytron-Proton asymmetri** forekommer da protoner har mer energi enn nøytronene grunnet deres frastøtning til hverandre. Det er plass til flere nøytroner i en endelig potensialbrønn da deres energinivå er tettere. Derfor ser man flere N i tyngre kjerner.

STRÅLING

Dose og doseekvivalens

Dose D er gitt i Grays (Gy), og er lik energiavsetning per kg kroppsvev

$$D = 1\text{Gy} = 1\ \text{J/kg}$$

Doseekvivalens D_E er gitt i Sieverts (Sv), og beskriver strålingens skadelighet. Den er lik energiavsetning per kg kroppsvev, multiplisert med en vekfaktor ω_R. For α-stråling er $\omega_R = 20$, mens for β- og γ-stråling er den $\omega_R = 1$

$$D_E = \omega_R \cdot D$$

Ioniserende stråling er den skadelige strålingen da den har nok energi til å rive løs elektroner fra atomer (ionisere), og kan skade DNA i celler (som forårsaker kreft). Man bruker dog også store doser ioniserende stråling til å drepe kreftceller.

Barn enheten

Sannsynlighet for en reaksjon karakteriseres med virkningstverrsnittet σ, og måles i Barns (b), der vi har $1\text{b} = 10^{-28}\text{m}^2$

Antall partikler som har kommet gjennom målskiven

$$N(x) = N_0 e^{-n\sigma x}$$

$\lambda = 1/(n\sigma)$ kalles **attenueringslengden** eller **absorbsjonslengden.**

Virkningstverrsnitt

Gitt en målskive med areal A, og tykkelse dx, hvor målskiven består av N partikler eller kjerner. Om denne blir bestrålt av en stråle med intensitet $I = N/A$ så har man at sannsynligheten for vekselvirkning er

$$P = \frac{dI}{I} = \frac{dN}{N} = \sigma n dx$$

hvor σ er **virkningstverrsnittet**, og n er antall partikler per volumenhet. Her er dx så liten at partiklene ikke kan ligge oppå hverandre.

Virkningstversnittet har enhet areal, og angir størrelsen til det effektive arealet som en innkommende partikkel fra strålingen, og en partikkel i målskiven må befinne seg innenfor for at de skal kunne vekselvirke med hverandre.

KJERNEREAKTOR

Fissibel

En isotop (lik Z) er fissibel om den kan deles i to omtrent like store deler når den blir truffet av et **termisk nøytron** (lav hastighets nøytron). Eksempel på fisjon reaksjon:

$$\text{n} + {}^{235}\text{U} \rightarrow {}^{94}_{36}\text{Kr} + {}^{139}_{56}\text{Ba} + 3\text{n}$$

Kjedereaksjon

Reaksjon som fører til flere enn 1 nye reaksjoner. F.eks. fisjon reaksjon produsert med innskyting av nøytron, som produserer flere nøytroner inni et materiale av flere fissible kjerner.

En isotop som kan føre til dannelse av en fissil isotop kalles **fertil**.

Proton-Proton syklusen

Ved høy nok energi fusjonerer protoner ${}^1_1\text{H}$ til deuterium ${}^2_1\text{H}$

$$\text{p} + \text{p} \rightarrow {}^2_1\text{H} + \text{e}^+ + \nu_\text{e}$$

For at to protoner skal komme så nærme hverandre kreves det en energi i kollisjonen på 1MeV, noe som skjer inni solen. Merk at det er også mulig for det ene protonet og tunnelere inni det andre. Etter denne reaksjonen et proton fusjonere med Hydrogen-2, og man får Helium-3, Deretter vil to He-3 kjerner fusjonere til He-4 + 2 protoner. Nettoreaksjonen blir

$$6\text{p} \rightarrow {}^4_2\text{He} + 2\text{p} + 2\text{e}^+ + 2\nu_\text{e} + 24{,}7\text{MeV}$$

Kritisk masse

Minste mengde fissilt materiale av en gitt isotop for å opprettholde en kjedereaksjon. For U-235 er den rundt 60-70kg, for Pu-239 er den rundt 5-10kg.

Anrike

Prosessen hvor man øker konsentrasjonen av en ønsket isotop i et materiale. Uran i naturen består av U-238 (~99.27%), U-235 (~0.72%) og U-234 (~0.006%). Anriket uran består av en økt mengde U-235 (~3-5%) da dette er den eneste fissile kjernen i naturen (i betydelig mengde) med termisk nøytroner.

Brensel og kjøling i reaktor

Typisk brensel i en kjerne reaktor er U-235. De utsendte nøytronene i fisjonsprosessen har høy energi, og σ blir for lavt. Man tar i bruk **moderatorer** som bremser ned nøytrinoene til termiske nøytrinoer. Moderatorene absorberer og stopper også noen av nøytrinoene slik at kjedereaksjonen er kontrollert.

Skapelsen av tyngre elementer

I mer massive stjerner har man høyere temperaturer og det fusjoneres tyngre og tyngre elementer. Enda tyngre elementer blir produsert i supernovaer.

DIRAC-LIGNINGEN og FEYNMANDIAGRAMMER

Dirac-ligningen

Den beskriver elektroner med ½-spinn og er konsekvent med sannsynlighetsbevaring og relativitetsteorien.

Tids-Avhengige:

$$-i\hbar c \sum_{n=0}^{4} \alpha_n \frac{\partial \Psi}{\partial x_n} + \beta mc^2 \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Tids-Uavhgengige:

$$i\hbar c \sum_{n=1}^{4} \alpha_n \frac{\partial \psi}{\partial x_n} + \beta mc^2 \psi = E\psi$$

hvor $E = (pc)^2 + (mc^2)^2$ der momentum operatoren er $\hat{p}_n = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_n}$. n representerer retning i rom-tid, og α og β er 4×4 matriser.

Løsning av Dirac-ligningen

Bølgefunksjonene som tilfredsstiller Dirac-ligningen har 4 komponenter $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4)$. Løsningene uten et potensial er plane bølger.

To av de (en for hvert spinn) med positiv energi:

$$\Psi_n(x,t) = u_n e^{ipx/\hbar} e^{-iEt/\hbar}$$

De to andre (med bevegelsesmengde den andre veien) representerer løsninger med negativ energi

$$\Psi_n(x,t) = v_n e^{-ipx/\hbar} e^{iEt/\hbar}$$

Kort fortalt: Negativ energi bølgefunksjonene representerer antipartikler som beveger seg framover i tid.

Koblingskonstant

Nummer som representerer styrken til kraften i en vekselvirkning. **Finstrukturkonstanten** α er proporsjonal med kvadratet av koblingsstyrken til ladningen til et elektron.

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \cong \frac{1}{137}$$

Bevaringslov: Ladningskonjugasjon

Betyr å bytte ut en partikkel med sin antipartikkel, gjør man det to ganger er man tilbake til der man startet. Denne kan brytes.

Feynmandiagrammer

Visuell representasjon av oppførselen og vekselvirkningen til sub-atomære partikler. De viser tidsutviklingen av bølgefunksjoner som tilfredsstiller Dirac-ligningen når de vekselvirker med kvantiserte felt. De representerer komplekse amplituder.

Hvordan de skal tolkes og bruker:

- Rette linjer er materie partikler
- Bølgete linjer er kraft-bærende partikler.
- Linjer som ikke forlater diagrammet (interne linjer) er virtuelle partikkler.
- Møtepunktene (**vertekspunkt**) hvor linjer møtes representerer vekselvirkning.
- Bevaringslovene gjelder i vertekspunktene. (ladning, spinn, energi, etc.)
- Ett møtepunkt/vertekspunkt MÅ være knyttet til 3 linjer.
- Ett møtepunkt må ha en inngående pil og en utgående pil.
- Virkelige vekselvirkninger har minst to vertekspunkter.
- Tiden går fra venstre til høyre. Den vertikale retningen representerer ingenting. Noen praktiserer med å la tiden gå fra bunn til topp.
- Materie har piler som går fra venstre til høyre (går med tiden)
- Antimaterie partikler har piler som går fra høyre til venstre (går mot tiden)

(man tenker gjerne på antimaterie som normal materie som reiser bakover i tid)

Litt om matematikken bak de:

- De eksterne linjene representer planbølgeløsninger av Dirac-ligningen.
- Sannsynligheten for en prosess er proporsjonal med kvadratet av en **verteksfaktor** som angir **koblingsstyrken** eller ladningen på partikkelen som vekselvirker med en feltpartikkel.

En **virtuell partikkel** er *ikke* en partikkel, man kan heller se på det som en felt forstyrrelse som kommer av andre partikler som er nær hverandre. Disse har virtuell masse når energibevaring ellers ikke er mulig. Denne massen eksisterer bare i et tidsrom gitt ved Heisenbergs usikkerhetsrelasjon: $\Delta t = \hbar/(2\Delta E)$

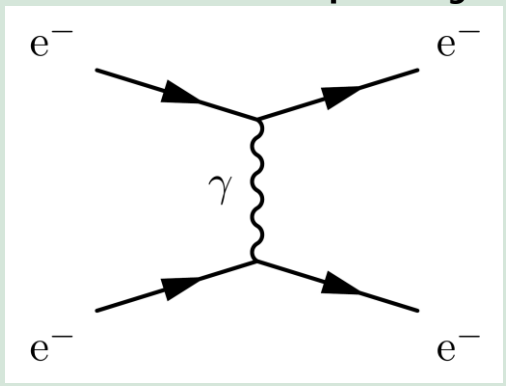
Spredningsforsøk er forsøk hvor man skyter partikler mot ett target. **Elastiske spredninger** er når partikler overlever med bevart bevegelsesmengde og energi, f.eks.:

$$a + b \rightarrow a + b$$

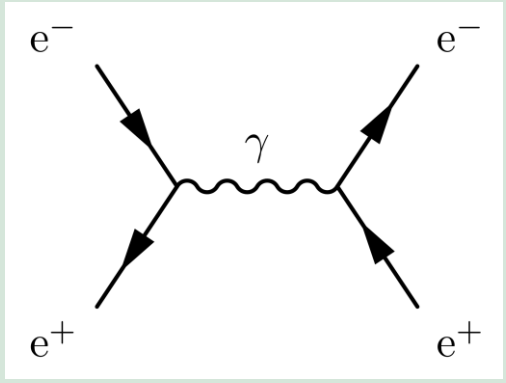
Inelastisk spredninger er når energien overføres til andre deler av targetet, og partikler kan miste sin identitet, f.eks.:

$$a + b \rightarrow c + d$$

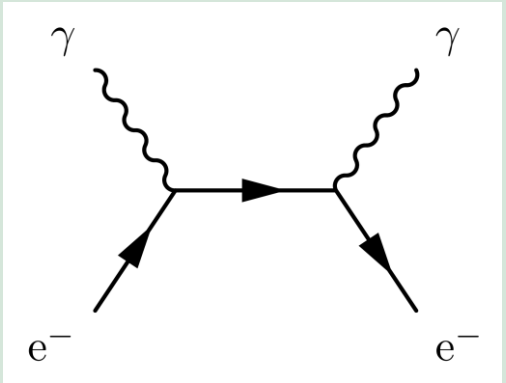
Elektron-Elektron spredning



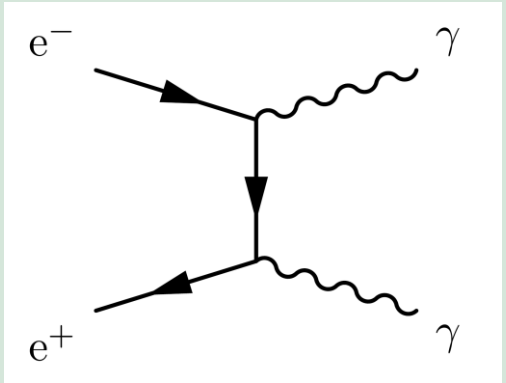
Elektron-Positron (Bhabba)



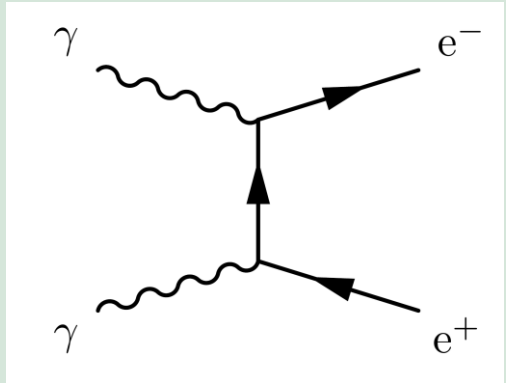
Compton spredning



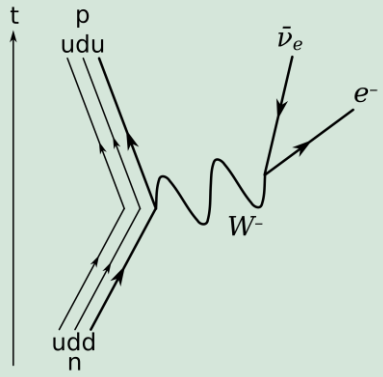
Par annihilering



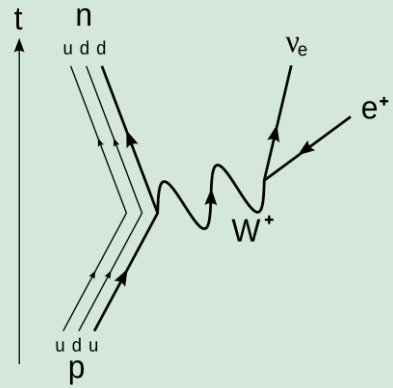
Par danning



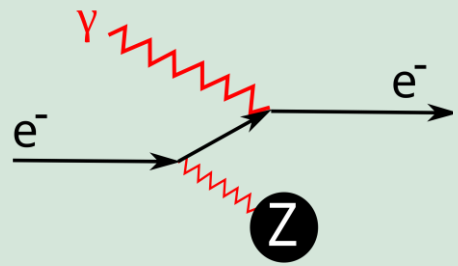
β^- henfall



β^+ henfall



Fotoelektrisk effekt



Bevaringslov: Tidsreversjon

Prosesser skal kunne kjøre baklengs. F.eks. er par danning og par annhilering samme prosess, bare reversert. Man formaliserer dette ved å definere en tidsoperator $\hat{\mathrm{T}}$ for tidsreversjon. Reverserer man tiden to ganger komer man tilbake til det opprinnelige

$$\hat{\mathrm{T}}\hat{\mathrm{T}} = \hat{\mathrm{T}}^2 = \hat{\mathrm{I}}$$

Hvor $\hat{\mathrm{I}}$ er enhetsoperatoren, altså ingen effekt ved bruk.

Bevaringslov: Paritet

Paritets operatoren $\hat{\mathrm{P}}$ skifter fortegn på alle koordinater, man kan se på dette som speiling etterfulgt av en rotasjon. Gjør man dette ti ganger kommer vi tilbake til det samme systemet

$$\hat{\mathrm{P}}\,\hat{\mathrm{P}} = \hat{\mathrm{P}}^2 = \hat{\mathrm{I}}$$

Denne kan brytes i svake vekselvirkninger.

Breit-Wigner fordeling

En kontinuerlig sannsynlighetsfordeling som blir brukt til å modellere resonans (en topp rundt en viss energi funnet i spredningsforsøk), gjerne bare brukt for veldig ustabile partikler med kort levetid.

Forgreiningsforhold

Ustabile partikler kan henfalle til forskjellige tilstander. Ved hjelp av Feynmanndiagrammer kan man estimere de forskjellige delbreddene Γ_n, man har

$$\Gamma_{\mathrm{tot}} = \sum \Gamma_n$$

Verdien av delbreddene er proporsjonal med **forgreiningsforholdet**, som gir sannsynligheten for at den ustabile partikkelen skal henfalle i en bestemt kanal

$$B(a \to n) = \Gamma_n / \Gamma_{\mathrm{tot}}$$

Naturlig båndbredde

Sammenhengen mellom levetid og naturlig båndbredde til en eksitert tilstand eller ustabil partikkel er

$$\Gamma = \hbar/\tau$$

der Γ er spredningen i energi man finner ved gjentatte målinger av et ustabilt system.