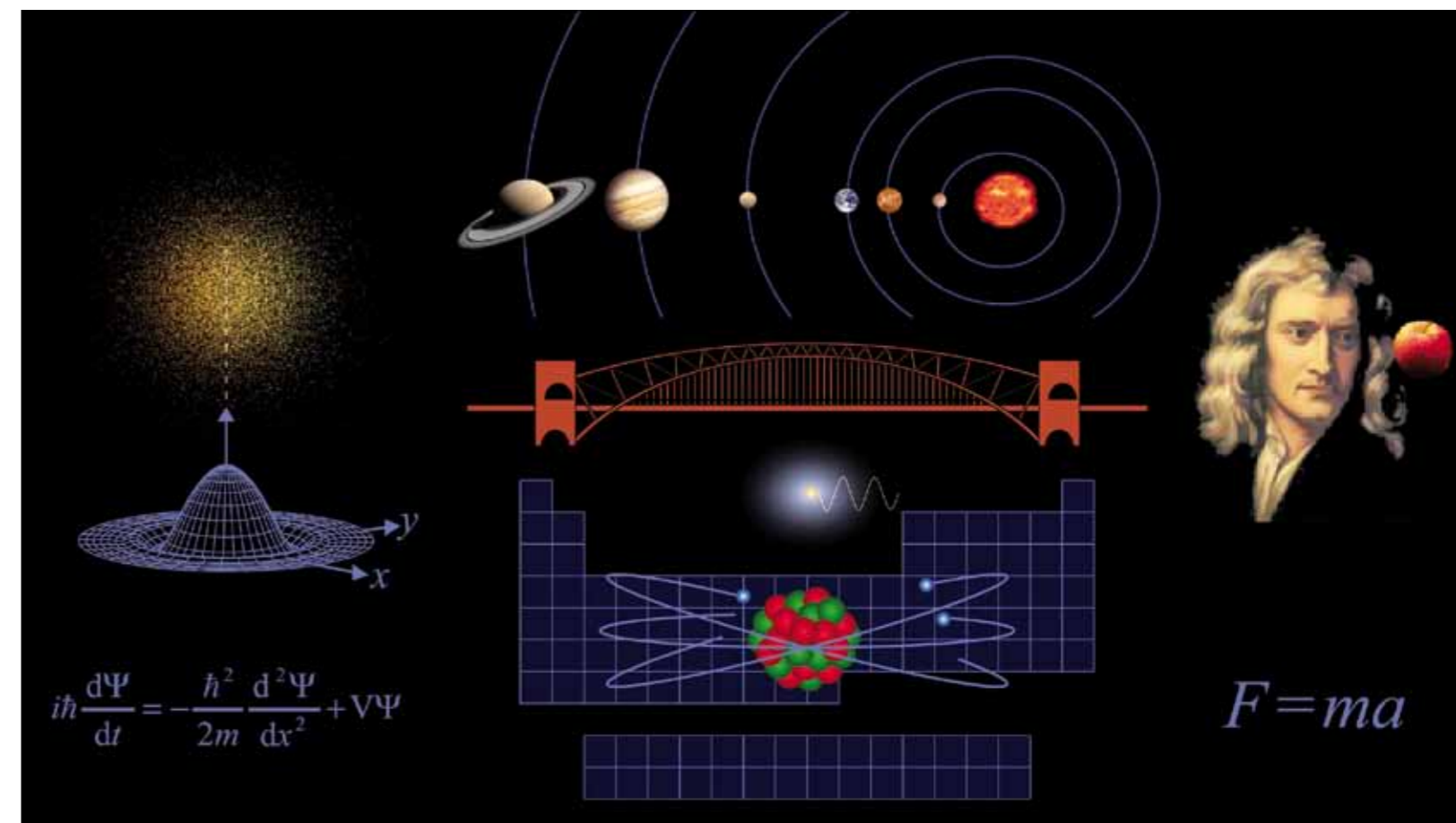


Klassisk mekanik

kvant-*VS* mekanik

Nyligen har en bro upptäckts mellan den klassiska mekaniken och kvantmekaniken som traditionellt används för att beskriva nanokosmos. Genom en bättre förståelse av fysiken i nanokosmos öppnas en ny värld med riktigt småskalig elektronik och biokemiska mediciner.



Med hjälp av semiklassiska teorier har forskare kunnat bygga en bro mellan å ena sidan den kvantmekaniska världen, symboliserat av sannolikhetsmolnet till vänster i bild, som beskrivs av Schrödingekvationen, och å andra sidan den välkända klassiska världen där Newtons mekanik gäller, till höger. Överst i bild, elliptiska planetbanor runt solen i vårt solsystem som beskrivs av Newtons mekanik. Underst, elektronbanor runt en kärna i en atom, så som Bohr beskrev dem 1913.

FRAM TILL BÖRJAN av 1900-talet dominerade den fysiska världsbild som följer av Newtons klassiska mekanik, som enligt historien kom till då han fått ett äpple i huvudet. Under några dramatiska år kom fysiken sedan att genomgå en revolution i synen på hur små partiklar, såsom atomer, beter sig. Fysikerna förstod främst genom observationer av hur ljus och materia påverkar varandra att den klassiska mekaniken inte kunde användas för att beskriva små partiklar. Några viktiga detaljer i den klassiska beskrivningen ändrades och på så sätt fick man bättre överensstämmelse mellan de teoretiska förutsägelseerna och de experimentella observationer man gjort. Ett viktigt exempel på en modifierad klassisk beskrivning är den modell för väteatomen som Niels Bohr utvecklade 1913, i vilken elektronen

cirkulerar med en bestämd radie kring väteatomens kärna. Bohrs modell kunde på ett elegant sätt förklara vilka färger av ljuset från solen som absorberas under den åtta minuter långa resan till jorden. Bohr använde sig av klassisk mekanik som grund, men lade sedan till ytterligare några krav på vilka rörelsemönster som var tillåtna för elektronen som kretsar kring väteatomens kärna. Han kunde då beräkna de specifika energinivåer som bestämmer vilka färger på ljus som kan absorberas och utsändas av en väteatom.

Kvantmekaniken föds

Under 20- och 30-talet kom så småningom en helt ny teori, den så kallad kvantmekaniken att utvecklas. Matematiska metoder

togs fram, som trots sina ibland mystiska konsekvenser, till exempel kan en partikel ibland gå igenom en vägg, har kvantmekaniken hittills alltid varit i överensstämmelse med de experimentella observationerna i atomernas värld. Successivt övergavs då den av Bohr modifierade klassiska mekaniken till förmån för den rent kvantmekaniska. Den viktigaste ekvationen, den så kallade Schrödingerekvationen kom att användas för beskrivningar av små partiklar såsom atomer. Schrödingerekvationen kan, givet att man vet vilka krafter som verkar på en partikel, förutsäga i vilka speciella energinivåer som partikeln kan observeras. Detta är en dramatiskt annorlunda beskrivning jämfört med den klassiska mekaniken som skulle tillåta alla möjliga energinivåer.

Den runda bollen

Krafterna som verkar på en atom kan beskrivas med hjälp av elasticiteten i väggarna på den behållare den är inspär rad i. De mest användbara fallen har fått speciella namn som beskriver dess elasticitet och form. Ett viktigt exempel är den runda bollen, inuti vilken ett antal atomer, mycket mindre än bollen i storlek, kan vara instängda.

Med klassisk mekanik kan man då beskriva det som händer inuti bollen i termer av att atomerna studsar mot insidans hårda yta. Eventuellt tar man även med kollisioner mellan två atomer, det vill säga växelverkan, i beskrivningen. Om man å andra sidan löser Schrödingerekvationen för systemet, alltså atomerna inne i bollen, som ger den kvantmekaniska, mer korrekta bilden av vad som händer, blir resultatet att endast vissa energinivåer är tillåtna och vi kan endast ge en sannolikhet för att en atom skall vara vid en viss plats vid en given tidpunkt. Frågan: "Var i bollen är en viss atom vid en viss tidpunkt?" har inget svar och således ingen mening i en kvantmekanisk beskrivning. Atomernas positioner är istället utsmetade i ett sannolikhetsmoln. Detta kan låta konstigt, men låt oss understryka att kvantmekaniken är den mest framgångsrika teorin forskarna har för att tolka experiment med atomer, och

att de frågeställningar forskare formulerar för att utforska fysiken ofta är annorlunda än de vi är bekanta med från vardagslivet.

Systemet med atomer inneslutna i en boll realiserades 1990 i ett framgångsrikt experiment vid universitetet i Köpenhamn. Man använde sig då av metallkluster, en klump med några tusen natriumatomer. Denna gång blev det bingo för forskarna, eftersom deras teorier för metallklustrets fingeravtryck stämde perfekt med experimenten.

Atomfällor med mjuka väggar

Ett annat viktigt system i fysiken är den harmoniska oscillatorn. Om man åter använder illustrationen med bollen har behållaren - ofta kallad atomfälla - nu elastiska väggar, så istället för att en atom vänder tvärt vid väggen studsar den mjukt, som mot en fjädrande kudde.

I moderna experiment med atomgaser utsätts partiklarna för krafter som hamnar mellan fallet med den hårda väggen och den speciella elasticiteten hos den harmoniska oscillatorn. Man kan då inte lösa Schrödingerekvationen med penna och papper utan måste göra numeriska beräkningar på en dator.

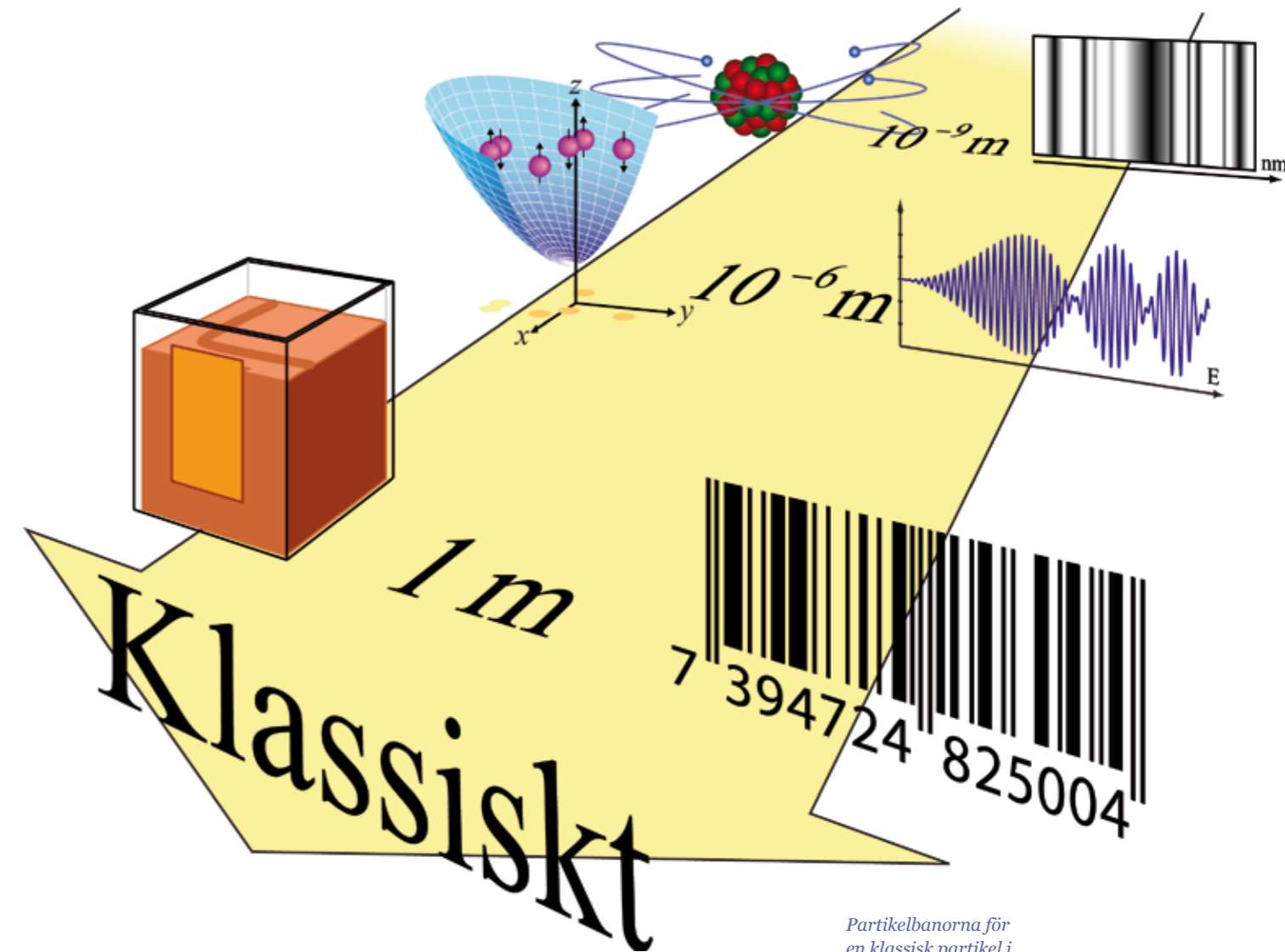
Uppdelningen i problem som kan lösas med penna och papper och problem som måste lösas numeriskt var viktigare förr då avsaknaden av dagens kraftfulla datorer omöjliggjorde datorberäkningar av större omfattning. Även idag strävar fysiker ofta efter att kunna lösa viktiga problem för hand. Ett motiv är den rent yrkesmässiga konstnärligheten, att kunna använda sina matematiska verktygslådor till att sammanfatta lösningen på komplexa problem, eller att relatera två till synes skilda teorier i några enkla formler, tycker forskarna är vackert! Forskarna behöver också ha tillgång till lösningar för vissa referensproblem när de testar nya datorprogram.

Som nämndes tidigare kan även atomerna studsar mot varandra, vilket dramatiskt påverkar deras beteende. Att i detalj beräkna detta exakt för många atomer är mycket svårt,

Skalstruktur

- streckkoden för ett kvantsystem

Skalstruktur: Typiskt grupperar sig flera energitillstånd i kluster och bildar så kallade skal. Detta är välkänt från kemien där man ofta talar om en atoms olika elektronskal. Denna gruppering av energitillstånd ger upphov till ett karakteristiskt fingeravtryck, vilket har stor betydelse för egenskaperna för det kvantmekaniska systemet. Genom kännedom om dessa skalstrukturer har vetenskapsmän under hela 1900-talet förklarat förekomsten av många grundämnen och dess isotopsammansättning i naturen. Om det uppstår variationer på lägre energiskalor, så kallas detta för super-skalstrukturer. Forskarna har förutspått existensen av super-skalstrukturer i atomgaser kyllda till absoluta nollpunkten.



Partikelbanorna för en klassisk partikel i atomgasen kan användas för att avslöja de kvantmekaniska fingeravtrycken även långt in i kvantmekanikens värld.

nästan omöjligt. Man kan dock använda sig av något som kallas medelfältsapproximation, där effekten av kollisionerna mellan atomerna istället modelleras genom att ändra elasticiteten i gasbehållarens väggar.

Klassiska mekaniken förutsäger kvantmekanik

Låt oss nu återvända till skillnaderna mellan klassisk mekanik, där partiklar rör sig i specifika banor, och kvantmekaniken där det endast finns sannolikheter för att finna en partikel vid en viss plats vid en given tidpunkt, enligt Schrödingerekvationen. Niels Bohr kunde erhålla de rätta kvantmekaniska resultaten för väteatomen utan kännedom om Schrödingerekvationen, endast genom vissa modifikationer av den klassiska mekaniken.

Forskare i bland annat Lund har använt sig av så kallad periodisk-ban-teori, vilket är en utveckling av Bohr's teorier, och applicerat dem på systemet med ultrakalla atomgaser. Fascinerande nog kan man erhålla information om det kvantmekaniska uppförandet för ett system genom att studera vissa klassiska banor för hur en atom rör sig enligt klassisk meka-

nik. Så kallade spårformler beskriver hur de kvantmekaniska energitillstånden för atomgasen kan erhållas från klassiska partikelbanor. För de två viktiga exemplen, den runda bollen och den harmoniska oscillatorn, har detta varit känt sedan mer än trettio år. I det nya arbetet har kunskapen utvidgats i området mellan de två tidigare kända exemplen. Nya spårformler som beskriver de kvantmekaniska fingeravtrycken för en viktig typ av halv-elastiska väggar har introducerats för att teoretiskt

kunna förutsäga fingeravtrycken för de nya experimenten med atomgaser. Forskarna har därigenom kunnat lösa ett komplicerat kvantmekaniskt problem med penna och papper, genom att bygga en bro från den klassiska mekaniken.

Framtida experiment

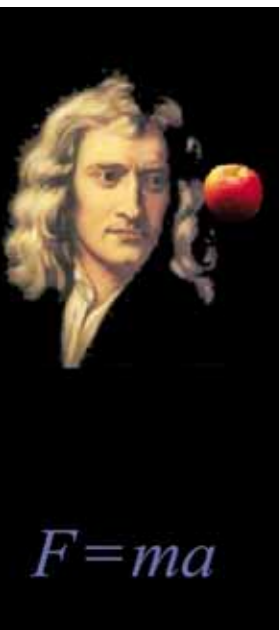
Den speciella typ av elasticitet forskarna jobbat med är som nämnts viktig därför att den beskriver ett system som sedan några år tillbaka kan realiseras i experiment. Dessa experiment består av ultrakalla atomgaser, i vilka atomer inspärade av halv-elastiska väggar kan fås att studsas mot varandra eller attraheras av varandra beroende på styrkan av ett pålagt yttre magnetfält. Forskarna väntar nu på att deras kollegor internationellt skall designa experiment och utveckla

mätmetoder så att de formuler de har arbetat fram för super skal-strukturerna i kvantsystemets fingeravtryck, kan jämföras direkt med experiment. Man hoppas då kunna använda sig utav gaser av till exempel kalciumatomer, kylda till temperaturer bara en miljarddel grad över absoluta nollpunkten.

Genom att bättre förstå kvantmekaniken och dess koppling till den klassiska fysiken, kan vi bättre utforma framtidens nanoteknologiska tillämpningar

inom såväl elektronik som miljö- och medicinteknik.

Även på det pedagogiska planet kan vi lyfta intresset och öka förståelsen av kvantmekaniken genom att studenterna, framtidens kvantingenjörer, får inblick i fältet från flera olika synvinklar. ■



Ny teknik minskar uppvärmning

Världsnaturfonden WWF har nyligen presenterat sin årliga lista med klimatlösningar som kan bidra till att ställa om Sverige till en lågutsläppsekonomi. De så kallade Climate Solver företagen är utvalda för sina möjligheter att förändra världens energiförsörjning.

Bland nyheterna finns soldrivna kylsystem för hus i varma länder, energieffektiv vattenrening med alger och system för att minska halten av koldioxid i atmosfären.

– Om de här lösningarna sprids globalt har de potential att år 2020 minska koldioxidutsläppen med 300 miljoner ton per år. Det är fem gånger mer än Sveriges årliga utsläpp. Men för att lyckas krävs kraftfulla beslut från både politiker och näringsliv, säger Håkan Wirtén, generalsekreterare på Världsnaturfonden WWF.

För att lösningarna ska få verklig effekt efterlyser WWF politiskt mod och entreprenörskap, snabbare tillgång till stöd-pengar, liksom ökad stimulans från privata investeringar under det tidiga kommersialiseringsskedet.

– De senaste åren har flera internationella expertstudier kommit fram till att stödet till utveckling av klimatlösningar måste tredubblas - minst - och öka ännu mer för kommersialiseringssfasen. Förutsättningarna för att få global spridning av svenska klimatinnovationer behöver bli mycket bättre. Åtgärdsprogram och finansiella instrument måste bli mer verklighetsanpassade och ta hänsyn till forskarnas klimatscenarier och till entreprenörernas behov, säger Magnus Emfel, tf klimatchef på WWF i Sverige. Källa: WWF



De fem nya klimatinnovationerna som WWF lyfter fram i år:

• Solkyla för hus i varma länder

ClimateWell AB har utvecklat ett soldrivet system främst för kylning av hus i varma länder, men även till uppvärmning och varmvatten. Företaget är redan etablerat i Spanien, Italien och Turkiet. Vid 25 procent marknadstäckning har företaget en potential att minska 101 miljoner ton/år 2020 globalt.

• Värmepump för villor och fastigheter

OctopusAB har utvecklat värmepumpen Ice-Stick som använder främst luft men också mark för att generera värme. Ice-Stick kan spara mer än 60 procent av energin för uppvärmning och är ett exempel på en mogen teknologi med global potential. Om var femte fastighet på den globala marknaden - villor, mindre fastigheter - installerar värmepumpar så kan utsläppen av

CO₂ reduceras med 29 miljoner ton år 2020. Majoriteten av försäljning sker i Danmark, Polen och Rumänien.

• Vattenrening med alger

Clear Water Energy Nordic AB har utvecklat ett system där alger används för att rena vatten i t ex kommunala vattenreningsverk, vilket leder till stora energibesparingar. Algerna kan dessutom bli biomassa för biogasproduktion. Teknologin kan år 2020 spara 24 miljoner ton CO₂ per år vid tjugo procent marknadstäckning. Företaget är baserat i Stockholm och har gjort sina första installationer där samt i södra Sverige.

• Grön kemi som minskar energi och resursförbrukning

OrganoClick AB jobbar med "grön kemi" som gör kartong och wellpapp starkare och

lättare, vilket bl a minskar materialförbrukningen och utsläpp från transporter. Om 30 procent av all kartong produceras med denna teknologi år 2020 kan detta reducera CO₂-utsläppen med 22 miljoner ton/år. Tekniken kan även appliceras inom andra områden, till exempel textilier och träimpregnering.

• Lagring av koldioxid från bioenergi

Biorecro AB erbjuder system för fånga in och lagra koldioxid från bioenergiproduktion och biobränsle drivna pappersbruk. Bio-Energy Carbon Capture and Storage (BECCS) minskar CO₂-halten i atmosfären i absoluta tal. Om trettio procent av de identifierade biobränsleanläggningarna installerar BECCS till 2020 kommer halten av CO₂ i atmosfären att minska med 100 miljoner ton per år.

Foto: Stebe Morello, WWF