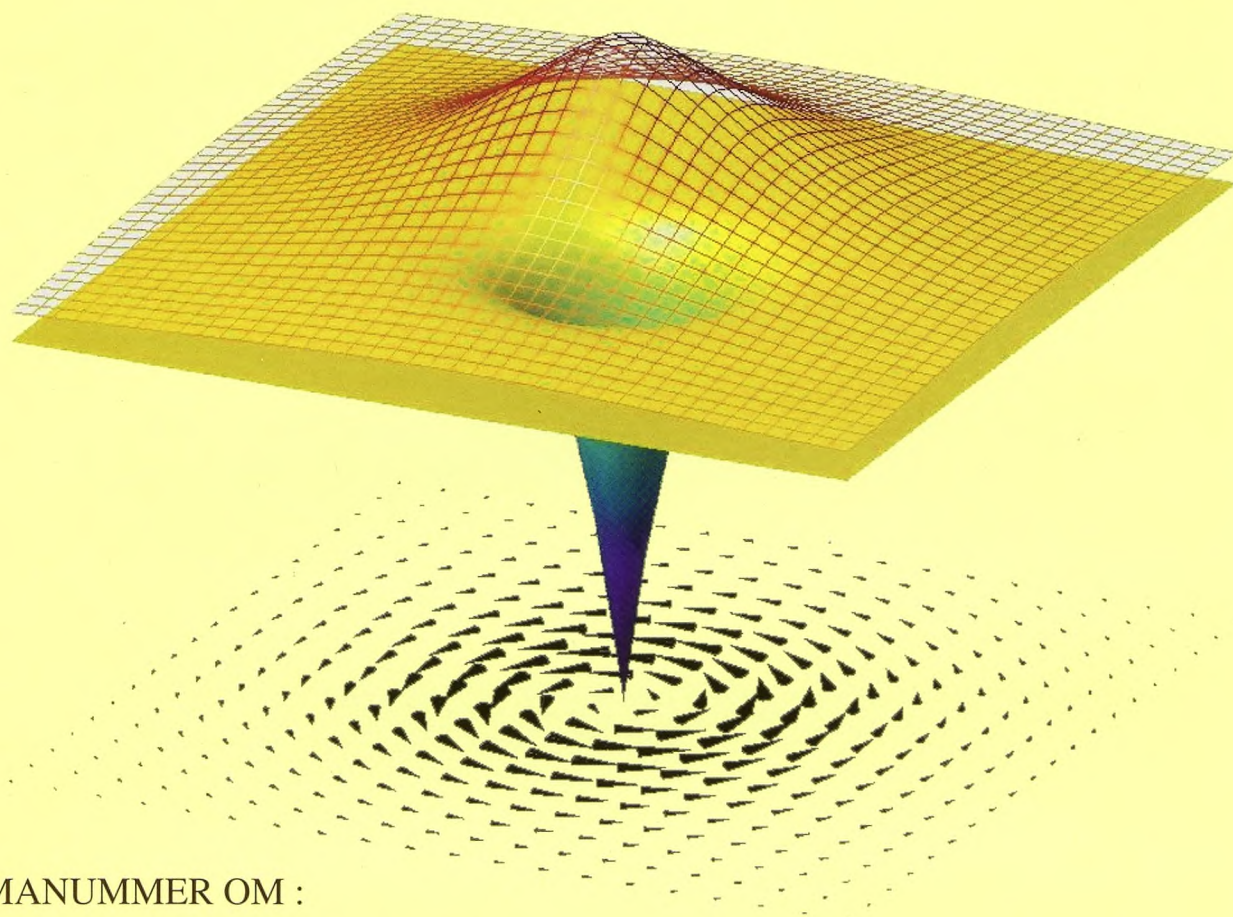




TEMANUMMER OM :

NEUTRONSPREDNING

- NEUTRONREFLEKSIONER
- HØJTEMPERATUR SUPERLEDNING
- KVANTETORNADOER I SUPERLEDERE
- NEUTRONER OG POLYMERNANOTEKNOLOGI
- NEUTRONER UDFRITTER NANOPARTIKLER
- KVANTEMAGNETISME – EN UNDERLIG FISK
- HVAD SKER DER NÅR CEMENT BLANDES MED VAND?
- NEUTRONANALYSE AF “DRUG DELIVERY” PARTIKLER
- BLØDE MATERIALER STUDERET MED NEUTRONSPREDNING
- GÆSTEATOMER FORBEDRER TERMoeLEKTRISKE EGENSKABER

KVANT

Tidsskrift for Fysik og Astronomi

c/o Niels Bohr Institutet
Universitetsparken 5
DK-2100 København Ø

Hjemmeside : www.kvant.dk
E-mail : kvant@kvant.dk

Udgives af

Astronomisk Selskab,
Dansk Fysisk Selskab,
Dansk Geofysisk Forening,
Selskabet for Naturlærers Udbredelse,

Redaktion

Niels Hessel Andersen (gæsterektor)
Afd. for Materialeforskning, RISØ
Michael Cramer Andersen (ansv. red.)
Christianshavns Gymnasium
Camilla Bacher Kiming (AS)
Mærsk Olie & Gas
Jørn Johs. Christiansen (SNU)
Torsten Freltoft, Sophion Bioscience A/S
Mogens Esrom Larsen,
Matematisk Institut, KU
Sven Munk (nyhedsredaktør)
John Rosendal Nielsen (nyhedsredaktør)
Avedøre Gymnasium
Jens Olaf Pepke Pedersen,
Danmarks Rumcenter
Finn Berg Rasmussen, Ørsted Lab, KU
Svend E. Rugh

Abonnementspris : 160 kr/år.

Kvant udkommer 4 gange årligt og er medlemsblad for de udgivende selskaber. Henvendelser vedr. abonnement til forretningsfører Lene Körner tlf. 35 32 07 62 (koerner@kvant.dk).

Annoncepriser

1/1 side: 3000 kr, 1/2 side: 1600 kr
1/4 side: 1000 kr, farvetillæg: 1500 kr
Priserne er excl. moms og for reproklart materiale. Henvendelser om annoncer til redaktøren, tlf. 22 67 26 42.
Oplag: 2800. Tryk: P.J. Schmidt A/S,
Vojens. ISSN 0905-8893



Produktionsplan

Nr. 3-07 udkommer ca. 15. september
Nr. 4-07 udkommer ca. 15. december
Deadline for mindre bidrag og annoncer er ca. en måned før, længere artikler skal modtages to måneder før.

Indhold:

Neutroner – Hvad kan de bruges til?

Niels Hessel Andersen, Bente Lebech, Kim Lefmann og Kell Mortensen 3

Neutroner udfritter nanopartikler

Kim Lefmann, Luise Theil Kuhn, Cathrine Frandsen og Christian R.H. Bahl 9

Hvad sker der når Portland cement blandes med vand?

Axel Nørlund Christensen og Bente Lebech 11

Gæstatomer forbedrer termoelektriske materialer

Mogens Christensen og Bo B. Iversen 13

Hvorfor findes der høj-temperatur superledning?

Kim Lefmann, Niels Hessel Andersen og Per Hedegård 15

KVANT-nyheder

John Rosendal Nielsen og Sven Munk 18

Kvantemagnetisme – en underlig fisk

Niels Bech Christensen og Henrik M. Rønnow 20

CV på WC

Mogens Esrom Larsen 22

Kvantetornadoer i superledere studeret med neutroner

Asger B. Abrahamsen 24

Neutroner og polymerer – Nanoteknologi

Martin E. Vigild og Kell Mortensen 26

Bløde materialer studeret med småvinkelspredning

Kell Mortensen og Jan Skov Pedersen 28

Neutron- og Røntgenanalyse af “drug delivery” partikler

Lise Arleth 30

Neutronrefleksioner

Beate Kløsgen og Kaspar Hewitt Klenø 32

Nedbremsning af neutroner – breddeopgave 27 med kommentar

Jens Højgaard Jensen 34

Aktuelle bøger

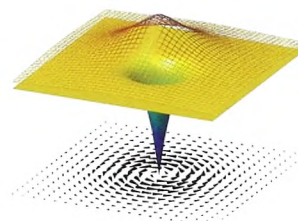
Finn Berg Rasmussen og Michael Cramer Andersen 35

Bohrs samlede værker – komplette

Michael Cramer Andersen Bagsiden

I dette temanummer af KVANT kan man læse om forskellige anvendelser af *neutronspredning* til undersøgelse af både fundamentale egenskaber ved stoffer og egenskaber ved sammensatte stoffer som f.eks. cement eller nanopartikler.

Billedet på forsiden viser “vortexstrømmønster” (pile) af et superlederkondensat, der er undersøgt med neutronspredning – se artiklen af Asger B. Abrahamsen på side 24.



KVANT udsendes gratis til fysiklærerne ved alle landets gymnasier, seminarier og HTX-kurser med velvillig økonomisk støtte fra fysikinstitutterne på Danmarks Tekniske Universitet samt Københavns, Syddansk, Aalborg og Aarhus Universiteter.

Neutroner – Hvad kan de bruges til?

Af Niels Hessel Andersen, Afdelingen for Materialeforskning, Forskningscenter Risø, Danmarks Tekniske Universitet, Bente Lebech, Afdelingen for Materialeforskning, Forskningscenter Risø og Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet, Kim Lefmann, Afdelingen for Materialeforskning, Forskningscenter Risø, Danmarks Tekniske Universitet, og Kell Mortensen, Afdelingen for Polymerforskning, Forskningscenter Risø, Danmarks Tekniske Universitet

Neutroner er neutrale partikler, som sammen med protoner og elektroner udgør atomernes grundlæggende byggestene. Deres egenskaber gør dem velegnede til undersøgelser af faste stoffers strukturelle og fysiske egenskaber. I denne artikel redegøres for neutroners egenskaber til spredningsforsøg, herunder deres fordele og ulemper i forhold til røntgenspredning. Vi giver en historisk gennemgang af den danske og internationale udvikling som oplæg til de efterfølgende artikler i dette nummer af KVANT.

Grundlæggende egenskaber og principper

Opdagelsen af neutronen dateres tilbage til begyndelsen af 1930'erne. Her observerede den tyske fysiker Walther Bothe, at der udsendtes en gennemtrængende stråling, når energirige alfa-partikler fra polonium ramte beryllium. Bothe mente, at der kunne være tale om gammastråling. Kort tid efter viste ægteparret Irene og Frederic Joliot-Curie i Paris, at den udsendte stråling frembragte en meget intens protonstråling, når den ramte materialer med et stort brintindhold. En detaljeret analyse af deres data viste, at der næppe var tale om gammstråling, og i 1932 gennemførte den engelske fysiker James Chadwick en række forsøg, der klart modbeviste hypotesen om gammastråling. Han foreslog, at den ukendte stråling bestod af neutrale partikler med omtrent samme masse som protonen og gav dem derfor navnet neutroner. Neutroner er ikke elementarpartikler. I fri form henfalder neutronen til

en proton under udsendelse af en elektron og en anti-neutrino med en halveringstid på ca. 15 minutter. Den har spin lig med en halv ($S = \frac{1}{2}$) og er derfor en Fermion partikel med et magnetisk moment.

Sammen med protoner og elektroner udgør neutroner de grundlæggende byggestene i atomer. Opdagelsen af neutronen var derfor en afgørende brik i arbejdet med at forstå atomkernernes opbygning, systematikken i det periodiske system, og den inspirerede til identifikation af yderligere subatomare partikler. Den forståelse, som herefter blev opbygget, har været helt afgørende for udviklingen af fissionsbaserede kernekraftværker og for fremtidens forventede fusionsreaktorer. Mindre flatterende er selvfølgelig muligheden for fremstilling af kernevåben. Som vi skal se i dette nummer af KVANT, bidrager neutroner også afgørende til forståelsen af faste og væskeformige stoffers grundlæggende egenskaber.

Boks 1: Illustration af krystalstruktur og reciprokt gitter

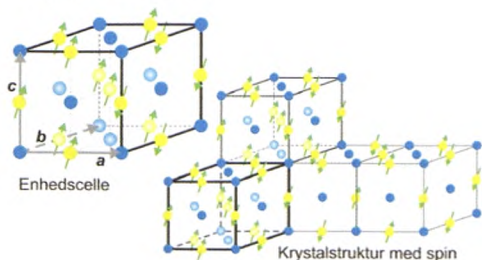
Direkte rum:

Periodisk arrangement af enhedsceller beskrevet med gittervektorer:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}, \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}$$

Enhedscellerne indeholder flere atomer . Nogle af dem kan have et magnetisk moment .

Krystalstruktur:



Krystalstrukturen er en tre dimensional gentagelse af mange enhedsceller.

Reciprokt rum:

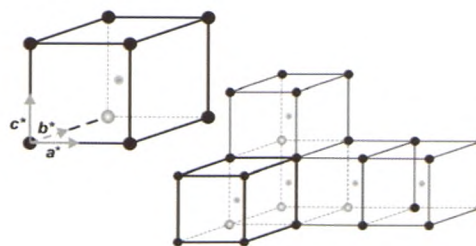
Reciproke gittervektorer defineret ved:

$$\mathbf{a}^* = 2\pi (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) / V_0, \quad \mathbf{b}^* = 2\pi (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) / V_0 \\ \mathbf{c}^* = 2\pi (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) / V_0, \quad V_0 = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$$

Det reciproke gitter defineres ved:

$$\boldsymbol{\tau} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*, \quad h, k, l \in \mathbb{N}.$$

Reciprokt gitter:



De grå og sorte gitterpunkter repræsenterer normaler til krystalplaner (jævnfør Boks 2), og deres størrelse er et mål for intensiteten af spredning.

Boks 2: Grundlæggende principper for neutronspreddning

Illustrationerne er for et to dimensionalt gitter.

Neutronen har bølgekarakter:

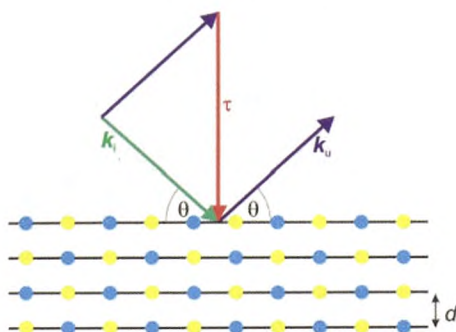
Bølgetalsvektor: $\mathbf{k}$, impuls: $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, bølgelængde: $\lambda = 2\pi/k$ og energi: $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / (2M)$.

Elastisk neutronspreddning (Diffraction):

Bragg's lov: $n\lambda = 2d \cdot \sin(\theta)$.

Bragg's lov i reciprokt rum: $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{q} \equiv \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_u$, $\boldsymbol{\tau}$ = reciprok gittervektor, $k_i = k_u$, $\tau = 2\pi/d$.

Direkte rum:



Uelastisk neutronspreddning:

Energioverførsel, $E(\mathbf{Q})$, til ekscitationen:

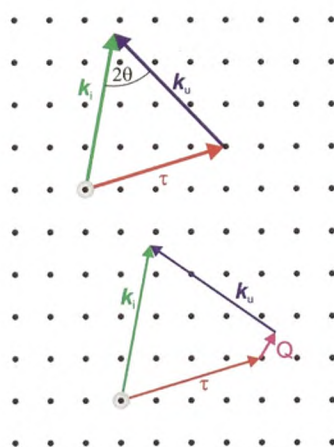
$$E(\mathbf{Q}) = \hbar\omega = \hbar^2(k_i^2 - k_u^2)/(2M).$$

M er neutronmassen og ω er frekvensen af ekscitationen.

Impulsbevarelse: $\mathbf{q} = \boldsymbol{\tau} + \mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_u$.

I krystallinske materialer måles eksitations bølgetalsvektoren $\mathbf{Q}$ altid relativt til reciprokke gittervektorer $\boldsymbol{\tau}$.

Reciprok rum:



Diffraction

Neutroner kan optræde som både partikler og bølger og kan derfor i lighed med røntgenstråler anvendes til diffraktionseksperimenter. Grundlæggende giver sådanne eksperimenter oplysninger om atomare afstande i materialer, fordi de spredte bølger fra et atom i materialet interfererer med bølgerne fra alle de andre atomer. For krystallinske materialer sidder atomerne i et periodisk gitter (se Boks 1). Den stråling, der spredes, når et parallelt strålebundt rammer et sådant periodisk atom-gitter, kommer ud i veldefinerede retninger og med intensiteter, som samlet giver information om atomernes placering. De mulige retninger for den spredte stråling er godt beskrevet ved Bragg's lov, som er illustreret øverst til venstre i Boks 2, hvor de indkommende og spredte neutronbølger enten er defineret ved deres bølgelængde og retning, eller – ækvivalent – ved deres bølgetalsvektorer, der er vektorer i det reciprokke rum (jævnfør Boks 2 øverst til højre). Strukturelle studier er dog ikke begrænset til velordnede krystallinske materialer. Interferens mellem bølger spredt fra for eksempel amorf faste materialer eller proteiner i vandig opløsning giver ligeledes strukturel indsigt.

Hvorfor neutroner?

Sammenlignet med røntgenstrålingen fra konventionelle røntgengeneratorer og ikke mindst fra moderne

synkrotronbaserede kilder, er intensiteten fra alle neutronkilder imidlertid umådelig lille. Dette skyldes dels kravet om en kontrolleret fissions- eller spallationsproces (se Boks 3), dels at neutronerne er neutrale og derfor er vanskelige at styre i bestemte retninger. Neutroner produceret fra radioaktive kilder ved naturlig fission er derfor slet ikke tilstrækkeligt intense til moderne neutronspreddning. Kun forskningsreaktorer, som den nu lukkede DR3 reaktor på Forskningscenter Risø, eller accelerator baserede spallationsanlæg er brugbare kilder. Sådanne store anlæg er meget dyre både at etablere og drive.

På denne baggrund er det åbenlyst at spørge: *Hvorfor anvender man så neutroner til diffraktionsforsøg?* Hertil er der selvfølgelig mange og vigtige årsager. For det første: Neutroner er ladningsneutrale og har derfor stor gennemtrængningsevne i de fleste materialer, bortset fra dem som indeholder neutronabsorberende isotoper. Gennemtrængningsevnen kan være flere centimeter, og derfor kan man studere massive emners egenskaber endog under varierende ydre betingelser f.eks. i kryostatere med magnetfelter, ovne, trykceller og rheometre. En anden vigtig egenskab ved neutronstråling skyldes, at neutronerne vekselvirker med atomkernerne, og spredningstværsnittet varierer på en usystematisk måde gennem det periodiske system, i modsætning til røntgenstråling, hvor spredningstværsnittet afhænger systematisk af atomernes elektronladning.

Derfor kan neutroner se positioner af lette atomer, som f.eks. brint, på baggrund af tunge atomer, noget der er næsten umuligt med røntgenstråling. Da neutron tværsnittet samtidig er afhængig af den valgte isotop, kan kontrastforholdene ændres på en systematisk måde. Dette forhold belyses i flere af artiklerne i dette nummer af KVANT. En tredje betydningsfuld egenskab er knyttet til neutroners spin og dermed til deres magnetiske moment, som via dipolvekselvirkning med elektroners magnetiske moment i atomernes ufyldte skaller giver oplysning om magnetiske strukturer og egenskaber.

Uelastisk neutronspreddning

En fjerde og meget afgørende egenskab ved neutroner sammenlignet med røntgenstråle fotoner er relationen mellem bølgelængde og energi. De elementære ekscitationer i faste stoffer er termiske og har derfor energier i det samme område som neutroner med bølgelængder i Ångstrøm området. Når neutronen veksler med disse ekscitationer i materialet, kan den miste eller vinde energi, der er sammenlignelig med dens egen energi, som ligger i meV området (jævnfør Boks 2 nederst). Derved er det muligt at bestemme relationen mellem energi og impuls af gittersvingninger, såkaldte fononer, og af spinbølger, også kaldet magnoner, som udbreder sig i forskellige retninger i materialet. På samme måde som fononer fortæller om atomernes korrelerede afvigelse fra deres ligevægtsposition, beskriver magnoner, hvorledes den korrelerede afvigelse fra perfekt magnetisk orden udbreder sig gennem materialet. Fra disse målinger

kan man bestemme de mikroskopiske elastiske og magnetiske vekselvirkninger mellem ioner og deres eventuelle magnetiske momenter. At røntgenstråling er svær at bruge til dette formål skyldes, at røntgenfotoner har energier i keV området. Energioverførsler i meV området kan derfor vanskeligt opløses i praksis.

Neutronkilder, spektrometre og detektorer

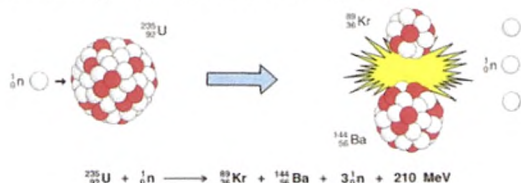
Som omtalt ovenfor foretages neutronspreddning kun ved store anlæg, hvoraf der findes to typer (se Boks 3):

1. Forskningsreaktorer: neutronerne produceres ved en kontrolleret fissionsproces baseret på ^{235}U
2. Såkaldte spallationsanlæg: tunge grundstoffer, f.eks. bly eller kviksølv, bombarderes med pulser af protoner i MeV området, som sønderdeler atomkernen under udsendelse af neutroner.

For at være praktisk anvendelige til spredningsforsøg skal neutronerne have energier i meV området. Da neutronerne udelukkende produceres via kernereaktioner og derfor bliver udsendt med energier i MeV området, skal de nedbremses (modereres). Nu til dags anvendes primært vand eller kold brintgas under tryk (ca. 15 bar og 40 K) til at producere henholdsvis termiske og kolde neutroner (jævnfør breddeopgave 27, side 34). Modereres neutronerne fuldstændigt vil de blive udsendt med energier beskrevet ved en Maxwell fordeling svarende til moderatorens temperatur. Det vil sige med maksimum intensitet for bølgelængder omkring 1 Å og 2,5 Å for henholdsvis termiske og kolde neutroner.

Boks 3: Neutronkilder

Forskningsreaktor: Fissions proces

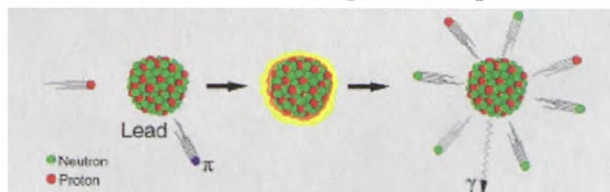


ILL i Grenoble: Verdens mest intense reaktorbaserede neutronkilde



Ringen i baggrunden er ESRF synkrotronen

Accelerator baseret kilde: Spallations proces



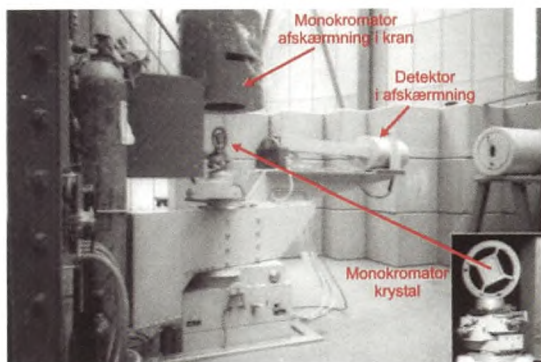
SNS under opbygning ved Oak Ridge National Laboratory i USA



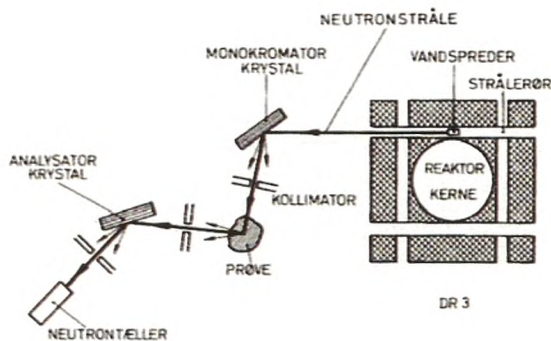
SNS bliver verdens mest intense spallations neutronkilde

Boks 4: Fortid

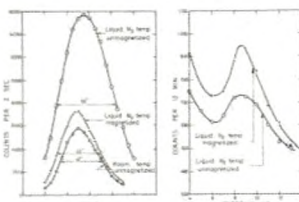
En-akse spektrometer ved DR2 anno 1959



Skematisk opbygning af et tre-akse neutron spektrometer og strålerør i DR3

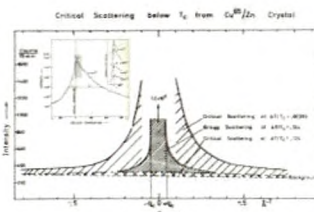


Nogle tidlige resultater fra DR3

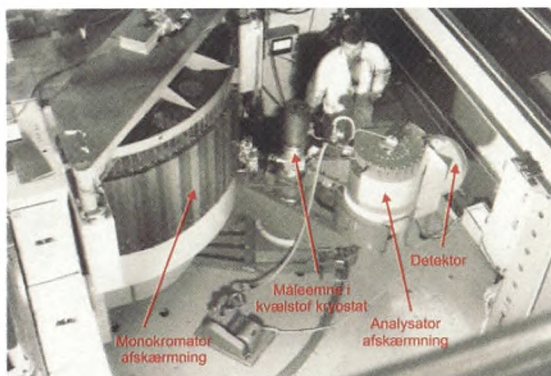


Den første magnon i et sjældent jordartsmetal blev målt på Risø [2].

Skaleringslove og kritisk spredning i beta messing [3].



Tre-akse spektrometer ved DR3 anno 1969



Reaktor- og spallationsbaserede anlæg har hver deres fordele. Forskningsreaktorer udsender en konstant strøm af neutroner, hvorfra en bestemt bølgelængde sædvanligvis udvælges ved Bragg diffraktion i en monokromator krystal. I Boks 4 nederst er vist en principskitse og et gammelt foto af et såkaldt tre-akse spektrometer. Analysator krystallen kan anvendes til at udvælge neutroner med samme energi som valgt af monokromatoren, dvs. til elastisk spredning (diffraktion) eller med en anden energi til uelastisk spredning. Fotoet til venstre i Boks 5 viser et moderne tre-akse spektrometer, RITA-2, som er udviklet på Risø, men overført til neutronkilden SINQ ved Paul Scherrer Institutet (PSI) i Svejts. Risø har også overført små-vinkel neutronspretnings instrumentet, SANS-2 (Boks 5 til højre). Da spallationkilderne er pulsede, kan man ved hjælp af komplicerede chopper- og detektor-systemer anvende tidsstrukturen til at bestemme hastighederne af de udsendte og spredte neutroner. På denne måde kan man udnytte mange af spallationskildernes neutroner og således opnå en høj intensitet og informationsmængde. Forskningsreaktorer har dog også fordele, specielt til forsøg der benytter lavenergetiske neutroner, som f.eks. SANS.

Da neutroner er neutrale kan de ikke detekteres direkte med elektronik. Sædvanligvis anvendes derfor detektorer, der er baseret på indfangning af neutroner i atomkerner, f.eks. ^3He , der efterfølgende udsender ladninger, som kan detekteres på normal vis (Geiger Müller detektor).

Danmarks internationale placering

Danmark har været centralt placeret i udvikling og anvendelse af neutronspretnings indenfor fysik, kemi og materialeforskning gennem aktiviteter omkring Risø's forskningsreaktor DR3. Reaktoren blev oprindeligt indkøbt til studier af reaktorteknologi med henblik på udvikling af kernekraft. Selv om DR3 var en middelfluxe reaktor med en termisk effekt på 10 MW (ILL reaktoren i Grenoble er på 58 MW) viste den sig hurtigt at være yderst konkurrencedygtig til neutronspretningsforsøg. Aktiviteterne startede kort tid efter Risø's oprettelse i slutningen af 1950'erne, da forskere på Risø under ledelse af den fremsynede kerneforsker Otto Kofoed-Hansen erkendte, at et guldæble, DR3 reaktoren, var landet i deres hænder. På det tidspunkt var dansk faststoffysik endnu i sin vorden, mens kernefysik var en

veletableret og livskraftig naturvidenskabelig aktivitet. Derfor blev et af de første eksperimenter, der udnyttede neutronstrålerne fra DR3 reaktoren, da også "Neutronlevetidsforsøget". Denne dristige satsning for at måle en fundamental fysisk konstant blev udført i samarbejde med amerikanske forskere. Eksperimentet strakte sig over mere end ti år og fastslog en neutron halveringstid på ca. 11 minutter [1, side 197].

Omtrent samtidigt begyndte en lille gruppe forskere og teknikere at bygge et én-akse instrument kaldet "krystalspektrometer" (se Boks 4), der skulle bruges til at måle materials evne til at indfange neutroner. Første mål var at bestemme neutrontværsnittet for isotopen ^3He , der skulle bruges som tælle gas i detektoren til "Neutronlevetidsforsøget". Konstruktionen startede helt fra bunden, og alle komponenter var hjemmelavede. De første kvartalsrapporter fortæller, hvordan man omhyggeligt checkede præcision og reproducerbarhed af aksebevægelse og andet. Dette var begyndelsen til det, der senere blev et af kendetegnene for Risø's neutronspretningsforskning: konstruktion, videreudvikling og fornyelse af avanceret målrettet instrumentering.

1960'erne og 1970'erne var en blomstringstid for de faststoffysiske aktiviteter omkring DR3. Nye idéer til eksperimenter og instrumenter blev fostret og modnet i et livligt samspil mellem danske og udenlandske forskere. Et stort netværk af verdenskendte forskere kom ofte og gentagne gange til Risø og var gennem undervisning og inspiration med til at sætte dansk faststoffysik på verdenskortet. Den første "bibel" om teoretisk neutronspretning [4] blev således færdiggjort under et tre måneders gæstophold på Risø. Blandt de væsentligste forskningsresultater, der kan knyttes til pioneraktiviteterne ved DR3, skal her nævnes to (se [1, p. 470] og Boks 4). Det ene var detaljerede undersøgelser af spinbølger og magnetisk orden i sjældne jordartsmetaller. Disse har givet betydningsfuld viden om, hvorfor metaller og legeringer i magnetisk henseende opfører sig på så mange forskellige måder. Denne viden har dannet grundlaget for udviklingen af de stærkeste kendte permanente magneter, som indeholder den sjældne jordart neodymium i en legering med jern og bor. Det andet var banebrydende og meget præcise eksperimentelle studier af faseovergange og kritiske fænomener i faste stoffer. De udgør en væsentlig del af fundamentet for udviklingen af renormalisations gruppeteori og var med til at berede vejen for K. Wilsons Nobelpris i 1982. Disse to forskningsfelter blev nærmest synonyme med Risø's neutronspretningsaktiviteter langt op i 1980'erne.

En væsentlig årsag til den positive udvikling af de faststoffysiske aktiviteter omkring DR3 i de første år var naturligvis gode forskningsbudgetter, men succesen var også betinget af et målrettet samarbejde mellem eksperimentale fysikere, teoretikere og instrumentbyggere, som udnyttede Risø's velfungerende infrastruktur til at opnå de bedst tænkelige resultater. Risø's pionerindsats markeredes f.eks. ved, at man som de

første forsynede neutronspretningsinstrumenter med individuelle computere (PDP-8, en 8 kbyte maskine) på et tidspunkt, hvor andre valgte centrale computere med de ulemper, som datidens hyppige computernedbrud medførte. Risø var også blandt de første, der optimerede neutronfluksen på måleemnet ved at installere fokuserende grafit monokromatorer på alle relevante instrumenter. Et år brugte man næsten hele budgettet til at gennemføre dette. Den kolde neutronkilde, der kom i drift i 1975 og blev fornyet i 1995, spillede også en vigtig rolle i arbejdet med at gøre DR3 konkurrencedygtig med højfluks reaktorerne på Brookhaven, Oak Ridge og Grenoble.

I slutningen af 1970'erne kom der fokus på brugen af synkrotronstråling til røntgenspretning. Disse nye kraftige røntgenkilder gav muligheder for at udforske ny fysik og bidrog til at udvikle en ny generation af instrumenter til både røntgen- og neutronspretning. Udviklingen af avanceret neutron instrumentering blev baseret dels på Risø's tekniske ekspertise, dels på metoder til at simulere hvorledes neutroner opfører sig i et spektrometer fra kilde til detektor. Simuleringsmetoden, som er udviklet på Risø i 1997, kaldes McStas og anvendes således til at gennemføre virtuelle eksperimenter. McStas er fortsat verdens førende på området og anvendes i stadig stigende grad til design af ny instrumentering og fortolkning af målte data.

I løbet af 1980'erne udviklede neutronspretningsaktiviteterne ved DR3 sig hovedsagelig som samarbejdsprojekter indenfor basal faststoffysik, men også områder indenfor materialeforskning, såsom undersøgelser af tekstur i metaller og in-situ studier af indre spændinger, blev perfektioneret. Aktiviteterne indenfor basal faststoffysik var centreret i Neutronhuset, som er placeret uden for reaktorhallen og blev forsynet med neutroner fra Risø's kolde neutronkilde gennem en neutronkanal med avanceret neutronoptik. Herved sikrede man en lav baggrund for spredningsforsøgene og øgede dermed mulighederne for at observere svage signaler. I reaktorhallen og Neutronhuset var installeret tre tre-aksesspektrometre, tre to-aksesspektrometre og SANS, som var aktive indtil den endelige nedlukning af DR3 den 28. september 2000. En af aktiviteterne i Neutronhuset var det finsk-tysk-danske samarbejdsprojekt om at bestemme den kernemagnetiske orden i kobber under 50 nano Kelvin. Det var et ambitiøst projekt, der involverede eksperter i at frembringe ultralave temperaturer samt dygtige neutronspretnings og teoretiske fysikere. Det var samtidigt hårdt arbejde med mange timers forberedelse og korte perioder til dataindsamling, men eksperimentet blev en succes, og resultaterne er internationalt anerkendte. En anden aktivitet i Neutronhuset var et svensk-dansk samarbejdsprojekt, der resulterede i opbygningen af Risø's småvinkelspretnings instrument (SANS-2 i Boks 5), der i tidens løb har været brugt effektivt og innovativt med banebrydende resultater indenfor såvel neutron optik som forskningsfelter rækkende fra magnetisme og superledning til polymerer og biologi.

Boks 5: Nutid

RITA-2 spektrometret med 15 tesla magnet



SANS-2 instrumentet



De dansk byggede spektrometre ved SINQ neutronspallationskilden på PSI i Svejts. Nogle nye resultater fra disse spektrometre er beskrevet i de efterfølgende artikler

Nutid

Danmark har fastholdt kompetencen inden for neutronspredning, og aktiviteterne er udbredte både geografisk og emnemæssigt, som det fremgår af de efterfølgende specialartikler. I foreningen af danske neutronsprede, DANSSK, er der nu 145 registrerede medlemmer, hvoraf ca. 70 deltager i neutronspretningsforsøg ved en række udenlandske faciliteter. Som omtalt har Risø overført de to avancerede spektrometre, RITA-2 og SANS-2, til PSI og har på dette grundlag opnået en kontrakt om prioriteret adgang i op til 20 uger om året på hvert af disse instrumenter. Denne enestående mulighed er åben for alle danske neutronsprede. Da Forskningsrådet for Natur og Univers dækker rejse og opholdsudgifter gennem instrumentcentret DANSCATT har danske neutronsprede fortsat gode muligheder for at anvende denne betydningsfulde teknik til deres forskning.

I de seneste årtier er en række ældre neutronbaserede anlæg blevet nedlagt, men nye er også undervejs eller sat i funktion. Som omtalt i Boks 3 er ILL i Grenoble den mest intense reaktorbaserede neutronkilde. En ny højfluks forskningsreaktor, FRM-II, er for nylig opstartet på Münchens Tekniske Universitet i Tyskland. Den termiske fluks af neutroner fra FRM-II er omkring halvdelen af ILL's, den kolde fluks lidt bedre, men da mange instrumenter og neutronoptikken er nyere, er der adskillige steder mere fluks for brugerne. Australien (ANSTO) og Kina (CARR) bidrager også med nye reaktor baserede neutronkilder. Verdens kraftigste spallationskilde er indtil videre ISIS i England, men næste generation spallationskilder: Spallation Neutron Source (SNS) ved Oak Ridge i USA og JPARC nær Tokyo i Japan er under indkøring og vil give en afgørende forøgelse af fluksen ved en faktor 5-10 i forhold til ISIS. SNS laver allerede nu eksperimenter med reduceret effekt og lav frekvens og ventes at modtage brugere i løbet af efteråret 2008. Her deltager Kemisk Institut ved Aarhus Universitet i opbygningen af et diffraktometer.

JPARC planlægger at starte eksperimenter i 2009-2010.

I Europa er der gennemført et omfattende udredningsarbejde med henblik på at etablere verdens mest intense spallationskilde, European Spallation Source (ESS), som er baseret på lange pulser og effektivt vil være en størrelsesorden bedre end SNS. Det tekniske udredningsarbejde, som blev afsluttet i 2003, har været ledet af Kurt Clausen fra Danmark. Beslutningen om at bygge ESS er endnu ikke taget, men der er en hastig udvikling. ESS er prioriteret af EU's forum for forskningsinfrastruktur, ESFRI, og der er stærke initiativer i Spanien, Ungarn og Sverige, som sigter mod at opføre ESS. I Sverige arbejdes mod en placering i Lund. Den svenske regering har netop bevilget 3,4 milliarder svenske kroner til projektet, som forventes at koste ca. det tredobbelte. Opførelsen af ESS vil skabe helt nye muligheder for neutronspredning til materialeforskning. Fra en dansk synsvinkel vil en placering i Lund selvfølgelig være mest attraktiv, men det vigtigste er, at ESS bliver bygget.

Litteratur

- [1] Til samfundets tarv – Forskningscenter Risø's Historie. H. Nielsen, red., K. Nielsen, F. Petersen, H.S. Jensen. Risø 1998. ISBN 87-550-2380-0.
- [2] H. Bjerrum Møller, P.A. Mogensen (Lindgård), J.C. Gylden Houmann og A. Kowalska, Symposium on Inelastic Scattering of Neutrons by Condensed Systems BNL940 (C-45) 1965; H. Bjerrum Møller, J.C. Gylden Houmann og A.R. Mackintosh, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 312 (1967).
- [3] J. Als-Nielsen, *Phys. Rev.* **185**, 664 (1969). *Risø Report No. 196*, Dr. Phil. afhandling, 81 pp.
- [4] W. Marshall og S. W. Lovesey, *Theory of Thermal Neutron Scattering*. Oxford at the Clarendon Press (1971), 599 pp.

Forfatterne til denne indledningsartikel er præsenteret under specialartiklerne.

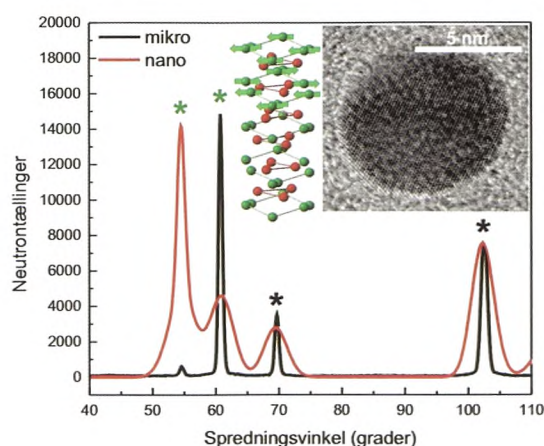
Neutroner udfritter nanopartikler

Af Kim Lefmann, Afd. for Materialeforskning, Risø, DTU, Luise Theil Kuhn, Afd. for Brændselsceller og Faststofkemi, Risø, DTU, Cathrine Frandsen, Institut for Fysik, DTU og Christian R.H. Bahl, Afd. for Brændselsceller og Faststofkemi, Risø, DTU

Mange forskere har i de seneste år undersøgt egenskaber af materialer på nanometer-skala med forskellige eksperimentelle teknikker. I denne artikel vil vi præsentere nogle af de svar vi har fået ved at "spørge" magnetiske nanopartikler om deres egenskaber med neutronspreddning.

Hvor små er I?

Som beskrevet i indledningsartiklen, vil spredning af neutroner med en given bølgelængde fra et ideelt krystalgitter foregå i veldefinerede vinkler. I en nanopartikel er gitteret *ikke* uendeligt stort, og derfor vil man observere en udbredelse i spredningsvinkel. Denne forbreddning er omvendt proportional med partiklernes størrelse. Figur 1 viser data optaget med neutroddiffraktion på nanopartikler af jernoxiden hematit ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$). I forhold til data fra mikrometer-store hematitpartikler kan man tydeligt se forbreddningen, der svarer til en gennemsnitlig partikelstørrelse på ca. 7 nm. Denne værdi bekræftes af transmissions elektronmikroskopi (TEM) billeder.



Figur 1. Neutroddiffraktionsdata (ved -253°C) for mikro- og nanometer størrelse hematit partikler. TEM billedet øverst t.h. viser en perfekt krystallinsk hematit-nanopartikel på en kulstoffilm. I modellen øverst vises, hvordan ilt- (rød) og jernionerne (grøn) er arrangeret i krystallen. Pilene symboliserer de magnetiske momenter.

Hvordan ser I ud indeni?

Positionen og intensiteten (højden) af toppene i figur 1 er bestemt af krystallens periodiske struktur; dvs. placeringen af de enkelte atomer og afstanden imellem dem.

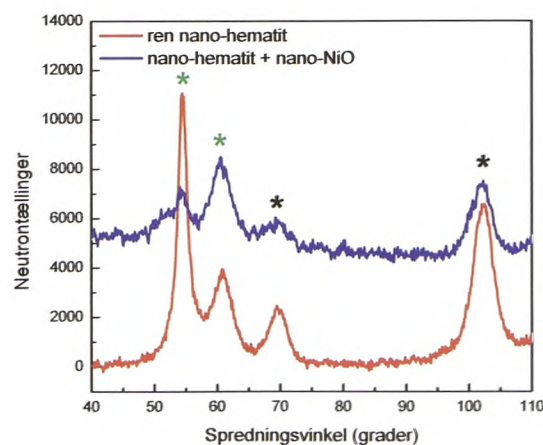
De diffraktionstoppe, der er markeret med grønne stjerner (*), stammer fra magnetismen af Fe^{3+} ionerne i hematit. Da disse toppe har en anden position end de sorte (*), er den magnetiske struktur forskellig fra krystallens. Halvdelen af de magnetiske momenter peger i én retning, halvdelen i den modsatte retning. Dette kaldes *antiferromagnetisme*, og neutronspreddning er den vigtigste teknik til studiet af dette. På modellen er

med pile vist, hvordan ionernes magnetiske momenter er orienteret.

Intensiteten af de magnetiske toppe er bl.a. bestemt af de magnetiske mometers retning. I store (f.eks. mikrometer) partikler af hematit sker et kraftigt skift i intensiteterne af de med grønne stjerner (*) markerede toppe ved -10°C , den såkaldte Morin overgangstemperatur, fordi de magnetiske momenter drejer sig 90° . I nanopartikler af hematit observerer man typisk ingen Morin overgang. Dette kan ses i figur 1, hvor intensitetsforholdet mellem de to magnetiske toppe er helt forskellig for de to typer partikler.

Hvad sker der, når I er sammen?

Nanopartikler har relativt set en meget stor overflade. F.eks. har 1 cm^3 prøve af runde partikler med diameteren 10 nm en overflade på 400 m^2 – eller en halv håndboldbane. De magnetiske egenskaber kan ændres via overfladen, f.eks. ved at nabopartikler vekselvirker via overfladeatomerne.

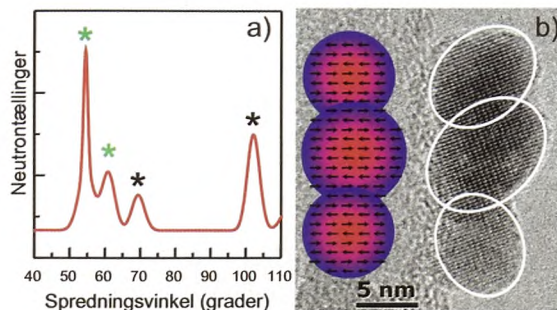


Figur 2. Nano-NiO forårsager magnetisk (Morin) overgang i nano-hematit.

Figur 2 viser lav-temperatur diffraktionsdata fra en prøve af ren nano-hematit, og fra nano-hematit blandet med antiferromagnetisk nano-NiO. I modsætning til den rene prøve kan man ud fra ændringen i linieintensiteten se Morin overgang i den blandede prøve [1]. Vi ved ikke præcist, hvordan NiO partiklerne forårsager denne overgang i hematitpartiklerne, men vi formoder, at det har at gøre med magnetisk vekselvirkning i overfladelaget mellem hematit og NiO partiklerne.

En anden effekt af vekselvirkning mellem partikler ses i rene prøver af hematit nanopartikler. Figur 3

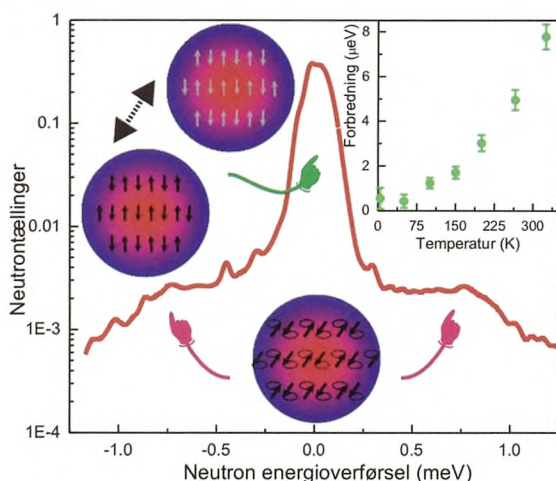
viser, at den ene magnetiske Bragg top (ved laveste vinkel) er markant smallere end de andre. Dette viser, at partiklernes "magnetiske størrelse" i en bestemt krystalretning er op til 3 gange større end partiklernes egen størrelse. Elektronmikroskopi-billeder viser netop sammensatte partikler. Dette tolker vi som, at den magnetiske kobling mellem partiklerne sørger for at ensrette den magnetiske struktur langs kæden af partikler [1].



Figur 3. Magnetisk korrelation ml. hematit nanopartikler: a) neutrondata med smal Bragg top for magnetisk orden langs kæden, b) TEM billede og model af magnetisk ordnet kæde.

Hvad laver I, når det bliver varmt?

I hematit er de magnetiske kræfter mellem ionerne meget kraftige. Derfor er strukturen antiferromagnetisk indtil meget høje temperaturer (680 °C). Men for nanopartikler, selv ved temperaturer få grader over det absolutte nulpunkt (−273,15 °C), vil den termiske energi være nok til at få sat hele den antiferromagnetiske struktur i bevægelse. De magnetiske momenter vil præcessere omkring deres foretrukne retning, som illustreret nederst på figur 4.



Figur 4. Uelastisk neutronspreddning ved −83 °C, pink hænder markerer signalet fra de kollektive magnetiske excitationer, grøn hånd markerer den superparamagnetiske forbreddning af en elastisk diffraktionstop (vinkel=54°, se figur 1). Indsatsen viser den superparamagnetiske forbreddning ved forskellige temperaturer.

I nanopartikler kaldes denne effekt *kollektive magnetiske excitationer*. Dette blev både opdaget og direkte

eftervist med neutronspreddning i Danmark [2]. Typiske neutrondata er vist på figur 4; præcessionerne kan ses som de to skuldre på siden af den kraftige centrale top. Herfra kan man bestemme både amplitude og frekvens af præcessionerne.

Den termiske energi kan også forårsage, at de magnetiske momenter spontant skifter mellem de foretrukne retninger, som illustreret øverst på figur 4. Disse momentvendinger vil ske helt tilfældigt. Effekten kaldes *superparamagnetisk relaxsation* og kan ses med neutroner som en forbreddning af den centrale diffraktionstop. Temperaturvariationen af forbreddningen er vist i figur 4. Den stemmer fint overens med Arrhenius-loven for termisk aktivering.

Hvorfor studere magnetiske nanopartikler?

Nanoverdenen er interessant, fordi man her kan udforske overgangen fra den atomare verden, hvor kvantemekanikken råder, til "makroverdenen", hvor den klassiske fysik oftest er tilstrækkelig. I nanoverdenen kan man også opleve helt nye fænomener, som her hvor termiske fluktuationer spiller en kraftig rolle langt under den magnetiske ordningstemperatur.

Magnetiske nanopartikler har en række anvendelser, f.eks. magnetisk datalagring på harddiske, hvor momenternes to foretrukne retninger repræsenterer binær information ("0" og "1"). Her må superparamagnetisme undgås, for den kan få partiklerne til at "glemme" den lagrede information. Magnetiske nanopartikler har også forskellige mulige anvendelser som katalyse, nye magnetiske kompositmaterialer, spinpolariseret elektronik og styring af medicinsk dosering og kræftbehandling. Magnetiske nanopartikler findes naturligt i jord, anvendes som kompasorgan i visse dyr og bakterier, og er muligvis af betydning for forekomsten af magnetiske områder på overfladen af planeten Mars.

Der er derfor mange grunde til at stille spørgsmål om de basale egenskaber af magnetiske nanopartikler, og neutronspreddning er blandt de relevante teknikker til at opnå svarene.

Litteratur

- [1] C. Frandsen, ph.d. afhandling DTU 2004, www.fysik.dtu.dk/~frac/thesis
- [2] M. F. Hansen et al., Phys. Rev. Lett. **79**, 4910 (1997)



Forfatterne har deltaget i et større dansk samarbejde om nanomagnetisme, finansieret af STVF. Fra venstre: Cathrine Frandsen arbejder med selvorganiserede magnetiske materialer. Luise Theil Kuhn forsker i strukturelle og magnetiske egenskaber af materialer. Kim Lefmann forsker i magnetiske og superledende materialer. Christian Bahl udvikler en prototype til magnetisk køling.

Hvad sker der når Portland cement blandes med vand?

Af Axel Nørlund Christensen, Crystal Chemistry, Højksvej 7, Århus V og Bente Lebech, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet

Portland cement bruges i vid udstrækning i bygningsindustrien. Cementers egenskaber er stærkt afhængige af detaljer i deres sammensætning og reaktion med vand. I denne artikel beskrives, hvordan neutronspreddning er blevet brugt til at belyse nogle problemer af stor teknisk relevans for et produkt, der produceres og benyttes i praksis. Undersøgelserne viser, hvorledes man, ved at kombinere neutron- og røntgen diffraktion og anvende substitution af brint med deuterium, kan bestemme atomernes positioner i dette komplicerede materiale.

Hvad er Portland cement?

Portland cement blev fremstillet industrielt første gang i 1824 og er opkaldt efter den engelske Portlandsten. Det fremstilles af råmaterialer som limsten, kridt, strandskaller, sand, skifer og forskellige lermaterialer. Råmaterialerne pulveriseres og opvarmes til 1500 °C, hvorved der dannes cementklinker, der formales sammen med gips til et finkornet pulver – Portland cement. Portland cement indeholder grundstofferne Ca, Al, Si og Fe, der optræder i flere krystallinske faser hvoraf de vigtigste er di- og tri-calcium silikat (Ca_2SiO_4 , Ca_3SiO_5), tri-calcium aluminat ($\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$) og en tetra-calcium forbindelse ($\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$). Der findes andre typer cement, som anvendes til specialopgaver, eksempelvis til sikring af rør i olieindvindingen, men Portland cement er det produkt, der anvendes i bygningsindustrien.

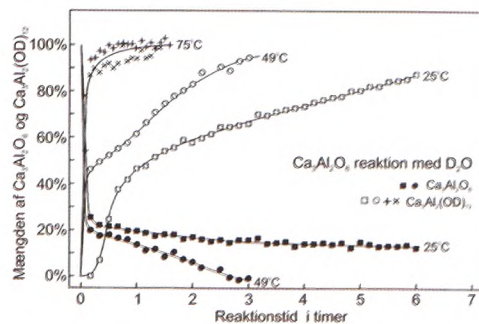
Portland cement reagerer kemisk med vand

Når Portland cement blandes med vand reagerer de krystallinske faser med vandet og danner nye krystallinske og amorf faser. Ved disse processer ændres cementmørtelens eller betonblandings sammensætning, indtil den til sidst størkner. De forskellige komponenter i Portland cement reagerer forskelligt med vand. Derfor er det vigtigt at kende den nøjagtige sammensætning af den aktuelle Portland cement. Oprindeligt blev sammensætningen af Portland cement bestemt ved kvantitativ våd-kemisk analyse på grundstofferne calcium, aluminium, silicium, jern og svovl. Især analysen af svovl i form af sulfatanalyse var vigtig, da mængden af gips bestemmer hvor hurtigt betonblandingen størkner. For nogle tiår siden begyndte man at skifte teknik og benytter nu optisk mikroskopi og røntgendiffraktion til identifikation af faser. Røntgendiffraktionsteknikken er nu så veludviklet, at man laver kvantitativ analyse med *in situ* røntgendiffraktion af cementklinker direkte under fabrikationen, når klinkerne forlader cementovnen.

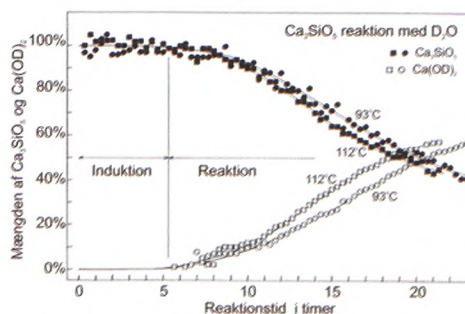
Et pionerarbejde på Portland cement

Interessen for at studere Portland cement startede i 1982 med ønsket om at studere en kemisk proces ved hjælp af *in situ* pulverdiffraktion. Dengang var de eksperimentelle muligheder ikke så veludviklede som nu. Intensitet og instrumentel opløsning satte visse grænser for valg af proces. Målet blev at observere kemiske processer og omdannelse af de krystallinske

faser i blandinger af cement og vand. For at opnå dette måtte man vælge et pulverdiffraktometer med stor følsomhed og en cement, hvori processen forløb tilstrækkeligt langsomt til at man kunne måle 10-50 diffraktions-mønstre ("snapshots") indenfor få timer. Man kunne herved få en film af de kemiske processer. Det viste sig, at Portland cementkomponenter var et godt materialevalg, og at de to mest velegnede diffraktometre var det danske byggede energi-dispersive røntgendiffraktometer ved synkrotronen ved HASY-LAB i Hamburg og neutrontdiffraktometeret D1B ved Laue-Langevin Institutet i Grenoble.



Figur 1. Når Portland cement komponenten $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ reagerer med vand sker det næsten øjeblikkeligt selv ved 25 °C. Processen går endnu hurtigere ved højere temperaturer. Figuren summerer resultatet af *in situ* neutrontdiffraktions undersøgelse og viser hvordan mængden af $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ straks forsvinder, mens mængden af $\text{Ca}_3\text{Al}_2(\text{OD})_6$ øges.



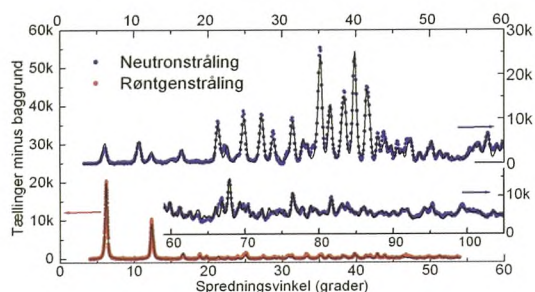
Figur 2. Når Portland cement komponenten Ca_3SiO_5 reagerer med vand sker det langsomt. Figuren summerer resultatet af *in situ* neutrontdiffraktions målinger. Efter cirka syv timer aftager mængden af Ca_3SiO_5 lineært samtidig med at mængden af $\text{Ca}(\text{OD})_2$ øges. Omdannelsen er næsten uafhængig af temperaturen, og der er en induktionstid på ca. 5 timer, før reaktionen med vand begynder.

Valget faldt på D1B fordi de problemer, der er med at håndtere prøveemner, der skal køles eller varmes

under målingen, allerede var løst. Da den instrumentelle opløsning af DIB var begrænset, var det imidlertid for vanskeligt at lave en multi-komponent faseanalyse fra en naturlig blanding af Portland cement og vand. I stedet blev analysen lavet på basis af diffraktionsdata fra rene krystallinske faser af de kendte komponenter i Portland cement. Resultaterne, som blev udledt fra de målte diffraktionsdata på DIB, er vist på figur 1 og 2. Diffraktionsmønstrene var dårligt opløst, men det er de allerførste publicerede resultater af *in situ* undersøgelser af de kemiske processer i Portland cement faser [1].

En hurtigt og en langsomt reagerende fase

Reaktionen af $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ med vand er meget hurtigere end reaktionen af Ca_3SiO_5 med vand. Under reaktionen af Ca_3SiO_5 dannes der en calcium silikat gel samtidigt med krystallinsk $\text{Ca}(\text{OH})_2$. Processen kan derfor følges ved at monitere, hvordan mængden af $\text{Ca}(\text{OH})_2$ øges. Resultatet er vist på figur 2. Hvis figur 1 og 2 sammenlignes, er det åbenbart, at Ca_3SiO_5 reager meget langsommere med vand end $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ [1] samt at reaktionen ikke er nær så temperaturfølsom.



Figur 3. Diffraktionsdata [2] for Portland cement med den kemiske sammensætning $\text{CAD}_{8,42}$ målt med neutronstråling (●) og røntgenstråling (●). De fuldt optrukne sorte kurver viser resultaterne af modelberegninger hvor atomerne er placeret som vist på figur 4.

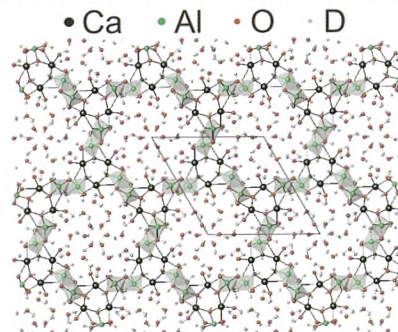
Krystalstrukturen af CaAl_2O_4 iblandet vand

Forbindelsen CAH_{10} er en komponent i beton lavet af Portland cement til byggeri i vinterhalvåret (temperaturer op til 10°C). Forbindelsen er siden 1933 blevet angivet med sammensætningen $\text{CaAl}_2\text{O}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$. Denne fase er metastabil og omdannes under opvarmning til $\text{Ca}_3\text{Al}_2(\text{OH})_{12}$ og gibbsit. Da omdannelsen er koblet til store volumenændringer, kan der ske fatale ændringer i styrken af beton der indeholder denne fase, ændringer der kan føre til sammenstyrtning af bygninger. Derfor er det vigtigt at kende denne fases krystalstruktur.

Den eneste model af krystalstrukturen for CAH_{10} har hidtil været baseret på ukomplette røntgendiffraktionsdata, hvor man ikke tog hensyn til den information, der ligger i den første og mest intense top i diffraktionsdataene (se figur 3 nederst (●)). I løbet af de sidste par år har vi arbejdet på en ny detaljeret strukturanalyse af CAH_{10} baseret på neutrontdiffraktionsdata [2] og *ab initio* strukturmodellering.

Til det formål har vi anvendt isotopsubstitution af de to brint isotoper, hydrogen (H) og deuterium (D), som bidrager forskelligt til et neutrontdiffraktionsmønster.

Den kohærente spredning, som giver diffraktions-toppene, er kraftigere fra deuterium end fra hydrogen, og de er 180 grader ude af fase. Til gengæld er den inkohærente spredning, der giver baggrund, stærkere fra hydrogen. Derfor vil prøveemner med deuterium give neutrontdiffraktionsmønstre med meget bedre signal-støj forhold end tilsvarende prøveemner med hydrogen. Ydermere betyder faseforskellen, at man kan skrue op og ned for bidraget fra brint i et diffraktionsmønster ved at blande de to brint isotoper passende og stadig beholde informationen om de andre atomer i materialet.



Figur 4. Krystalstrukturen af Portland cement med den kemiske sammensætning $\text{CAD}_{8,42}$. Det er en projektion hvor man kigger ned langs den heksagonale akse der er vinkelret på papiret. Der er vist flere enhedsceller (gentagelser af indholdet i romben på figuren).

Analysen er baseret på neutrontdiffraktionsdata fra tre pulverprøver med nominel sammensætning CAX_{10} ($X = \text{D}, \text{H}$ og $\text{H}_{0,64}\text{D}_{0,36}$). Det sidste pulver (såkaldt nulmatrix) har et forhold mellem hydrogen og deuterium, der fuldstændigt eliminerer spredningen fra brintatomer i diffraktionsmønstret. Det giver altså information om positionerne af præcis de samme atomer som røntgendata, i modsætning til f.eks. det fuldt deutererede pulver (se figur 1 øverst (●)) der giver information om positionerne af alle atomer i pulveret. Den reelle sammensætning blev $\text{CAD}_{8,42}$. Figur 4 viser hvordan atomerne sidder i krystallen. Strukturen har et bærende gitter dannet af calcium, aluminium og ilt atomer i overensstemmelse med røntgendata. Neutrondata har givet ny vigtig information om brintatomer bundet til gitterstrukturen samt de ilt og brint atomer der sidder som ubundet vand i lange kanaler af nano-størrelse.

Litteratur

- [1] A. N. Christensen og M. S. Lehmann, *J. Solid State Chem.* **51**, 196 (1984).
- [2] A. N. Christensen, B. Lebech, D. Sheptyakov og J. C. Hanson, *Acta Crystallogr. Ser. B*, submitted 2006.



Bente Lebech, seniorforsker, har fra 1964 til 2005 arbejdet med neutronspreddning og krystallografi på Forskningscenter Risø med speciale i magnetiske strukturer og er nu seniorkonsulent på Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet. Axel Nørhnd Christensen, civ.ing., dr. phil., har fra 1961 til 2001 beskæftiget sig med krystalsyntese, analyse af uorganiske forbindelser og krystallografi på Kemisk Institut, Aarhus Universitet.

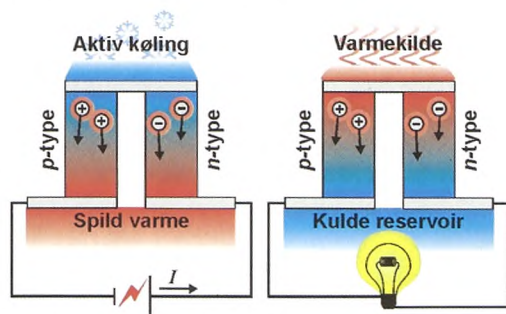
Gæsteatomer forbedrer termoelektriske materialer

Af Mogens Christensen og Bo B. Iversen, Kemisk Institut og iNANO, Århus Universitet

Termoelektriske materialer kan konvertere varme til elektrisk strøm uden at forurene. Modsat bevirker en strøm gennem et termoelektrisk modul en nedkøling af modulets ene ende. Modulerne har ingen bevægelige dele, er miniaturiserbare og ekstremt pålidelige i drift. Et kernepunkt i forbedringen af termoelektriske materialer er at minimere varmestrømmen – her kan gæsteatomer i en åben værtstruktur gøre en kæmpe forskel.

Termoelektriske moduler

Et termoelektrisk modul består af to ben, hvor ladningsbærerne typisk er henholdsvis positive (huller) og negative (elektroner). Når en strøm driver gennem modulet medbringer ladningsbærerne en mængde varme fra omgivelserne således, at varme pumpes fra modulets ene ende til den anden. Dette er princippet i en Peltier køler, til venstre i figur 1. Hvis modulet placeres i en temperaturgradient vil ladningsbærerne fra den varme ende have størst termisk drift og det vil give anledning til et spændingsfald. Princippet i en termoelektrisk strømgenerator vises til højre på figur 1.



Figur 1. Termoelektrisk modul bestående af *n*- og *p*-type halvledere. Peltier køler (venstre), Strømgenerator (højre).

Indtil nu har termoelektriske materialer fundet begrænset anvendelse pga. lav effektivitet. Materialerne bruges primært til strømkilder i rumsonder og til køling af CPU enheder, hvor pålidelighed, holdbarhed og størrelse har stor betydning. Forbedrede termoelektriske materialer vil betyde, at traditionel køling med komprimeret gas kan erstattes af Peltierkøling, og effektive strømgenerators vil kunne bruges til at udnytte spildvarme f.eks. fra bilmotorer og industrien.

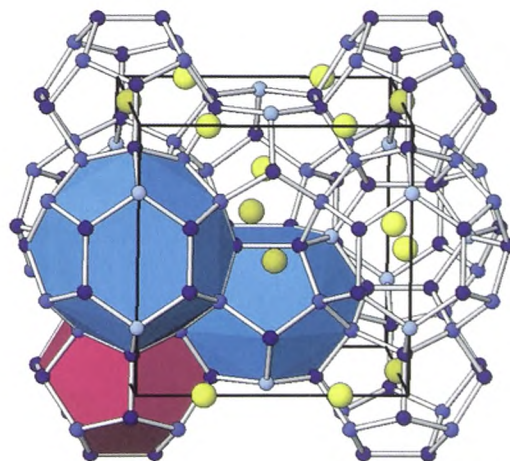
Termoelektriske materialer

I termoelektriske materialer er det vigtigt at styre varmestrømmen. Varmestrømmen har to bidrag: et som skyldes elektronerne og et hidrørende fra atomernes svingninger. Elektronerne lader sig styre gennem elektriske felter og udnyttes specifikt i Peltier elementer. De atomare svingninger kan ikke kontrolleres og ønskes derfor minimeret. Dette kan opnås ved at introducere gæsteatomer i specielle halvledende materialer med meget åben struktur. Gæsteatomerne indbygges i nanohulrum, hvor de i nogen grad bevæger sig uafhængigt af værts-strukturen (rasler som ærter i en dåse). De raslende atomer kan optage vibrationel energi fra værts-strukturen og dermed nedsætte

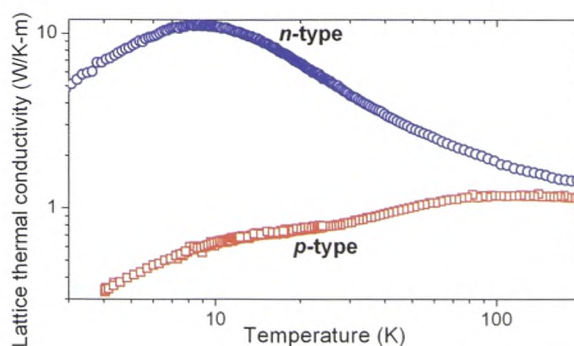
varmestrømmen i materialet. Uorganiske klatrasiler er et godt eksempel på vært-gæst forbindelser med exceptionelt lave varmestrømme. Varmeledningsevnen i $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ er således omkring 1 mW/K-m, hvilket er sammenligneligt med amorf glas eller ca. 400 gange lavere end i kobber.

Krystalstruktur

Krystalstrukturen for uorganiske klatrasiler er vist på figur 2. De blå atomer udgør værtsstrukturen (Ga/Ge for $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$). Bariumatomerne er vist som gule atomer inde i hulrummene. Det blå hulrum er signifikant større end det røde hulrum og det er specielt gæsteatomet i dette hulrum, der er i stand til at rasle. Ved at styre forholdet mellem Ga og Ge er det muligt at producere henholdsvis *n*- og *p*-type elektrisk ledning.



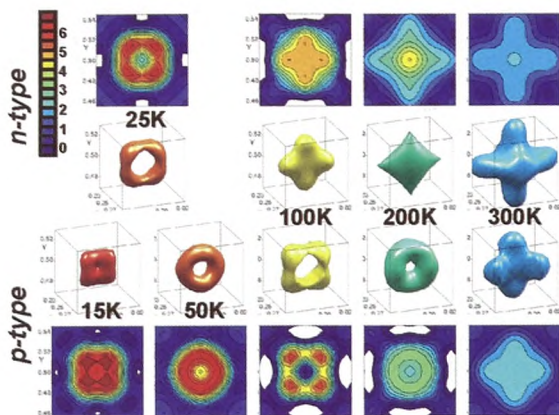
Figur 2. Klatrasil type I strukturen. De blå atomer udgør værtsstrukturen, som har to typer hulrum, hvori gæsteatomerne sidder (gule kugler).



Figur 3. Den termiske ledningsevne af *n*- og *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$.

Varmeledningsevnerne er signifikant forskellige ved lav temperatur for henholdsvis *n*- og *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$, mens de ved højere temperatur er sammenlignelige (figur 3). Forbindelsen med *n*-type ledningsevne har en temperaturprofil svarende til en normal krystallinsk forbindelse, hvorimod *p*-type forbindelsen har en opførsel, der er karakteristisk for glasser. En hypotese kunne være at gæsteatomerne i de to forbindelser opfører sig forskelligt.

Med neutroddiffraktion kan man undersøge, hvor gæsteatomerne befinder sig, samt hvordan de bevæger sig. Én-krystal neutroddiffraktionsdata er blevet målt som funktion af temperatur for *n*- og *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$, og de deraf udregnede fordelinger af barium gæsteatomernes positioner er vist i figur 4.



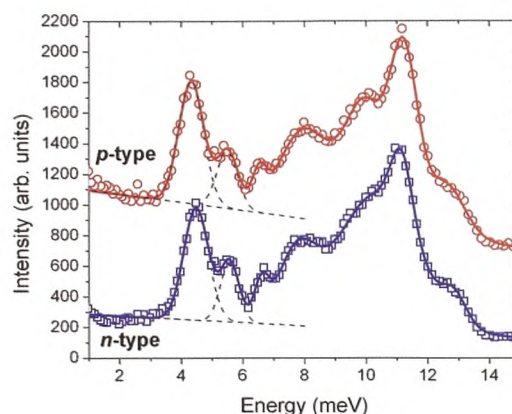
Figur 4. Fordelinger af barium gæsteatomernes positioner i det store hulrum for henholdsvis *n*- og *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$.

Det ses, at fordelingerne af bariumatomerne er forholdsvis ens ved de laveste temperaturer, og specielt at maxima findes i samme position. Figuren viser direkte, at bariumatomet ikke befinder sig i centrum af hulrummet, men er uordnet over mindst fire positioner. For *n*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ ses en ændring ved 100 K, hvor de fire maksima for fordelings-tætheden er drejet 45° . Samtidig er der nu en signifikant tæthed for barium atomet i centrum af hulrummet. For *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ ændres fordelingen først fra 200 til 300 K. Med andre ord afslører én-krystal neutron diffraktionseksperimentet tydelige forskelle mellem *n*- og *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ over 100 K, hvorimod der kun er små forskelle ved lav temperatur. De fundamentale forskelle i den termiske ledningsevne mellem *n*- og *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ blev netop observeret ved lav temperatur, og data viser altså at denne forskel næppe kan henføres til forskellig uorden for bariumatomerne.

Dynamiske egenskaber

Diffraktionsmålinger midler over tid og sted i krystallen. Ved hjælp af uelastisk neutron spredning kan man få direkte indblik i de dynamiske forhold i krystallen. Figur 5 viser tætheden af vibrationstilstande for *n*- og *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ målt med uelastisk neutronspredning. Det er specielt de to første toppe, der er interessante. Toppene stammer fra gæsteatomerne i de

store hulrum. Den første top er bevægelsen i et plan parallelt med de hexagonale ringe i værtsstrukturen, mens den anden top svarer til bevægelsen vinkelret herpå.



Figur 5. Vibrationstæthedstilstande for *n*- og *p*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ målt med uelastisk neutronspredning.

Energien for den første top er henholdsvis 4,32(1) og 4,47(1) meV for *p*- og *n*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$. Det vil sige, at der er en lille forskel i de dynamiske forhold for *p*- og *n*-type $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$, men denne forskel kan næppe alene forklare forskellen i varmeledningsevnen. Overordnet set kan den store tæthed af vibrationstilstande ved lav energi forklare den lave varmeledningsevne. Den øgede tæthed skyldes vekselvirkning mellem gæsteatomet og værtsstrukturen. Gæsteatomet spreder vibrationsbølger i værtsstrukturen og derved nedsættes varmestrømmen. Således er gæsteatomerne medvirkende til at forbedre de termoelektriske egenskaber.



Mogens Christensen arbejder med undersøgelse af fysiske egenskaber og strukturkarakterisering ved hjælp af neutron- og røntgenspredning. Målet er atomar forståelse af makroskopiske fysiske egenskaber såsom magnetisme og termoelektrika.



Bo Brummerstedt Iversen er professor i materialekemi. Hans grupper arbejder med at designe, syntetisere og karakterisere nye funktionelle materialer. I de seneste år har fokus været på nanomaterialer med termoelektriske, katalytiske og magnetiske egenskaber, samt på udvikling af superkritiske syntesemetoder til fremstilling af nanopartikler. Gruppen har et omfattende forskningsprogram ved internationale synkrotron- og neutronfaciliteter.

Hvorfor findes der høj-temperatur superledning?

Af Kim Lefmann og Niels Hessel Andersen, Afdeling for Materialeforskning, Forskningscenter Risø, Danmarks Tekniske Universitet, og Per Hedegård, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet

Superledning er et fascinerende fænomen, hvor et materiale pludseligt mister al elektrisk modstand. De mest spektakulære materialer er høj-temperatur superlederne, som egentlig burde være magnetiske isolatorer. Tusindvis af forskere har i de seneste to årtier forsøgt at aflure disse stoffer deres hemmelighed, men problemet er stadig langt fra løst. Vi vil her fortælle lidt om, hvad man ved og ikke ved om disse gådefulde materialer; især hvad eksperimenter med neutronspredning kan fortælle om sammenhængen mellem magnetisme og superledning.

Superledning er super!

Mange almindelige metaller, som Aluminium og Bly, mister fuldstændig deres elektriske modstand ved meget lave temperaturer; typisk under 10 K (10 grader over det absolutte nulpunkt, som ligger ved $-273,15^\circ\text{C}$). Dette fænomen kaldes superledning. Strøm i en superledende ring kan løbe i årevis uden ændring, hvis temperaturen holdes lav. Superledere frastøder magnetiske felter, så en stærk permanent magnet kan svæve over en superleder så længe den er superledende. Superledere kan derfor have mange spændende anvendelser i dagligdagen som: tabsfri strømkabler, kraftige permanente elektromagneter, kæmpespoler til energilagring, svævende tog, og elektronik til ultrahurtige computere. Det er bare ærgerligt, at temperaturen er nødt til at være så lav.

Høj-temperatur superledere skal være kolde

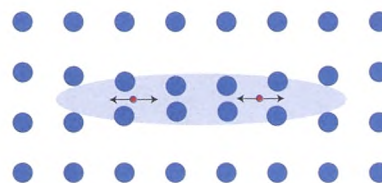
Opdagelsen af de såkaldte høj-temperatur superledere i 1986 indledte en revolution i materialefysik, og inden et år var der fundet adskillige af disse Cu-holdige keramiske materialer. De to opdagere, G. Bednorz og K. A. Müller, blev da også fortjent belønnet med Nobelprisen i 1987, og kort tid efter havde tusindvis af forskere kastet sig over emnet. Hurtigt fandt man materialer, der var superledende ved kvælstofs kogepunkt (77 K), og den højeste superledende overgangstemperatur kom op på 133 K (165 K under højt tryk). Men man har endnu ikke nået det ultimative mål: Materialet, der er superledende ved stuetemperatur ($20^\circ\text{C} = 293\text{ K}$). Faktisk har man slet ikke forstået, hvordan høj-temperatur superledere egentlig virker. Problemet er ofte nævnt blandt de vigtigste uopklarede spørgsmål i fysikken. Måske er man nødt til at løse det for at kunne lave en stuetemperatur superleder – hvis en sådan overhovedet findes.

Fermioner og Bosoner: Enspændere og festaber

Men lad os først se på de almindelige metaller. Den elektriske strøm bæres af elektroner. Grunden til, at der er elektrisk modstand, er, at elektronerne støder ind i urenheder og vibrerende ioner i atomgitteret. Herved overføres der energi til ionerne, som derved bliver varmere, og den tabte energi må tilføres ledningen, hvilket fx sker i kredsløbets batteri, der opretholder en

spændingsforskel mellem ledningens ender. Forholdet mellem spændingen U og den strøm I der løber er som bekendt givet ved Ohms lov: $U/I = R$, hvor R er modstanden. Hvis der ikke er nogen modstand, er der derfor ikke brug for noget batteri for at få en strøm til at løbe. Elektronerne er desuden Fermioner. Det er et kvantefysisk begreb, og Fermioner er karakteriseret ved, at der kun må være én Fermion i hver kvantemekanisk tilstand — Fermioner er altså de ultimative enspændere; de opfører sig alle forskelligt.

I metalliske superledere er elektronerne bundet sammen i såkaldte Cooper-par. Disse par bliver dannet ved hjælp af de elastiske svingninger i krystalgitteret (fononer), som vist i figur 1 [1].



Figur 1. Cooper-par i et superledende metal. En elektron tiltrækker positivt ladede ioner, som så tiltrækker en anden elektron. De to elektroner deles nu om det således dannede "elektriske hul".

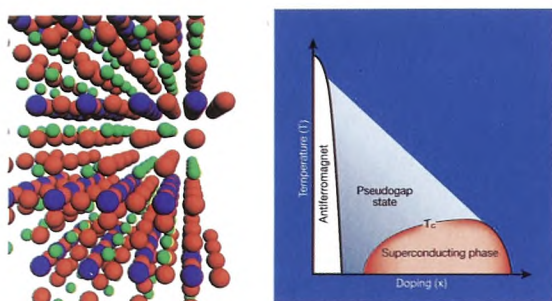
Selvom Cooper-par består af to elektroner, opfører de sig som Bosoner. Bosoner har det lige modsat Fermioner. De har den egenskab, at der godt kan være flere i samme tilstand. Ja faktisk har de en ubændig trang til at gøre det samme, og jo mere des flere Bosoner der allerede gør det samme — de er ultimative "festaber". De kan derfor kondensere i en fælles kvantetilstand, et såkaldt Bosekondensat, men kun hvis temperaturen er tilstrækkelig lav til ikke at bryde parrene. Elektronerne i en superleder støder stadig ind i urenheder og vibrerende ioner, men trangen til at komme "tilbage i geled" i Bosekondensatet er så stor og sker så hurtigt, at de ikke når at aflevere energi og varme ionerne op. Modstanden er forsvundet.

I høj-temperatur superlederne kan man måle, at elektronerne danner Cooper-par som i metallerne. Men hvad der holder de enkelte Cooper-par sammen, er verdens forskere meget uenige om. Nogle hælder til en forklaring i stil med gittersvingninger, selvom "den kritiske temperatur", T_c ser ud til at være alt for høj til at kunne forklares på denne måde. Andre mener, at magnetismen i materialet må spille en rolle. Dette

kan synes at være kontroversielt, fordi superledning og magnetisme normalt ikke “holder af” hinanden. Udover at bære ladning er en elektron også en lille stangmagnet, fordi den spinner omkring sin egen akse. Fænomenet kaldes elektronens “spin”. Cooper-par indeholder nemlig par af elektroner med modsat rettet spin og dermed også modsat rettede magnetiske momenter. Et lokalt magnetisk felt vil derfor søge at bryde parrene.

Doping er nødvendig

Høj-temperatur superledere (HTS) er karakteriseret ved lagdelte strukturer af CuO_2 lag, som danner grundlaget for superledningen. Imellem disse lag findes forskellige typer bindingslag, som holder og stabiliserer strukturen. Et eksempel er $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO), som er vist i figur 2.



Figur 2. Til venstre: Krystalstrukturen af $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Kobberatomerne (blå) sidder i CuO_2 lag sammen med iltatomer (røde). La/Sr (grønne) befinder sig mellem CuO_2 lagene. Til højre: Et typisk fasediagram for en høj-temperatur superleder. Ved ingen (eller lav) dotering er materialet en antiferromagnetisk isolator (hvid), mens doteringer mellem ca. 0,05 og 0,25 giver anledning til superledning (rød). Den kritiske temperatur for superledning er langt lavere end den kritiske temperatur for antiferromagnetisme. Imellem de to faser findes en fase, hvis natur stadig ikke er fuldt forstået (lyseblå).

Bindingslagene bidrager også med den nødvendige dotering (“doping” på engelsk) af CuO_2 elektronstrukturen. Høj-temperatur superledning ses nemlig kun i doterede materialer. I udoteret form er HTS magnetiske isolatorer. De danner en antiferromagnetisk fase, hvor spinnene på nabokobberionerne er modsat rettet (jvf. spin-strukturen på de blå Cu-ioner i figur 3). Doteringen foretages oftest ved at fjerne elektroner fra CuO_2 lagene. Dette gør i første omgang magnetismen ustabil, og ved dotering på $x > 0,05$ pr. Cu-atom kommer superledningen. Den optimale dotering (højeste T_c) fås for $x = 0,16$.

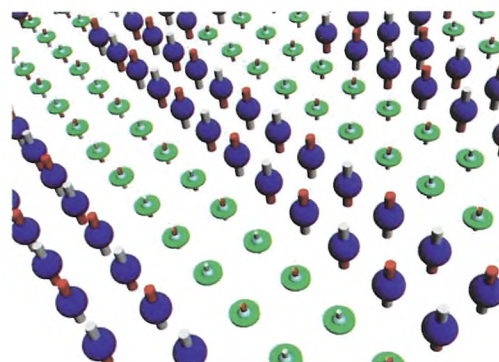
Magnetisme og superledning hører sammen

Man anvender mange forskellige teknikker til at studere superledere. Her skal vi koncentrere os om den vigtige information, som neutronspredning har givet til forståelsen af HTS, og vi skal give eksempler på resultater fra LSCO, som er blevet studeret intensivt på Risø [2].

Neutroddiffraktion er specielt velegnet til at bestemme HTS materials krystalstruktur, fordi iltionernes nøjagtige positioner spiller en rolle for su-

perledningen, og disse kan vanskeligt bestemmes med røntgendiffraktion, som omtalt i den indledende artikel.

De vigtigste bidrag fra neutronspredning til forståelsen af HTS materialernes egenskaber kommer imidlertid fra studiet af deres magnetiske egenskaber. Tidligt blev det bestemt, hvordan elektronernes spin er organiseret (antiferromagnetisme — $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$) og hvordan de eksiteres og danner såkaldte spin-bølger i de udoterede materialer. Med fremkomsten af større og bedre énkrystaller og nye avancerede neutronspektrometre, som RITA-2, blev det muligt at studere de magnetiske egenskaber af doterede materialer. Her viser eksperimenter med elastisk og lav-energi uelastisk neutronspredning, at der er antiferromagnetisme i CuO_2 planerne, også i den superledende fase for $x > 0,05$, men den har ikke en simpel “op-ned-op-ned” struktur. For nær-optimal dotering, $x > 0,13$, viser eksperimenterne en antiferromagnetisk struktur, som kun gentager sig når man rykker 8 pladser frem i iongitteret — i modsætning til 2 pladser i den simple antiferromagnet. Dette kan forklares med den såkaldte “stribemodel”, som er illustreret på figur 3. Eksistensen af statiske ladningsstriber i superledende HTS er eftervist direkte med synkrotron røntgendiffraktion [6].



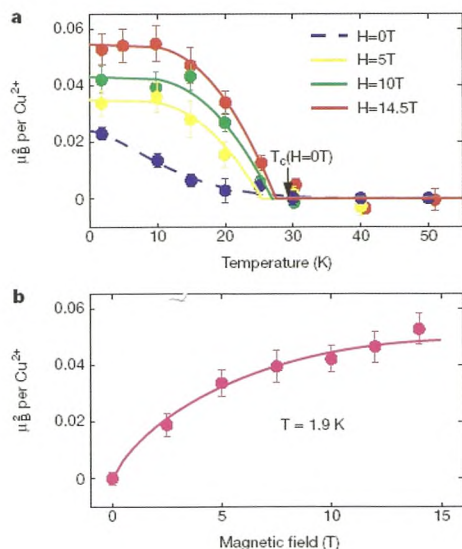
Figur 3. Stribemodel af et enkelt CuO_2 lag. Kun kobberionerne er vist med deres spin som små magneter. “Hullerne”, som fjerner spin fra kobberatomerne og introducerer ekstra ladning er organiseret i striber (grønne) ind imellem velordnede områder med spin. Bemærk at spinnene gentager sig efter 8 pladser i gitteret. Se mere i [5]

I 1990 blev det opdaget på Risø, at LSCO har magnetiske fluktuationer, som også har en periode på 8 gitterpladser [2]. I 1999 opdagede vi endvidere, at der opstår et energi-gab i spin-fluktuationerne (et spin-gab = den mindste energi der er påkrævet for at eksitere spinnene), når materialet bliver superledende [3]. Dette fænomen er stadig uafklaret.

Konkurrerer superledning og magnetisme?

Senere eksperimenter på Risø og i Berlin viste helt overraskende, at periode-8 magnetisme bliver fremkaldt af et ydre magnetisk felt. Man ville ellers forestille sig, at et magnetfelt først og fremmest vil prøve at få alle elektronernes spin til at pege samme vej, men her er der andre kræfter på spil. Det magnetiske felt vil svække superledningen i bestemte områder, hvor det danner magnetiske hvirvelkerner (se artiklen af Asger

B. Abrahamsen i dette nummer af KVANT). Der, hvor superledningen er svækket, kan de magnetiske kræfter udfolde sig frit. Dette antyder, at superledning og magnetisme, som forventet er konkurrenter, og det understøttes af en udregning, der forudsagde den magnetiske ordens afhængighed af magnetfeltets styrke med meget fin overensstemmelse; se figur 4.



Figur 4. Intensiteten af den magnetiske diffraktionstop i underdopet LSCO, $x = 0,10$. (a) Intensitet som funktion af temperatur i forskellige magnetfelter, H . For $H > 0$ er $H = 0$ signalet trukket fra. Bemærk, at $H > 0$ signalet forsvinder ved T_c . (b) Lav-temperatur signalet som funktion af H . Den overlejlrede kurve er en teoretisk forudsigelse. Fra [4].

Det eksperimentelle neutronspretningsarbejde på LSCO er foregået i nært samarbejde med teoretikere. På Niels Bohr Instituttet arbejdes der med en stripe model, hvor Cooper-parrene dannes og bevæger sig i et dynamisk "flodsystem" af striber. Hullerne i striberne (de grønne i figur 3) er i virkeligheden opblandet med og koblet til elektron-spin på ikke dopede Cu-ioner i striberne. Modellen bygger på, at spinnene i "flodsystemet" vekselvirker med spinnene på "flodbredderne" (de blå spin i figur 3) og dermed opnår en effektiv kobling, som overføres til de nærliggende huller. Herved dannes Cooper-par, dvs. Bosoner, som kan kondensere under en vis temperatur. I modsætning til traditionelle metal-liske superledere er der imidlertid klare signaler om, at Cooper-parrene i HTS dannes allerede i "pseudo-gap tilstanden" (se figur 4) inden superledningen indtræffer.

Fremtiden

Som det fremgår venter der fortsat en del arbejde, før HTS er tilfredsstillende forstået. Fremskridtene er stærkt afhængige ikke blot af teoretisk intuition og modelarbejde, men også af nye forbedrede materialer og måleteknikker, som leverer entydige højkvalitets data. Da intensiteten fra de magnetiske signaler i superledende HTS er meget svag er ønsket om stadig forbedret instrumentering bydende nødvendig. Måske vil de kommende høj-intensitets neutronkilder (se den

indledende artikel) bane vejen for et gennembrud, som giver den endelige forklaring af HTS.

Litteratur

- [1] P. Hedegård, Forenede Elektroner A/S, Nysyn (1990)
- [2] K. Lefmann *et al.* *J. Low. Temp. Phys.* **135**, 621 (2004)
- [3] B. Lake *et al.*, *Nature* **400**, 43 (1999)
- [4] B. Lake *et al.*, *Science* **291**, 1759 (2001) og *Nature* **415**, 299 (2002)
- [5] Brian Møller Andersen, Ph.D.-afhandling. Kan findes på <http://www.nbi.ku.dk/side25882.htm>
- [6] M. v. Zimmermann *et al.*, *Europhysics Letters* **41**, 629 (1998)



Kim Lefmann (th) og Niels Hessel Andersen (midt) er henholdsvis seniorforsker og forskningsspecialist ved Afdelingen for Materialeforskning, Risø, DTU. Begge er desuden adjungeret professor ved Niels Bohr Institutet, KU. De foretager eksperimentelle studier af HTS, specielt med røntgen- og neutronspretning. Per Hedegård (tv) er professor ved Niels Bohr Institutet, KU, og beskæftiger sig med teoretisk analyse og modelarbejde af HTS.

PFEIFFER VACUUM

Mød Totalleverandøren på DFS årsmøde

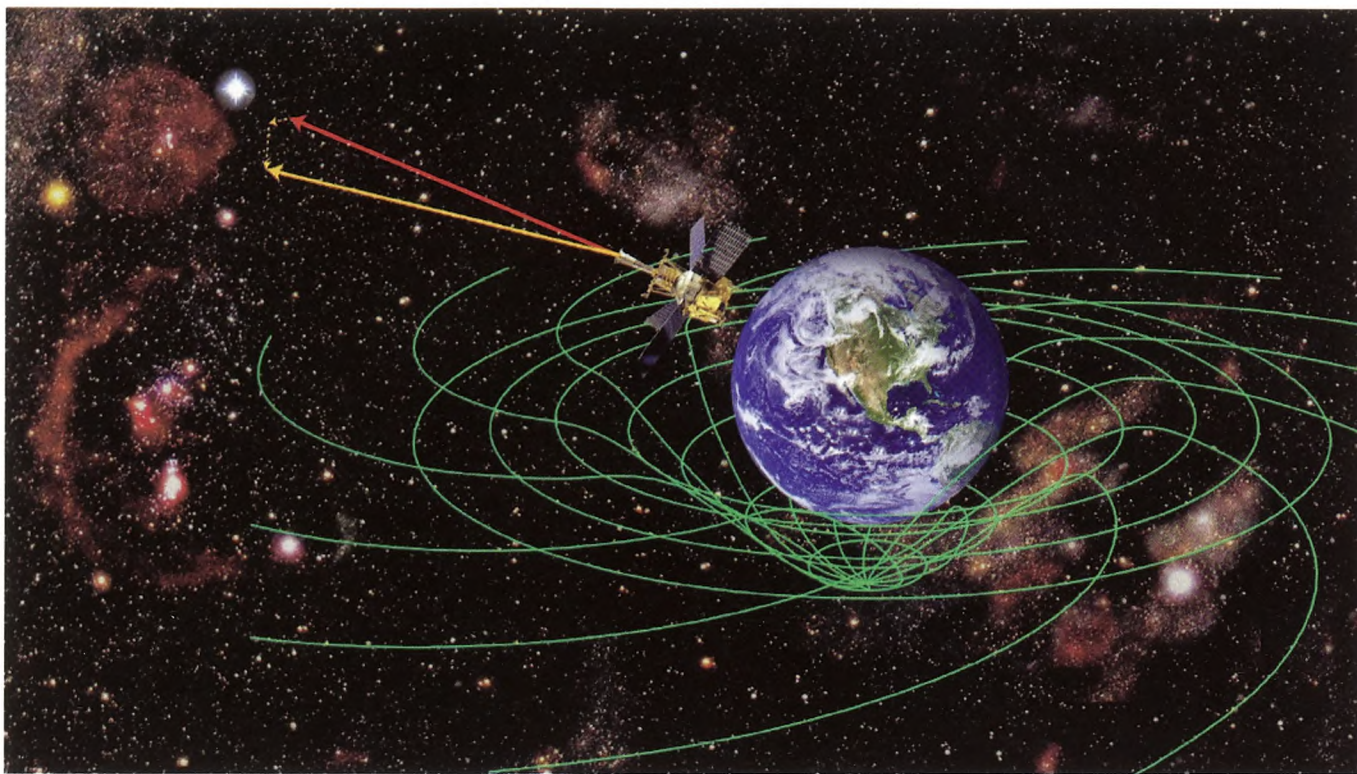
Forskeres "One-Stop-Shop"

Massespektrometre: massrange op til 2048 amu

Alt nødvendigt tilbehør: Pumpesystem, In-let system, kammer, ventiler, skueglas, gennemføringer, fittings og tryksensorer

Helium læksøger SmartTest™

Tlf. 4352 3800 Fax 4352 3850
efa@pfeiffer-vacuum.dk



Rumsonden "Gravity Probe B" i bane om Jorden, der krummer og trækker rummet med rundt. Billede: <http://einstein.stanford.edu>

De første resultater fra Gravity Probe B

RELATIVITETSTEORI. De foreløbige resultater fra tyngde-sonden, Gravity Probe B, er blevet offentliggjort, og de støtter Einsteins generelle relativitetsteori. Sonden blev opsendt i april 2004 og har siden august 2005 og et år frem målt Jordens krumning af rumtiden.



Ifølge Einsteins generelle relativitetsteori vil alt stof med masse krumme rum og tid. Det kræver dog et tungt legeme som f.eks. Solen at krumme rumtiden bare lidt. Dette blev allerede bekræftet af astronomen Eddington under en solformørkelse i 1919. Det er derfor ikke en revolution, at Gravity Probe B ifølge de foreløbige analyser af målingerne har bekræftet relativitetsteoriens beskrivelse af Jordens krumning med en nøjagtighed bedre end 1 %. Det er dog også hensigten, at sonden – der har været 40 år undervejs og kostet mere end 5 milliarder dollars – skal måle

en anden relativistisk effekt: Et legeme i rotation vil vride rumtiden en anelse. Denne effekt er 170 gange mindre end selve krumningen, og det vil kræve yderligere 8 måneders databehandling før vi kan få svar på dette spørgsmål.

Kilde: Tycho Brahe Planetariet, www.tycho.dk/article/articleview/4316/2/32; Stanford University, news-service.stanford.edu/pr/2007/pr-aps-041807.html

Casimir-effekten under lup

HØJENERGIFYSIK. Kvantefluktuationer er den egentlige forklaring på Casimir-effekten, som manifesterer sig ved, at der udøves et træk på genstande tæt på en overflade. Kraftpåvirkningen er meget svag, så det var i mange år et diskussionsemne, om denne effekt overhovedet er en realitet. Den debat er afsluttet med eksperimentel påvisning af effekten.

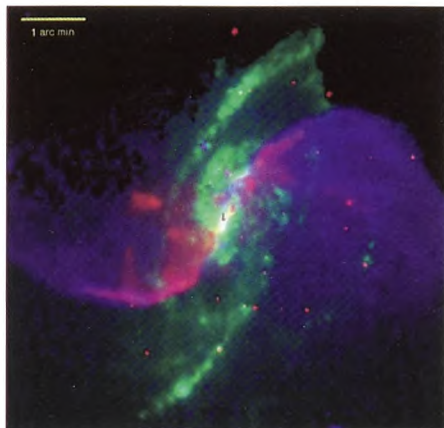
I et nyt eksperimentelt arbejde udført af Eric Cornell og kolleger på JILA laboratoriet (Boulder, Colorado) er det eftervist, at styrken af tiltrækning vokser med temperaturen. At det skulle forholde sig sådan, blev forudsagt af den russiske fysiker Lifschitz i 1955.

Eksperimentet var baseret på brugen af et Bose-Einstein kondensat (250.000 Rubidium-atomer fastholdt i en magnetisk fælde nogle mikrometer fra en glasplade). Når glaspladen opvarmes fra 300 K til 605 K kan man måle, hvor meget mere der trækkes i BE-kondensatet. Tallene der kom ud fra forsøget angav, at kraften var forøget 3 gange ved en fordobling af glaspladens temperatur.

Kilde: Phys. Rev. Lett.

Sort hul skaber spøgelsesspiralarme

ASTRONOMI. Galaksen Messier 106 har siden starten af 1960'erne været en gåde, da man observerede røntgenstråling og radiostråling fra to yderligere spiralarme. Messier 106 (også kendt som NGC 4258) er en spiralgalakse beliggende i retning mod stjernebilledet Canes Venatici (Jagthundene) og i en afstand på 23,5 millioner lysår fra Jorden.



Billedet ovenfor er en kombination af optagelser af forskellige typer elektromagnetisk stråling. De grønne farver kommer fra infrarødt lys, de blå farver er stråling i radioområdet, mens de røde farver er røntgenstråling. De almindelige spiralarme ses med infrarødt lys, men de to 'usynlige' spiralarme er blå (stråling i radioområdet).

Forskere fra University of Maryland har nu fundet en mulig forklaring på gåden om de mystiske gas-spiralarme. Ved hjælp af NASA's Chandra røntgenobservatorium, NASA's Spitzer rumteleskop, ESA's XMM-Newton røntgenobservatorium og Hubble rumteleskopet har man opdaget et supertungt sort hul i centrum af Messier 106 (den lille pil på billedet), der skaber spiralarmene. Det sorte hul udsender to intense stråler af energirige partikler, der opvarmer den omkringliggende gas. Den opvarmede gas bliver presset væk og danner derved de to spøgelsesagtige spiralarme af gas. Observationerne af Messier 106 gav desuden forskerne mulighed for at bestemme jet-strålernes energi og vurdere strålerne i forhold til det supertunge sorte hul.

Kilde: Tycho Brahe Planetariet, www.tycho.dk/article/view/4313/; NASA, www.nasa.gov/centers/goddard/news/topstory/2007/mystery_spiralarms.html

Astronomi-programmer

ASTRONOMI. Med det rigtige program kan man lege astronom, selv om det er overskyet eller Solen skinner.

Her følger en liste over nogle af de tilgængelige stjerneprogrammer. Nogle er gratis og andre koster penge. Der er forskellige operativsystemer i spil: Linux, Mac, Win og BSD. Pladsen her tillader ikke en detaljeret beskrivelse, men trods deres forskelle (bl.a. tysk og engelsk) er de alle interessante.

Kstars 1.2.5, Redshift 6, SkyCharts 2.76, Starry Nights Pro Plus 5, StarCalc 5.73, Stellarium 0.8.2, Xphem 3.7.2

Elektronaccelerator med efterbrænder

PARTIKELFYSIK. Med et 85 cm langt plasmakammer er det lykkedes at fordoble elektronenergien fra 42 GeV til 85 GeV. Forsøget er udført på SLAC (Stanford Linear Accelerator), som er en elektronaccelerator.

Kammeret, hvor elektronstrålen skydes ind, er fyldt med Li-gas. Elektronstrålen frembringer et stærkt elektrisk felt, som ioniserer Li-atomerne. Elektronerne herfra bliver skubbet ud, hvorved de positive ioner bliver tilbage. Når elektron-

strålen fra acceleratoren så har passeret vil det kraftige elektriske felt omkring Li-ionerne trække de frastødte elektroner tilbage, og nogle af disse vil få den meget store energi tilført.

Selv om det beskrevne princip har været kendt i mange år, er det først med dette forsøg, at man har opnået en så stor energitilvækst. Derfor skal man betragte dette forsøg som et "proof-of-concept". Før det bliver et værktøj til rutinemæssig brug af fysikere, er der dog en del praktiske problemer, som skal løses.

Kilde: Nature 445, 741-744 (2007); og 721/722.

Fejl resulterer i eksplosion på CERN

PARTIKELFYSIK. En simpel fejl i ligevægtsberegningerne for de bærende konstruktioner har forårsaget en eksplosion i partikelacceleratoren Large Hadron Collider (LHC). Eksplosionen skete under en rutinemæssig test den 27. marts, da ophænget til en af de tre indre hovedmagneter med en længde på 13 meter brækkede af. Magneten var kølet ned med helium, der fyldte den 27 kilometer lange tunnel efter eksplosionen, hvorved man måtte evakuere tunnelen.

Hovedmagneterne og ophænget er designet af det amerikanske laboratorium for fysik, FermiLab (et konkurrerende højenergilaboratorium til CERN), hvis direktør finder uheldet yderst pinligt. LHC har været 15 år undervejs og skulle være klar til november, men uheldet vil betyde, at LHC først er færdig til maj 2008.

Kilde: Ingeniøren, ing.dk/article/20070412/NATUR/70411016; Fermi Lab Today, www.fnal.gov/pub/today/20070403_page01.html

Spintronik lidt nærmere

KVANTEFYSIK. Computere, hvor de binære data fastholdes ved hjælp af elektronspin, er indtil videre en vision. Ikke desto mindre forskes der mange steder på at gøre dette til virkelighed. Et gennemgående problem er, at elektronspin har en udpræget tendens til at miste orienteringen på grund af vekselvirkning med omgivelserne. Derfor er mange forsøg udført ved ekstremt lave temperaturer, hvor de termiske bevægelser – og dermed vekselvirkningerne – næsten er gået i stå.

Med en teknisk term er den vigtige parameter for et spintronisk system (spin)-relaxationstiden. Typisk måles den i nano- eller mikrosekunder. I et forsøg med et organisk materiale tris (8-hydroxyquinoline) anbragt mellem to ferromagnetiske elektroder (der betingede målemetoden) kunne der måles spinrelaxationstider på op til 1 sekund. Lange relaxationstider kunne iagttages op til 100 K, så det synes at være et markant skridt i den rigtige retning.

Kilde: Nature Nanotechnology – Marc Cahay (University of Cincinnati)

Brune dværge udsender radiobølger

ASTRONOMI. Med et radiointerferometer (Very Large Array) i New Mexico har forskningsgruppen omkring Gregg Hallinan påvist, at der kan komme kraftig, pulserende radiostråling fra en brun dværg. Brune dværge er objekter med masser, der er 15-80 gange Jupiters.

Objektet TVLM 513 har været genstand for en nøje observation, hvor det viste sig, at radiostrålingen er meget kraftig. Man forestiller sig, at elektroner bevæger sig gennem et kraftigt magnetfelt, hvorved der opstår radiosignaler, som yderligere forstærkes af det, der betegnes som en "naturlig MASER".

Som ved pulsarer bliver radiosignalerne opfanget her på jorden som periodiske blink. For TVLM 513 (med en relativ lav rotationshastighed) er den tidsmæssige afstand mellem blinkene 2 timer. Resultaterne blev for nylig præsenteret ved et møde for britiske astronomer.

Kvantemagnetisme – en underlig fisk

Af Niels Bech Christensen, Afdelingen for Materialeforskning, Forskningscenter Risø, Danmarks Tekniske Universitet og Paul Scherrer Institut, Villigen, Schweiz og Henrik M. Rønnow, Laboratory for Quantum Magnetism, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Schweiz

De skabninger, der bebor de dybe verdenshave, er væsensforskellige fra dem fiskehandleren sælger. De ekstreme betingelser, der hersker i 10 kilometers dybde kræver andre overlevelsesstrategier, end dem de lettere tilgængelige overfladefisk anvender. Inden for magnetisme kan ekstreme betingelser – nærmere beskrevet nedenfor – tilsvarende give anledning til fænomener, der adskiller sig kraftigt fra den klassiske ferromagnetisme, der blandt andet tillader os at sætte huskesedlen fast på køleskabsdøren. Man taler løst om kvantemagnetisme. I denne artikel vil vi kort introducere nogle af de fisk, man kan fange, hvis man smider fiskesnøren i det kvantemagnetiske hav.

Atomar magnetisme

Atomar magnetisme skyldes elektroner, der kredser om atomkerner, mens de samtidigt roterer om sig selv, på samme måde som jorden roterer om solen såvel som om sin egen akse. De magnetiske momenter, der herved opstår, er så små, at vi må beskrive dem med kvantefysikkens love. Vi kalder dem *spin* og betegner dem med symbolet S . Det viser sig, at spin-fysik (magnetisme) udgør en fremragende arena for beskrivelse og udforskning af nogle af de vigtigste kontraintuitive konsekvenser af kvantefysikken, nemlig kvantisering, superposition af tilstande, kvante-fluktuationer imellem tilstande samt entanglement. Det er i høj grad realisationen af fænomener som disse i *makroskopiske* krystaller, der gør kvantemagnetisme til et spændende forskningsfelt, både med henblik på undersøgelse af grundlæggende fysiske problemstillinger og med henblik på fremtidige teknologiske anvendelser.

Kvantefænomener

Kvantisering indebærer at spins kun kan antage værdier, der er halv- eller heltallige ($S = 0, 1/2, 1, 3/2, 2$, osv.) multipla af Planck's konstant $\hbar$. Bortset fra det umagnetiske tilfælde $S = 0$, er den mindst mulige værdi altså $S = 1/2$. I denne grænse udtrykker kvanteeffekter sig mest dramatisk. I den modsatte grænse, $S \gg 1$, kan spinnene beskrives som klassiske vektorer, der peger i en veldefineret retning. *Superposition* er det fænomen, at et system samtidigt kan befinde sig i to forskellige tilstande. Eksempelvis kan et spin samtidigt pege op og ned (langs en vilkårlig z -akse). Man skal forestille sig, at spinnet oscillerer mellem de to tilstande i en slags imaginær tid. Sådanne *kvantefluktuationer* dæmpes, hvis spin-spin vekselvirkninger gør det fordelagtigt for alle spin at pege i en bestemt retning (ferromagneter). Har hvert spin imidlertid for få eller modsatte (antiferromagnetiske) nabo-spins, vil kvante-fluktuationerne modvirke magnetisk ordnede tilstande, og i ekstreme tilfælde resultere i nye ikke-klassiske tilstande. Disse kan indeholde eksotiske typer af 'kvanteorden', hvor f.eks. to spin er sammenkoblet på en sådan måde, at hvis det ene spin peger op, peger det andet

spin altid ned, selvom de hver især er i en uordnet superposition af op- og ned-tilstande. På mirakuløs vis kan denne "kvante-information", også kaldet *entanglement*, eksistere over store afstande. Entanglement er grundlaget for ambitiøse forslag til kvantecomputere.

Udover lavt spin S , lav dimensionalitet og antiferromagnetisme, der altså udgør et godt *indre* udgangspunkt for kvantemagnetiske effekter, vil et typisk eksperiment indebære påtrykkelsen af ekstreme *ydre* betingelser i form af lave temperaturer og høje magnetfelter. Endelig har man brug for en teknik, der tillader observation af kvanteeffekter og test af teoretiske forudsigelser. På dette punkt har neutronspreddning historisk spillet en afgørende rolle. Det skyldes, at neutronen selv bærer et magnetisk moment, $S = 1/2$, som vekselvirker med og afslører rum- og tidslige variationer af et materiales spin-struktur.

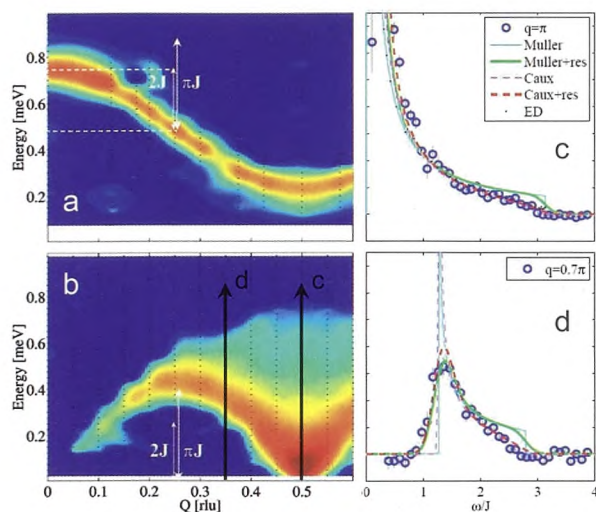
Kollektive svingninger

Materials magnetiske egenskaber er i høj grad bestemt af deres statiske grund-tilstand, samt hvilke dynamiske *eksitationer* (kollektive svingninger) disse kan fostre. Eksitationerne i en ferromagnet er f.eks. bølger i et hav af ensrettede spins, som kornet der vejer i brisen. Disse klassiske *spin-bølger* har en ganske bestemt sammenhæng mellem deres impuls (dvs. invers bølgelængde) og hastighed (energi), kaldet en dispersions-relation. En spin-bølge har en amplitude, der svarer til at præcis ét spin er blevet flippet, $\Delta S = 1$, i det samlede spin-system, og kan sættes i gang af en neutron, der så samtidig må flippe sit spin. Neutronspreddning kan derfor direkte identificere magnetiske eksitationer ved at afbilde disses impuls og energi. I det følgende illustrerer vi manifestationer af kvantefysikkens fundamentale grundelementer med to eksempler på kvanteeksitationer taget fra vore egne neutroneksperimenter.

De "blå" krystaller

Vort første eksempel er $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{D}_2\text{O}$, et materiale mange kender som de blå krystaller, der groede i kemi-eksperimenter i folkeskolen, og som magnetisk består af antiferromagnetiske én-dimensionelle kæder af $S = 1/2$ Cu^{2+} -ioner. På trods af værdien af S og den lave

dimensionalitet kan et stærkt magnetfelt $H > H_c = 3,6$ Tesla (ca. 100 gange stærkere end en køkkenmagnet) ensrette alle spins til en ferromagnetisk grundtilstand, hvor kvanteeffekter er fuldkommen undertrykt. Man kan altså *slukke for kvantemekanikken* i $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{D}_2\text{O}$, og dermed opnå spin-bølger med en skarp dispersionsrelation (figur 1a). I den antiferromagnetiske nul-felts grundtilstand, derimod, ødelægger kvantefluktuationer den langt-rækkende orden ved at indsætte mange lokale $S = 1/2$ forstyrrelser (spinoner), der bryder kæden op i mindre segmenter. I en sådan uordnet suppe kan spin-bølger ikke overleve, og de fundamentale eksitationer er i stedet ekstra $S = 1/2$ kædebrud. Da en neutron kun kan overføre $\Delta S = 1$ til systemet, må den skabe et *par af spinoner*, hver med deres dispersionsrelation. De to spinoners energier kan kombineres til samme totale energi E for forskellige totale impulser, Q , hvorved man får et *kontinuum* af spredning i stedet for en veldefineret eksitation (figur 1b). Dette kontinuum var set før, men vores målinger er de første af tilstrækkelig kvalitet til at teste teoretiske forudsigelser, som illustreret i figur 1c,d.

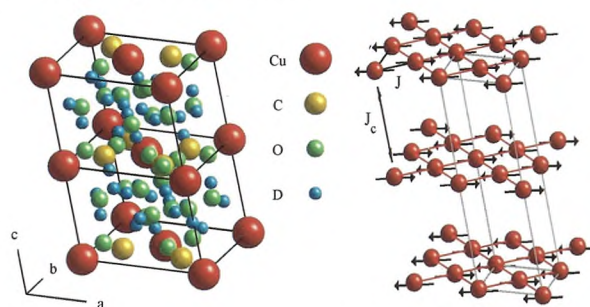


Figur 1. Neutronspretnings-intensitet fra $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{D}_2\text{O}$ ved $T = 100$ mK (M. Enderle, H. M. Rønnow et al., ikke publiceret) a) Skarp ferromagnetisk dispersionsrelation, $E(Q)$, i den ferromagnetiske fase ved et magnetisk felt på 5 tesla. b) Kontinuums spektrum af spinon-par i den kvante-uordnede nul-felt fase. c)-d) Linieform som funktion af energi for to Q i nul-felt fasen. Vores data modsiger tidligere teorier (Müller), og bekræfter en ny beregning (Caux).

Resonerende valensbånd?

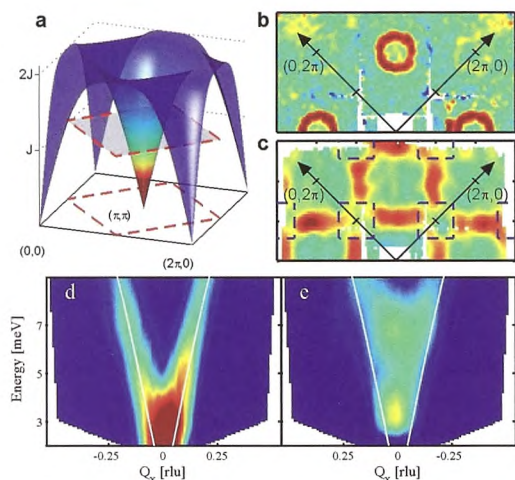
Vort andet eksempel er $\text{Cu}(\text{DCOO})_2 \cdot 4\text{D}_2\text{O}$, der består af svagt koblede, antiferromagnetiske kvadratiske gitter af $S = 1/2$ Cu^{2+} -ioner (se figur 2, til højre). Sådanne to-dimensionelle (2D) antiferromagneter er særligt interessante, fordi *kemisk doping* med mobile ladninger kan lede til høj-temperatur superledning (se andetsteds i dette blad). Teoretisk kan 2D, $S = 1/2$ antiferromagneter kun udvikle magnetisk orden ved $T = 0$ K, men i praksis forskubber små, men trods alt endelige, koblinger imellem Cu-ioner i nabo-lag, faseovergangen til $T_N = 16,5$ K. I den ordnede tilstand for $T <$

T_N forbyder kvantefluktuationer den klassiske Néel grundtilstands-konfiguration hvor hvert spin $S = 1/2$ er antiparallelt med sine fire nærmeste naboer. I stedet eksisterer den klassiske orden i en superposition med andre konfigurationer, hvoraf nogle svarer til veldefinerede $S = 1$ spinbølger (a la dem vi så i den ferromagnetiske fase af $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{D}_2\text{O}$, figur 1a) i et nu antiferromagnetisk hav. Når en neutron spredes fra den klassiske del af grundtilstanden, kan den eksitere sådanne antiferromagnetiske spin-bølger (figur 3a,b), men når den spredes fra de kvantefluktuierende spin-bølger, der allerede er indeholdt i grundtilstanden, kan der derudover skabes en *to-spinbølge tilstand*. Analogt med situationen for spinon-par i $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{D}_2\text{O}$ har spinbølge-par i $\text{Cu}(\text{DCOO})_2 \cdot 4\text{D}_2\text{O}$ en ekstra energi-impuls kombinationsfrihed, hvorved man får et kontinuum af tilstande. Med polariserede neutroner lykkedes det os for første gang at skelne dette svage kvantekontinuum (figur 3e) fra de klassiske spin-bølger (figur 3d), og dermed direkte at påvise kvantefluktuierende spin-bølger i grundtilstanden.



Figur 2. Til venstre: I den monocline krystalstruktur af $\text{Cu}(\text{DCOO})_2 \cdot 4\text{D}_2\text{O}$ er Cu^{2+} -ioner adskilt langs a- og b-akserne af formatmolekyler, og langs c-aksen af molekyler af tungt vand. Til højre: $S=1/2$ -ionerne danner da antiferromagnetiske kvadratiske gitter, hvor den magnetiske kobling J mellem spin i samme lag er meget større end koblingen J_c mellem spin i forskellige lag. $\text{Cu}(\text{DCOO})_2 \cdot 4\text{D}_2\text{O}$ er derfor magnetisk to-dimensionel. Den viste spinstruktur svarer til den klassiske Néel tilstand, der som beskrevet i teksten ikke er hele sandheden om grundtilstanden.

Vore målinger på $\text{Cu}(\text{DCOO})_2 \cdot 4\text{D}_2\text{O}$ ledte også til en uventet opdagelse: Længs zone-grænsen, dvs. de Q -vektorer (røde stiplede linjer i figur 3a) hvor spinbølge dispersionen skulle have maksimal energi ifølge klassiske teorier, forsvinder neutronspretnings-intensiteten i de specielle punkter $Q = (\pi, 0)$ og $(0, \pi)$ (indikeret med blå stiplede linjer i figur 3c). I vores fortolkning afslører dette, at grundtilstands-superpositionen, udover Néel og spinbølge bidragene, også indeholder led, hvori hvert spin er parret med én af sine fire naboer i en såkaldt *singlet* tilstand (dvs. en kvantemekanisk superposition af de to 2-spin tilstande, hvor spin A og spin B er henholdsvis op-ned og ned-op), men hvor hver fordeling af disse singletter på det kvadratiske gitter er lige sandsynlig. I så fald har vi snuset til den første eksperimentielle observation af de såkaldte resonerende-valensbånd tilstande, som en af verdens førende teoretikere for 20 år siden foreslog som mekanismen bag høj-temperatur superledning.



Figur 3. Neutron-data fra $\text{Cu}(\text{DCOO})_2 \cdot 4\text{D}_2\text{O}$ for $T \ll T_N$ (N. B. Christensen, H. M. Rønnow et al., ikke publiceret). a) Illustration af dispersions-relationen $E(\mathbf{Q})$. b)-c) Intensitet for konstante energier 9 meV og 14,5 meV. Figur c) afslører manglende intensitet ved $(\pi, 0)$ og $(0, \pi)$ (stiplede blå bokse). d)-e) Henholdsvis klassisk spin-bølge og kvantekontinuum spredning omkring (π, π) adskilt med polariserede neutroner.

En rigdom af fænomener

Ovenfor har vi illustreret hvordan neutronspredning kan bruges til at udforske kvantefysikkens fundamentale konsekvenser ved at studere hvilke slags tilstande og eksitationer, der eksisterer i magnetiske materialer. Vore eksempler udtømmer langt fra den fascinerende rigdom af fænomener, man støder på inden for kvantemag-

netisme. Man kunne i stedet have nævnt materialer hvor de basale, svagt koblede byggesten ikke, som i vore eksempler, er kæder eller planer men derimod singletter. Disse opfører sig som bosoner, og kan derfor ved lave temperaturer udvise *Bose-Einstein kondensation*. Andre eksempler kunne have været de fundamentale forskelle mellem kæder af heltallige spins og kæder af halvtallige spins, spontant opstående spin-hvirvler, eller emergente spin-frihedsgrader i *frustrerede* spin-systemer, hvori et givet spin ikke samtidigt kan minimere vekselvirkningsenergiene med alle dets naboer. Det står under alle omstændigheder klart, at selv om Niels Bohr grundlagde kvantefysikken for ca. 100 år siden, er der stadig mange fænomener vi mangler fuldt at forstå, og fremtidens forskning i kvantemagnetisme vil med sikkerhed hive flere hemmeligheder op fra dybet.



Begge forfattere arbejder med studier af kvantemagnetisme ved hjælp af neutronspredning: *Henrik M. Rønnow*, til venstre, er tenure track professor ved École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz. *Niels B. Christensen*, til højre, er post. doc. i Afdelingen for Materialeforskning, Risø, og på Paul Scherrer Institutet i Schweiz.

CV på WC

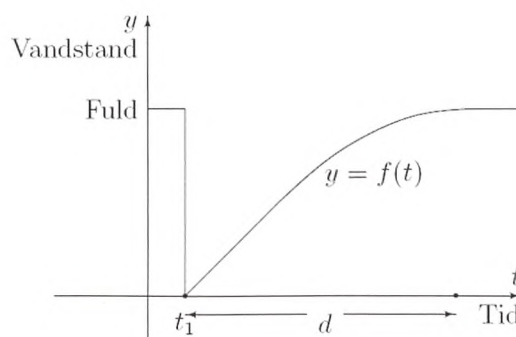
Af Mogens Esrom Larsen, Institut for Matematiske Fag, Københavns Universitet og KVANT

Enhver Gerning om end nok saa dagligdags, vil altid kunne afvindes en vis Interesse eller drives til en vis Fuldkommenhed; ... Fra Frøken Jensens Kogebog, Forordet, kaldet "Husførelsen" (7. Oplag, 1902).

Lad os iagttage vandstanden i en cisterne på et wc med henblik på en matematisk beskrivelse af dens adfærd. Den typiske hændelse er et pludseligt fald fra fuld til tom, efterfulgt af en fyldning, der begynder med tilstrømning af vand med en konstant hastighed, men slutter med en opbremsning forårsaget af en flyder, der kan lukke for tilstrømningen.

Tømningerne forekommer til forskellige tider, $t_1, t_2, \dots$ og fyldningen tager ialt tiden d . Tømningerne finder normalt først sted, når cisternen er fuld. Et typisk forløb er angivet på figur 1.

Tiderne for tømning er tilfældige i en eller anden forstand. En beskrivelse heraf kan ikke blive en forudsigelse af næste tømning, men de må forventes at blive styret af en eller anden sandsynlighed. Vi vil tænke os, at intervallerne $\Delta_i = t_{i+1} - t_i$ er fordelt med forskellige sandsynligheder, f.eks. sådan at de måske slet ikke forekommer mindre end d , og sådan, at lange intervaller er mindre sandsynlige end korte.

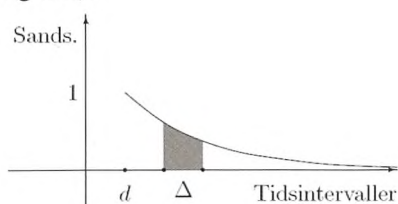


Figur 1. Figuren viser vandhøjden i cisternen som funktion af tiden. Til tiden t_1 tømmes cisternen, hvorefter påfyldningen starter. I begyndelsen med konstant hastighed, men efter en tid sker der en opbremsning forårsaget af en flyder.

En simpel mulighed for sådan en fordeling kunne være en fordeling med eksponentielt aftagende tæthedsfunktion. Hvis vi kalder sandsynligheden for en hændelse, H , for $P(H)$, kan vi f.eks. tænke os sandsynligheden for hændelsen, at tidsintervallet er mindre end en vis tid, T , er givet som følger:

$$P(\Delta \leq T) = \frac{1}{\lambda} \int_d^T e^{-\lambda(t-d)} dt \quad T \geq d$$

Funktionen under integraltegnet kalde *tætheden* for fordelingen. Den ser ud som en langsomt dalende rejse mod 0 (se figur 2).



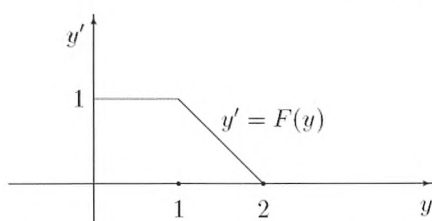
Figur 2. Tætheden beskriver sandsynligheden for tidsintervallerne, Δ_i , på den måde, at sandsynligheden for, at Δ_i ligger i et interval et sted på tidsaksen findes som arealet over dette interval under tætheden.

At korte intervaller har større hyppighed end lange, udtrykkes i folkevisdommen som den advarsel, at ulykker oftest kommer 3 ad gangen.

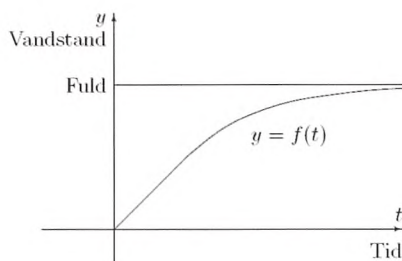
Men nu til den deterministiske del, påfyldningen. Det ser jo ud som om, hastigheden til dels afhænger af niveauet. I det mindste, når niveauet er kommet over et vist punkt. Sammenhængen mellem hastighed og niveau må kunne udtrykkes i en differentialligning af formen:

$$y' = \frac{dy}{dt} = F(y)$$

hvor $F(y)$ åbenbart er konstant for små værdier af y og nul når cisternen er helt fuld. Altså noget i denne retning:



Figur 3. Dette såkaldte fase-diagram udtrykker sammenhængen mellem påfyldningshastigheden, y' , og vandstanden, y .



Figur 4. Løsningen til differentialligningen når ikke til en fyldt cisterne i endelig tid, en forhåbentlig urealistisk model.

Men dette valg er ikke korrekt, thi denne ligning, der f.eks. er

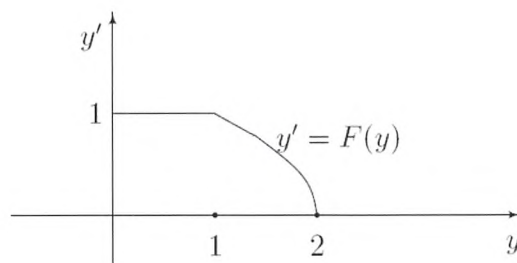
$$\frac{dy}{dt} = F(y) = \begin{cases} 1, & \text{for } 0 \leq y \leq 1, \\ 2 - y, & \text{for } 1 < y \leq 2, \end{cases}$$

har en løsning, der ser ud som grafen i figur 4.

Den analytiske løsning til eksemplet er jo:

$$y = \begin{cases} t, & \text{for } 0 \leq t \leq 1, \\ 2 - e^{1-t}, & \text{for } 1 < t. \end{cases}$$

Denne løsning er urealistisk, da den aldrig bliver færdig med at fylde cisternen. I virkelighedens verden bliver cisternen fuld i endelig tid, så løsningen ligner figuren ovenfor. For at dette skal blive tilfældet, må differentialligningen se noget anderledes ud. Den skal have lodret tangent i sit nulpunkt:



Figur 5. Et realistisk fase-diagram må have lodret tangent i sit nulpunkt for at løsningerne kan nå et niveau i endelig tid!

F.eks. kunne F være funktionen:

$$\frac{dy}{dt} = F(y) = \begin{cases} 1, & \text{for } 0 \leq y \leq 1, \\ \sqrt{2-y}, & \text{for } 1 < y \leq 2. \end{cases}$$

Den lodrette tangent betyder, at der ikke gælder entydighed for løsningerne. Alle ender i endelig tid med at tangere den singulære løsning, der er konstant lig med en fuld cisterne, som på den første figur (med $t_1 = 0$):

Løsningen til eksemplet er:

$$y = \begin{cases} t, & \text{for } 0 \leq t \leq 1, \\ 2 - \frac{(3-t)^2}{4}, & \text{for } 1 < t \leq 3, \\ 2, & \text{for } 3 < t. \end{cases}$$



Mogens Esrom Larsen er lektor i matematik på Københavns Universitet og har været redaktør ved Kvant siden starten.

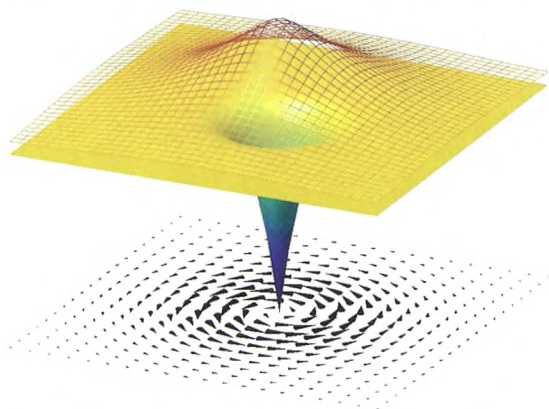
Kvantetornadoer i superledere studeret med neutroner

Af Asger Bech Abrahamsen, Afdelingen for Materialeforskning, Forskningscenter Risø, Danmarks Tekniske Universitet.

Et fundamentalt spørgsmål er, hvordan periodiske gitter påvirkes af punkt-uorden, og vortexgitteret i superledere er et interessant modelsystem, da gitteret består af rørformede superstrømhvirvler, som man kan ændre tætheden af ved at ændre det påtrykte magnetfelt. Urenheder eller defekter i en superlederkristal har tendens til at uordre vortexgitteret. Vi vil her illustrere hvordan det medfører forskellige glasfaser, som kan studeres med småvinkel-neutronspreddning. Fastholdelse af vortexgitteret på defekter har stor teknologisk betydning, da vortexlinier ellers bevæger sig under påvirkning af en strøm og giver anledning til tab, hvormed superlederen får en endelig elektrisk modstand. En teoretisk forudsigelse af, at den spredte neutron intensitet i Bragg glasfasen skal aftage, som en potensfunktion med afvigelsen fra optimal spredningsbetingelse, er blevet bekræftet eksperimentelt.

Fluks kvantisering i superledere

Mange faste stoffer bliver superledende ved lave temperaturer, fordi en tiltrækkende vekselvirkning mellem nogle af elektronerne får dem til at kondensere i en fælles grundtilstand. Ud over fraværet af elektrisk modstand har superlederkondensatet den egenskab, at det begynder at rotere, hvis det udsættes for et magnetfelt. Der kan i visse tilfælde opstå et tornado-lignende bevægelses-mønstre, som medfører en kvantisering af den magnetiske fluks. En sådan kvantetornado kaldes for en vortex. Figur 1 viser, at jo tættere man kommer på vortexkernen, jo hurtigere roterer det superledende kondensat, som består af elektron par. Disse par har dog en endelig bindingsenergi og rives fra hinanden inde i vortexkernen, som ikke er superledende. Pardannelsen er beskrevet i artiklen af Kim Lefmann på side 15.

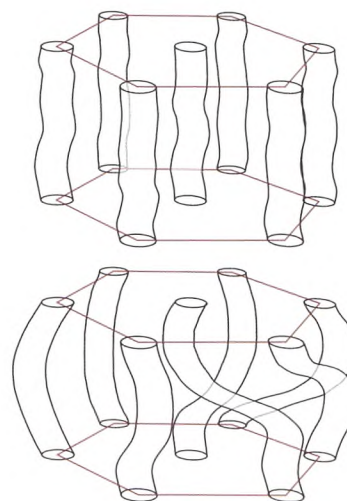


Figur 1. Vortexstrømmønstre (pile) af et superlederkondensat, hvor tætheden (flade) går mod nul i vortexkernen med en udstrækning givet ved koherenslængden ζ . Den magnetiske flukstæthed (net) falder af med indtrængningsdybden λ og den samlede fluks er givet ved flukskvantet $\Phi_0 = h/2e$. Vorteksmønstret eksisterer i superledere, hvor forholdet $\kappa = \lambda/\zeta > 1/\sqrt{2}$ og som påtrykkes et magnetfelt af en vis størrelse.

Pinning af vortexlinier

I en perfekt superlederkristal er en vortexlinie beskrevet ved en ret linie orienteret langs det påtrykte magnetfelt, men hvis der er urenheder eller defekter i krystallen, vil det være favorabelt at placere defekten inde i vortexkernen. Dette kan forklares ud fra superlederens

energigregnskab, hvor systemet vinder kondensations-energien ved at skabe den superledende tilstand, men taber energi ved at skabe den roterende superstrøm, flukskvantet og den ikke-superledende vortexkerne. Da en urenhed skaber et ikke-superledende område vil det koste mindre energi, at placere en vortexkerne ovenpå urenheden end i et område med fuld superledning. Vortexlinien fastholdes dermed af urenheden, som kaldes et pinningcenter og det kræver en vis kraft at trække vortexlinien fri. Når mange vortexlinier vekselvirker dannes et gitter (figur 2), som deformeres af pinning centrene, men på bekostning af elastisk energi.



Figur 2. Bragg glas fasen (top) eksisterer ved lav vortex-tæthed og pinningcentre medfører kun små forskydninger fra et middel vortexgitter. Hver enhedscelle indeholder en flukskvant og tætheden er derfor: $n = 1/A = B/\Phi_0$, hvor A er cellearealet og B den gennemsnitlige flukstæthed i cellen. Mellem $B = 0,2$ og $0,5$ Tesla varierer afstanden mellem to vortexlinier fra $a = 102$ nm til 64 nm. Ved høje vortextætheder (bund) opstår der fejl i gitteret og denne fase kaldes et amorf vortexglas [1].

Neutronspreddning på Bragg-glasfasen

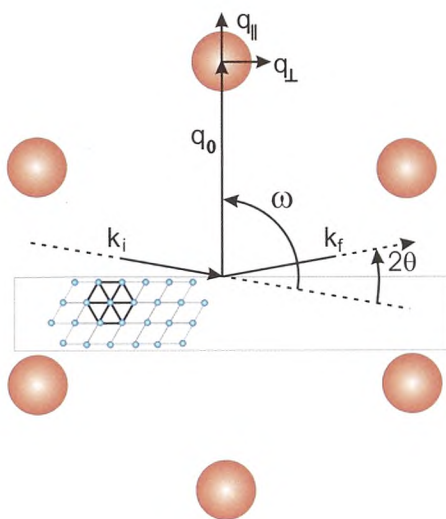
Den første teoretiske model for svag uorden i vortexgitter blev formuleret som et random-walk problem [2]. Udbredelsen af en random-walk er proportional med kvadratroden af antallet af skridt, man tager, og

i vortextilfældet vil udbredelsen repræsentere energi-gevinsten i et lille volumen, mens at antal skridt svarer til antallet af pinningcentre, som vortextlinierne går igennem. Ved at inkludere gitterperiodiciteten er det blevet forudsagt, at pinning ikke vil nedbryde vortextgitteret ved små vortextætheder, og at et middel gitter vil bestå, som vist på figur 2. Dette gitter vil kunne sprede neutroner, fordi neutroner har et magnetisk moment, og da spredningen er beskrevet ved Bragg's lov, kaldte man faseren for et Bragg glas. Ved højere vortextætheder opstår der defekter i gitteret, som så kaldes for et amorf vortextglas [1].

Diffractionsmønsteret af neutroner spredt på et vortextgitter er givet ved Fouriertransformationen af magnetfelt fordelingen i superlederen. Dette kan formuleres ved produktet af en formfaktor, der beskriver, hvordan en isoleret vortextlinie ser ud (net på figur 1) og en strukturfaktor, som beskriver, hvor vortextlinierne er placeret i prøven (se figur 2). Eksistensen af Bragg glasfasen blev indirekte eftervist ved hjælp af lavopløst småvinkel-neutronspreddning på vortextgitteret i (Ba,K)BiO₃ [3], men Bragg-glasset er forudsagt til at have en strukturfaktor, som kan måles direkte og er givet ved en potenslov:

$$s(q_{\perp}) \sim q_{\perp}^{-\alpha} \quad (1)$$

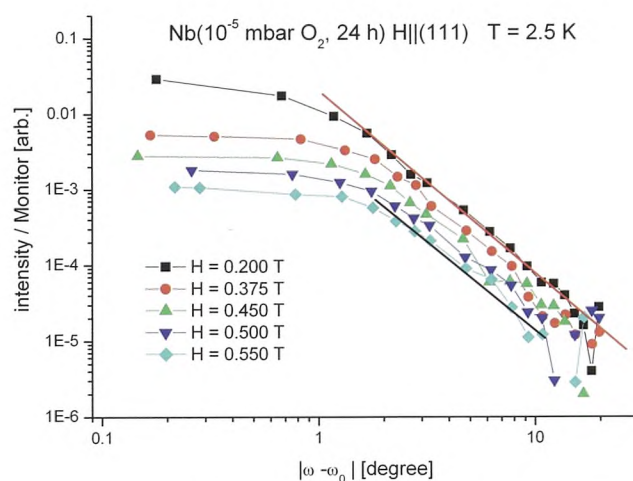
hvor vektoren $q_{\perp}$ afspejler orienteringskorrelationerne mellem vortextpar i gitteret og eksponenten α angiver hvor langtrækkende korrelationerne er [1].



Figur 3. Planer i vortextgitteret (blå) giver anledning til småvinkel neutronspreddning af den indkomne bølgevektor k_i med spredningsvinklen 2θ givet ved Bragg's lov: $\lambda = 2d \sin(\theta)$, hvor λ er bølglængden af neutronerne og d er afstanden mellem gitterplanerne. q_0 viser den reciproke vektor for de vandrette gitterplaner og Bragg spredningen opstår, når $q_0 = k_f - k_i$. Hvis afstanden mellem eller orienteringen af planerne varierer, bliver q_0 mere udbredt henholdsvis langs $q_{\parallel}$ og $q_{\perp}$. Man kan måle bredden langs $q_{\perp}$ ved at rotere krystallen vinklen ω i forhold til k_i . Intensiteten som funktion af ω kaldes en rokkekurve.

Figur 3 viser geometrien af et neutronspreddningseksperiment, som gør det muligt at måle strukturfaktoren med høj opløsning. Denne geometri blev realiseret ved at bygge en ny prøveholder til kryomagneten på Paul Scherrer Institutet (PSI, CH) [4]. Figur 4 viser rokkekurver af vortextgitteret i en Niobium énkrystalskive, hvor pinningcentre er blevet introduceret ved at diffundere ilt ind i krystallen. Intensiteten er vist på dobbeltlogaritmiske skalaer og den rette linie bekræfter, at strukturfaktoren falder af som en potensfunktion med $\alpha = 2,23$, der er noget større end forudsagt.

Målet med studierne af Bragg-glasfasen er at blive i stand til at identificere overgangen til vortext-glasfasen ved høje felter, da strukturfaktoren i de to faser har indflydelse på bestemmelsen af de karakteristiske længdeskalaer λ og ζ for superlederen. Denne overgang er dog ikke observeret endnu.



Figur 4. Rokkekurver af vortextgitter i en Niobium énkrystal med lille pinningcenter koncentration. De rette linier illustrerer, at strukturfaktoren af Bragg glas fasen er givet ved en potenslov som forudsagt, da $q_{\perp} = q_0 |\omega - \omega_0|$.

Litteratur

- [1] T. Giamarchi et. al. (1995), *Phys. Rev.* **B52**, 1242.
- [2] A.I. Larkin et. al. (1979), *J. Low Temp. Phys.* **34**, 409.
- [3] T. Klein et. al. (2001), *Nature* **413**, 404.
- [4] A.B. Abrahamsen et. al., Experimental report at PSI, <http://sinq.web.psi.ch/sinq/er/ii.04r.8.pdf>



Asger B. Abrahamsen er seniorforsker ved Afdelingen for Materialeforskning på Risø og arbejder med spredning af neutroner og røntgenfotoner på superledere, samt anvendelse af disse til energiteknologier.

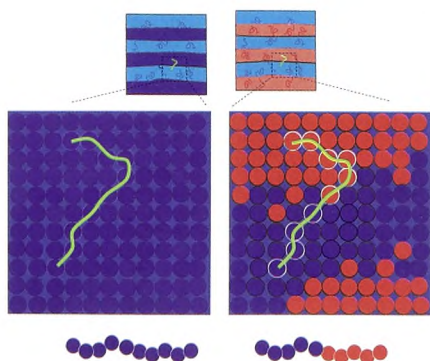
Neutroner og polymerer – Nanoteknologi

Af Martin E. Vigild, Institut for Kemiteknik, Danmarks Tekniske Universitet, Lyngby og Kell Mortensen Polymerafdelingen, Forskningscenter Risø, Danmarks Tekniske Universitet, Roskilde

Polymerer består af lange, kædeformede molekyler opbygget af et stort antal mindre molekyler, monomerer. Polymerer kan fremstilles, så de spontant selv-organiserer i domæner, der danner ordnede krystal-lignende strukturer med gitterlængde i nanometer-området. Småvinkel neutronspreddning er blandt de væsentligste teknikker, som anvendes til at studere og forstå disse materialer

Materialer baseret på polymerer findes overalt i vores dagligdag og spiller en afgørende rolle i det moderne samfund. Inde i et polymermateriale er molekylerne kun 1-10 nanometer i størrelse, men fordi molekylerne er lange og kædeformede, er de typisk voldsomt viklet ind i hinanden, som spaghetti i en pasta. Dette giver materialet helt specielle mekaniske egenskaber, med både væske- og faststofflignende karakter. Udover disse viskøelastiske egenskaber så kan polymerer fremstilles, så de spontant selv-organiserer i nano-størrelse aggregater. Da den karakteristiske længdeskala ligger i nanometer-området, er småvinkel neutronspreddning blandt de væsentligste teknikker til studie og forståelse af disse materialer.

Det er f.eks. muligt at syntetisere polymerer, hvor hvert enkelt molekyle er fremstillet af to forskellige monomerer, som udgør hver deres sektion (eller blok) af molekylet. Disse materialer kaldes blok-copolymerer. De udviser en lang række egenskaber som ikke blot gør dem særdeles attraktive til industrielle anvendelser, men også udgør store udfordringer for os som fysikere. Termoplastiske elastomerer baseret på blok copolymerer anvendes f.eks. til sålerne i sportssko.



Figur 1. Kontrasten for neutronspreddning øges, når brint selektivt skiftes ud med deuterium i den ene type monomer-molekyler i blok-copolymeren.

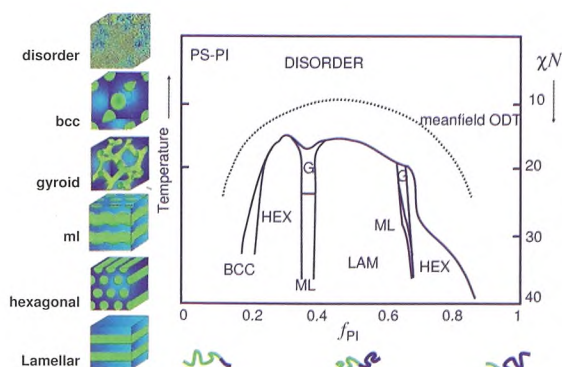
Længdeskala og kontrastfølsomhed

Både småvinkel røntgen- og neutronspreddning er metoder med den rette følsomhed indenfor længdeskalaer typiske for polymerer. Neutron spredning har imidlertid den uhyre store fordel frem for røntgenspreddning, at man – så at sige – kan farve specifikke dele af molekylerne og dermed gøre dem 'synlige' for spredningen. Det gøres ved at udskifte

brintatomer i udvalgte dele af molekylerne med tungbrint isotopen deuterium. Da de fleste polymerer typisk blot består af kulstof og brint, er der ikke meget kontrast for Røntgen stråler mellem to forskellige polymerer. Men ved at erstatte nogle brint (H) med deuterium (D) opnås der stor kontrast for neutroner. Figur 1 illustrerer dette for en lammellar nanostruktur. Her har den ene bloks (lyseblå) monomerer, som oprindeligt indeholdt H-atomer, fået ombyttet disse med D-atomer og er blevet til 'røde' monomerer. Dette giver en meget bedre synlighed i forhold til den anden halvdel af molekylet, som består af 'mørkeblå' monomerer.

Faseopførsel

Småvinkel neutronspreddning (Engelsk: Small Angle Neutron Scattering, SANS) benyttes til studier af strukturelle forhold af såvel termodynamisk stabile faser som af transiente strukturer og egenskaber, der kan være af stor betydning i polymerer.



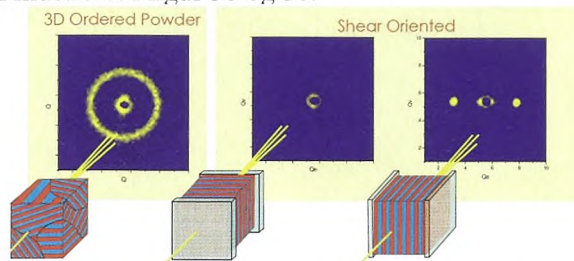
Figur 2. Fasediagram for polystyren-polyisopren (PS-PI) diblok-copolymerer, med mikrofaseadskillelse i mikroskopiske strukturer som: rumcentreret kubisk (BCC), heksagonalt ordnede cylindre (HEX), lamellært ordnede lag (LAM), samt de komplekse faser af modulerede lameller (ML) og den gyroide struktur (G). Temperaturen er omvendt proportional med vekselvirkningsenergien beskrevet ved produktet af molekulmassen N og vekselvirkningsparameteren χ . Det skal bemærkes at hver 'komposition' svarer til syntese af en given polymer med specifik masse og 'koncentration' [1].

Figur 2 viser fasediagrammet for et diblok-copolymermateriale af polystyren og polyisopren, som er fundet ved studier med SANS [1]. For tilpas små molekyler og høj temperatur vil blokkene være blandbare og derfor danne en isotrop 'uordnet' tilstand.

Når de to typer af blokke i polymeren ikke er blandbare, vil de forsøge at udskille sig i to faser, men på grund af den kovalente binding mellem blokkene er dette ikke muligt. Faseadskillelsen sker derfor på det molekulære niveau, dvs. længdeskala 10-100 nm. 'Mikro-fase adskillelse' i domæner er af 1. orden og giver anledning til regulære 'ordnede' krystalstrukturer på det mesoskopiske niveau. På det molekulære niveau, derimod, er materialet stadig amorf!

Ensretning af morfologi med felter

Uden speciel behandling af polymermaterialet vil de ordnede strukturer danne forholdsvis små ordnede domæner med tilfældig orientering. I et spredningseksperiment vil vi derfor observere isotrope Debye-Scherrer cirkler på detektoren, som illustreret i figur 3a. Hvis polymeren imidlertid udsættes for blot et simpelt forskydningsfelt vil den typisk omdannes til at have en tekstur af kun et enkelt eller ganske få domæner. Spredningsbilledet er derfor ikke længere en simpel ring, men vil, afhængig af hvorledes neutronstrålerne rammer prøven, give veldefinerede Bragg refleksioner, som illustreret i figur 3b og 3c.



Figur 3. Krystallografi på en lamellært struktureret PS-PI diblok-copolymer. a: Debye-Scherrer spredning fra krystallinsk pulver. b og c: Spredning fra en felt-orienteret monodomæne prøve [2].

Polymerer udsat for forskydningsfelter har ikke kun akademisk interesse. Polymerprodukter er typisk udsat for forskellige former for forskydningsfelter såvel under processering som ved anvendelse. Eksperimentelle studier med påtrykt forskydningsfelt udføres normalt i reologiske instrumenter indsat i neutronstrålen, hvorved samhörørende struktur og mekaniske parametre kan måles. Manipulation af tekturen af de forskellige morfologier er et vigtigt værktøj for praktisk udnyttelse af blok copolymeres nanostrukturer.

Nanoteknologiske anvendelser

Som nævnt så er sålerne i sportssko lavet af et materiale hvor de nanostrukturerede polymerdomæner er essentielle for funktionen. Ligeledes findes der copolymerer i plastre og sårplejeprodukter, som ved sin nanostruktur giver den rette adhæsion og fleksibilitet. Derudover er der mange ideer til fremtidige anvendelser af nanostrukturen i blok-copolymerer. Man kan f.eks. fjerne den ene blok efter selvorganisering [3]. Derved opnås veldefinerede nano-porøse materialer, som kan bruges til membraner, til katalyse eller til nanoreaktorer. Porøsiteten kan også bruges som litografisk skabelon til at lave nano-mønstre eller til at opmagasinere aktive molekyler, som afgives med kontrolleret hastighed.

Dette er særdeles attraktiv indenfor medicinbehandling. Således kan neutron-forskning af nanoskopiske materialer danne grundlaget for meget spændende nanoteknologi.

Litteratur

- [1] A.K. Khandpur, S. Forster, F.S. Bates, I.W. Hamley, A.J. Ryan, W. Bras, K. Almdal, K. Mortensen (1995), *Macromolecules* **28**, 8796.
- [2] R. Eskimergen, M. Vigild, K. Mortensen (2005), *Macromolecules* **38**, 1286.
- [3] S. Ndoni, M.E. Vigild, R.H. Berg (2003), *J. American Chem. Soc.* **125**, 13366.



Martin E. Vigild, lektor Dansk Polymercenter, Institut for Kemiteknik, DTU. Interesserer sig for strukturerede systemer i polymermaterialer og deres mulige anvendelser. Benytter blandt andet småvinkel neutronspreddning, småvinkel røntgenspreddning og elektronmikroskopi i sin forskning. Driver forskningssamarbejde med danske og udenlandske virksomheder.



Kell Mortensen har stået for opbygningen af og forskningen ved småvinkel neutronsprednings (SANS) apparaturet ved forskningsreaktoren DR3 på Risø indtil DR3's lukning, hvor apparaturet blev flyttet til PSI i Svejs. Han har arbejdet indenfor en række strukturelle områder, fra flux-linie gitter i superledende materialer til nanoskalastrukturer i bløde stoffer og er nu leder af biofysikgruppen på LIFE ved Københavns Universitet.

Månen i farver

De fleste mennesker opfatter Månen som farveløs eller grå. Men på denne farveoptagelse fra d. 3. april er de svage farveforskelle, som skyldes forskelle i geologien, forstærket: Blå områder er rige på titanium (og titaniumoxid) – her vil fremtidige samfund måske udvinde ilt; orange viser aluminium og jern, mens nedslagsområder er hvide, idet materiale fra undergrunden er slynget op. Galilei rumsonden har fotograferet Månen med et lignende resultat. For flere detaljer, se: <http://www.perseus.gr/Astro-Lunar-Scenes-False-Colour.htm>



Foto: Anthony Ayiomamitis, Grækenland.

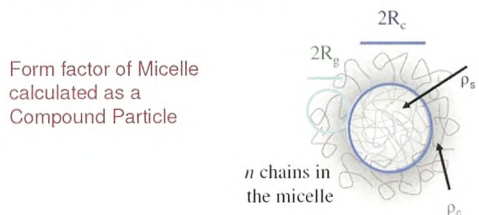
Bløde materialer studeret med småvinkelspredning

Af Kell Mortensen, Forskningscenter Risø, DTU, Roskilde og Jan Skov Pedersen, Kemisk Institut og iNANO, Aarhus Universitet, Århus

Småvinkelspredning af røntgen- (SAXS) og neutronstråling (SANS) er blandt de væsentligste teknikker til eksperimentelle strukturelle studier af bløde materialer, såsom polymerer, biomolekyler og kolloider. De typiske dimensioner, som kan undersøges med SAXS og SANS er fra 10 til 1000 Å, det vil sige indenfor nanometer skalaområdet. SAXS og SANS kan derimod ikke give information på atomar længdeskala.

Røntgenkilder er normalt mange størrelsesordener mere intense end neutronkilder. Det gælder ikke blot røntgenstråling fra synkrotronfaciliteter, men også typiske laboratoriekilder. Dette betyder, at højkvalitets SAXS data normalt let kan optages på et laboratorieinstrument. Til gengæld har neutronspredning den helt unikke fordel, at spredningen fra forskellige isotoper af samme atom kan være meget forskellig. Det er den for de to hydrogenisotoper ^1H , og tung-hydrogen isotopen deuterium, ^2H . De to isotoper betegnes ofte henholdsvis blot H og D. Ved kemisk substitution af givne hydrogenatomer i en prøve med deuterium er det dermed muligt at fremhæve specifikke dele af strukturen uden at ændre systemets kemi og fysiske vekselvirkninger væsentligt.

For optimal udnyttelse af H/D-udveksling er det klart, at mange SANS studier involverer store syntese udfordringer, hvor hydrogen erstattes af deuterium på specifikke molekyllære positioner. En mere enkel *contrast variation* kan opnås ved at variere solventet som partiklerne er opløst i. I vandige opløsninger måles da i en række $\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$ -blandinger.



$$F_{\text{mic}}(q) = n^2 \rho_s^2 F_s(q) + n \rho_c^2 F_c(q) + n(n-1) \rho_c^2 S_{cc}(q) + 2n^2 \rho_s \rho_c S_{sc}(q)$$

with

$$F_s(q) = 2 \pi^2 (e^{-x} + x - 1), \quad x = (q R_g)^2$$

$$F_c(q) = [3(q R_c)^{-3} \{\sin(q R_c) - q R_c \cos(q R_c)\}]^2 = \Phi_s^2$$

$$S_{cc}(q) = \Phi_s x^{-1} (1 - e^{-x}) \sin(q R_c) / q R_c$$

$$S_{sc}(q) = x^{-2} (1 - e^{-x})^2 [\sin(q R_c) / (q R_c)]^2$$

Figur 1. Formfaktoren af en micelle udtrykt som sammensat af fast kerne omgivet af polymerkæder [2].

Spredningsteori

For opløsninger kan udtrykket for spredningsintensiteten med god tilnærmelse reduceres til

$$I(Q) = n(\Delta\rho)^2 V^2 P(Q) S(Q) \quad (1)$$

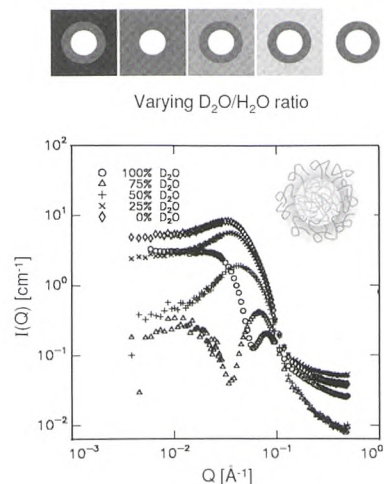
hvor n er antal partikler, V er volumen af en partikel, $\Delta\rho$ er spredningskontrasten og Q er spredningsvektoren, som er proportional med sinus til spredningsvinklen. Form faktoren $P(Q)$ er givet ved partiklernes

geometriske form, mens $S(Q)$ angiver korrelationerne mellem forskellige partikler. For meget lave koncentrationer er $S(Q) = 1$.

$P(Q)$ kan kun for simple geometriske former udtrykkes ved analytiske matematiske udtryk [1]. Mere generelt må man benytte numeriske metoder til analyse af strukturen, eller modellere strukturen som *sammensat* af simple former. Modellen i figur 1 formulerer således formfaktoren for en polymer micelle som sammensat af kugler og ideelle kæder [2].

Eksempel: PEO-PPO-PEO blok copolymerer i vand

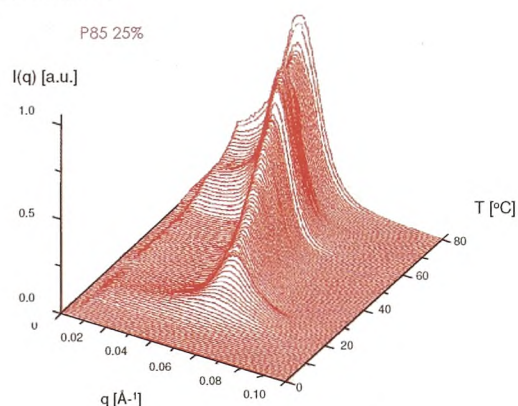
For at anskueliggøre typiske anvendelser af småvinkelspredning, gennemgås her et eksempel baseret på vandige opløsninger af blok copolymerer. Disse polymerkæder består af to eller flere *blokke* bestående af hver deres monomermolekyler. Blok copolymeren, som benyttes i dette eksempel, betegnes PEO-PPO-PEO, og består af en central poly(propylenoxid)-kæde (PPO) omgivet af to poly(etylenoxid)-kæder (PEO) i hver ende. Vandige systemer af PEO-PPO-PEO har en lang række egenskaber, der gør systemet velegnet som eksempel for anvendelse af småvinkelspredning på bløde materialer: Afhængigt af koncentration og temperatur kan de beskrives som uafhængige *random walk* polymerkæder, som miceller med sfærisk eller cylinderformet struktur, samt svagt eller stærkt korrelerede miceller.



Figur 2. a) Skematisk fremstilling af hvordan neutronerne ser miceller ved forskellige $\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$ -blandinger. b) Eksperimentelle data af PEO-dPPO-PEO miceller målt ved forskelligt $\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$ vand-forhold.

Figur 2 viser et eksempel på et *kontrastvariations-* studie af miceller i vandig opløsning, hvor forskellige D_2O/H_2O -blandinger er anvendt. Figur 2a skitserer med gråtoneskala kontrasten for neutroner, dvs. hvordan neutronerne 'ser' micellerne. I illustration nr. 2 har vandfasen og den ydre micelle-skal samme 'gråtoning', og neutronstrålen 'ser' kun kernen. Tilsvarende gælder i illustration nr. 5, at det kun er skallen som ses.

Kontrastvariation er således en uhyre vigtig metode til strukturelle studier ved brug af neutronspreddning. Da SAXS kontrasten er givet ved forskelle i elektrontætheder, kan den være meget forskellig fra SANS kontrasten. Derfor kan udnyttelse af kombineret SANS og SAXS samlet give langt større information end den enkelte teknik.

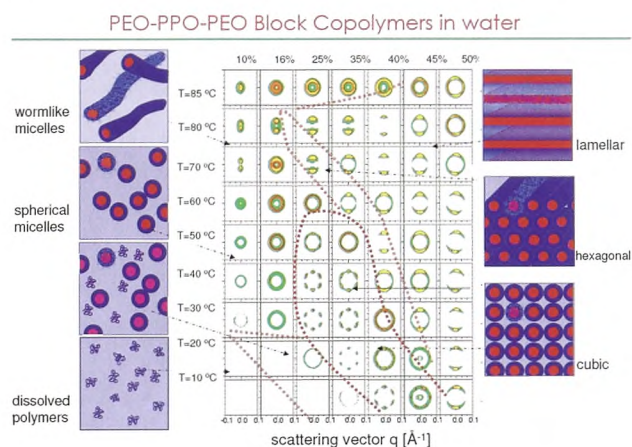


Figur 3. Eksperimentelle SANS data af en 25 % opløsning af PEO-PPO-PEO copolymerer i D_2O , målt som funktion af temperatur [3].

Figur 3 viser SANS data fra et system af PEO-PPO-PEO i tungt vand [3]. Bemærk at spredningen vokser med temperatur. Fra ligning 1 kan vi konkludere en temperatur induceret aggregering. Årsagen til denne aggregering er, at PPO bliver mere hydrofob med temperaturen, og derfor ønsker at undgå kontakt til vandfasen. Det opnås ved at danne miceller med PPO i kernen, og de hydrofile PEO blokke i grænsen til vandfasen. Et andet forhold, som karakteriserer spredningen vist i Figur 3, er, at der udvikles en karakteristisk top, hvilket fortæller at micellerne ved de højere temperaturer vekselvirker stærkt. Det skyldes primært at micelle koncentrationen øges. Mere detaljerede analyser viser, at micellerne effektivt vekselvirker som hårde kugler [3]. Derfor ses også såkaldt 'hård-kugle' krystallisation, når volumenfraktionen når den kritiske værdi på 0,47 [4]. Krystallisationen ses i Figur 3 som en svag ændring af top bredden ved 25 °C.

Ordne strukturer visualiseres imidlertid meget tydeligere, hvis materialet udsættes for et forskydningsfelt. Det krystallinske pulver af miceller omdannes da til en tekstur bestående af få domæner. Figur 4 viser spredningsdata på vandige opløsninger af PEO-PPO-PEO målt ved forskellige temperaturer og koncentrationer [4]. Diagrammet viser et righoldigt fasediagram for disse prøver, med faser bestående af polymerer i opløsning (lav-koncentration, lav-temperatur hjørnet),

micelle 'gas' fase med sfæriske miceller ved mellemtemperaturer og aflange miceller ved høje temperaturer, samt krystallinske micelle faser, inklusive kubisk, hexagonal og lamelle faser ved høje koncentrationer.



Figur 4. To-dimensionale spredningsdata af vandige systemer af PEO-PPO-PEO blok copolymerer, målt afhængig af temperatur og polymerkoncentration [4].

Litteratur

- [1] J.S. Pedersen (1997), *Adv. Interface and Colloid Sci.* **70**, 171.
- [2] J.S. Pedersen, M.C. Gerstenberg (1996), *Macromolecules* **29**, 1363; J.S. Pedersen, M.C. Gerstenberg (2003), *Colloids and Surfaces A* **213**, 175.
- [3] K. Mortensen, J.S. Pedersen (1993), *Macromolecules* **26**, 805.
- [4] K. Mortensen (1996), *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, A103.



Kell Mortensen har stået for opbygningen af og forskningen ved småvinkelneutronsprednings (SANS) apparaturet ved forskningsreaktoren DR3 på Risø indtil DR3's lukning, hvor apparaturet blev flyttet til PSI i Svejts. Han har arbejdet indenfor en række strukturelle områder, fra flux-linie gitte i superledende materialer til nanoskalastrukturer i bløde stoffer og er nu leder af biofysikgruppen på LIFE ved Københavns Universitet.



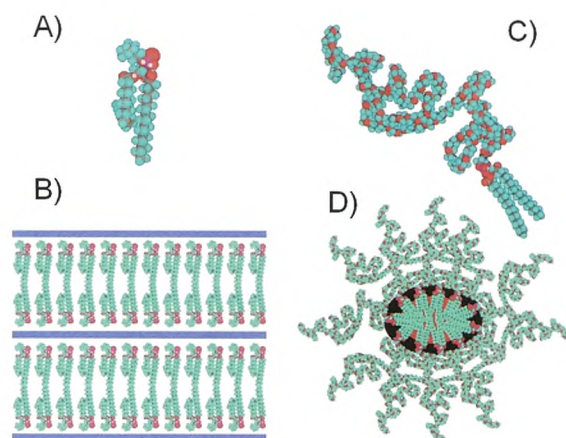
Jan Skov Pedersen, dr. scient., professor i Fysisk kemi, Kemisk Institut, Aarhus Universitet, tilknyttet iNANO Centeret. Beskæftiger sig fortrinsvis med strukturelle undersøgelser af nano-strukturerede materialer.

Neutron- og røntgenanalyse af “drug delivery” partikler

Af Lise Arleth, Biofysikgruppen, Institut for Grundvidenskab, Det Biovidenskabelige Fakultet, Københavns Universitet

Hvis medicin kunne indgives kontrolleret i de organer, hvor der er brug for den, og på en måde så den ikke samtidig bliver spredt ud i de raske organer, ville det være muligt at behandle en lang række sygdomme bedre og med færre bivirkninger. Der eksisterer f.eks. adskillige cellegifte, som har stort potentiale i forhold til kræftbehandling, men som man ikke tør bruge i praksis, fordi de har for store bivirkninger i de raske organer. Der forskes derfor intensivt i såkaldte “drug delivery” systemer. Det ideelle drug delivery system kan for eksempel være en lille kapsel, der holder medicinen indkapslet, så længe kapslen bevæger sig rundt i blodbanerne, og først lukker medicinen ud når den er kommet hen til den del af kroppen, hvor den skal virke. Denne artikel beskriver, hvordan en kombination af neutron- og røntgenstråling kan benyttes, når sådanne partikler skal udvikles.

For at “drug delivery” kapsler kan trænge ind i sygt væv, skal kapslerne helst have en størrelse på mellem 10 og 100 nanometer. Større kapsler kan ikke trænge ordenligt ind i de mikroskopiske blodkar i det væv, hvor de skal virke. Mindre kapsler trænger fint ind, men siver næsten lige så hurtigt ud igen. Hvis man kender den typiske diameter af blodkarrene i vævet, der skal behandles, kan man udregne den optimale størrelse af sin “drug delivery” kapsel.

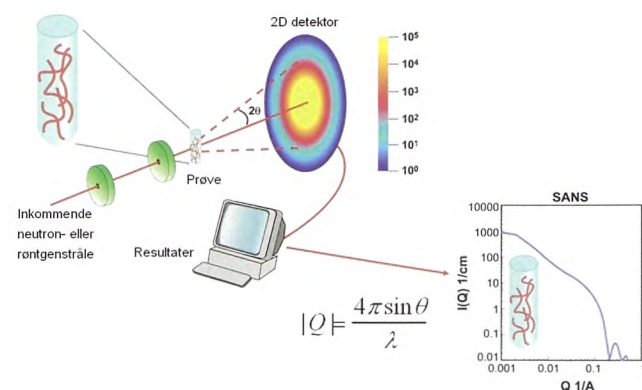


Figur 1. A) Fosforlipid molekyle B) Stakke af fosforlipid-dobbeltlag C) PEGyleret fosforlipid D) PEGyleret fosforlipid-micelle. Når man PEGylerer molekyler, binder man kemisk en PEG (Polyethylenglycol) på molekylet. I eksemplet i figur 1C og D er der bundet en PEG kæde med en molmasse på 5000 g/mol på hvert fosforlipid molekyle.

Figur 1D viser et eksempel på en partikel, der er blevet foreslået som drug delivery indkapsling af fedtopløselige typer af medicin. Partiklen består af såkaldt PEGylerede fosforlipider. Fosforlipider (figur 1A) er de grundlæggende byggesten i cellemembraner. De er som regel stavformede og består af et “hoved”, som er vandelskende (hydrofilt), og to “ben” som er vandskyende (hydrofobe). Den lagdelte struktur (figur 1B), der er karakteristisk for en cellemembran opfylder disse to modsatrettede “ønsker” fra molekylet: Hydrofile hoveder er omgivet af vand eller andre hydrofile hoveder, mens hydrofobe haler er omgivet af andre hydrofobe haler. Det at fosforlipidmolekylet overordnet

set er stavformet gør, at den flade membranstruktur bliver favoriseret og at fosforlipid molekyler opløst i vand mere eller mindre spontant vil selvorganisere sig i stakke af flade membraner, hvor hvert membran-dobbeltlag har en tykkelse på ca. 5 nm.

Ved syntetisk at fastgøre en lang og pladskrævende polymerkæde, f.eks. en PEG kæde, i fosforlipidens hydrofile hoved (figur 1C) kan man favorisere andre pakningsgeometrier. Hvis man fastgør en tilpas lang PEG-kæde, vil man i teorien favorisere den næsten runde micelleform, der er vist i figur 1D. Det betyder at vandopløste PEGylerede fosforlipider spontant vil selvorganisere sig i runde miceller, der hver især er omgivet af en PEG-korona, som beskytter micellerne mod at blive nedbrudt i blodbanerne.

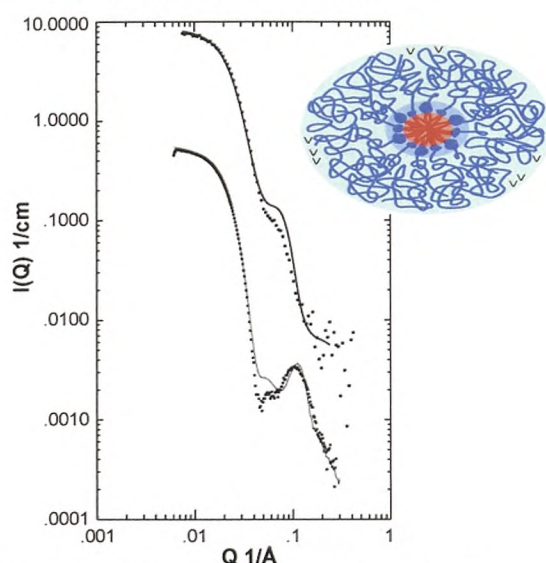


Figur 2. Den eksperimentelle opstilling, der benyttes i et småvinkelspredningseksperiment.

Et er teori, men et andet er praksis. For at kontrollere om ens drug delivery kapsler nu også har den ønskede form og størrelse, har man brug for en målemetode, der kan give strukturel information på den relevante længdeskala. Det er småvinkelspredning (small-angle scattering) ideel til. I et småvinkelspredningseksperiment (figur 2) sendes en smal stråle af røntgenfotoner eller neutroner igennem et måleglas indeholdende den prøve, som man vil undersøge. Det mønster, den *spredte* stråling danner i små vinkler omkring den upåvirkede del af strålen, kaldes

småvinkelspredningen. Småvinkelspredningen afspejler prøvens struktur på en længdeskala af 1-100 nm, som er den relevante længdeskala til studier af drug delivery partikler.

Hvis man har en vandig "opløsning" af PEGylerede miceller, som vist i figur 1D, vil man have en masse miceller orienteret i alle retninger. Dette betyder at det dannede spredningsmønster bliver centrosymmetrisk, sådan at man kan repræsentere al informationen i det målte datasæt ved intensiteten af den målte spredning som funktion af spredningsvinklen θ . I praksis viser det sig, at være smartest at repræsentere spredningsintensiteten som funktion af den såkaldte Q -værdi, hvor Q beregnes ud fra bølgelængden, λ , af den indkommende stråle og spredningsvinklen θ (se figur 2).



Figur 3. SAXS (nederst) og SANS (øverst) data på den samme prøve bestående af PEGylerede miceller i vandig opløsning. Eksperimentelle data (punkter) med modelfit.

Som nævnt kan et småvinkelspredningseksperiment foretages både med røntgen- (Small-angle X-ray Scattering, SAXS) og neutronstråling (Small-angle neutron scattering, SANS). Der opnås forskellige kontraster for billeddannelsen med de to metoder. Neutronerne vekselvirker med atomkernerne og i praksis træder de hydrogen (^1H)-rige dele af stoffet tydeligst frem i et SANS eksperiment. Opløses de PEGylerede miceller i tungt vand (D_2O), vil de hydrogenrige miceller, incl. PEG-koronaen, derfor fremtræde meget tydeligt. Omvendt vekselvirker røntgenstrålingen med elektronerne i stoffet og SAXS data afspejler stoffets elektrontæthedsfluktuationer, som igen omtrent svarer til massetæthedsfluktuationerne. I en SAXS måling af en PEGyleret micelle set på en "baggrund" af vand, vil man først og fremmest få information om micellens olielignende indre, som har en masse- og elektrontæthed, der er ca. 20 % lavere end det vand micellen er opløst i, samt om det omgivende lag af fosfolipid hovedgrupper, der har en masse- og elektrontæthed, der er ca. 20 % højere end vandets. Den omgivende PEG corona har omtrent samme masse- og elektrontæthed som vand og bliver derfor stortset usynlig i SAXS målingen. Så mens SANS eksperimentet viser os den PEGylerede micelle i

sin helhed, men uden at give detaljerede information om micellens indre, viser SAXS eksperimentet os, hvordan micellens indre ser ud, men uden at give megen information om PEG-koronaen. Ved at kombinere SANS og SAXS data fra den samme prøve, får man det bedste fra begge verdener, og man kan bestemme sine micellers struktur i meget stor detalje. I figur 3 er vist et eksempel, hvor en modelbaseret analyse af de opnåede SAXS og SANS data afslørede, at de PEGylerede miceller var svagt oblate. Analysen gav derudover en mængde meget detaljeret information om størrelse og form af den hydrofobe kerne, den hydrofile skal og den omgivende PEG-korona [1]. Tilsvarende studier af miceller, der var ladet med små hydrofobe medicinmolekyler, viste hvordan micelleformen blev påvirket af medicinladningen og i sidste ende også, at de PEGylerede miceller var særdeles velegnede som drug delivery partikler [2].

Litteratur

- [1] L. Arleth, B. Ashok, H. Onyukel, P. Thiyagarajan, J. Jacob, and R. Hjelm (2005), Detailed structure of hairy mixed micelles formed by phosphatidylcholine and PEGylated phospholipids in aqueous media, *Langmuir*, **21** (8), 3279-3290.
- [2] B. Ashok, L. Arleth, R. Hjelm, I. Rubinstein and H. Onyukel (2004), In vitro characterization of PEGylated phospholipid micelles for improved drug solubilization: Effects of PEG chain length and PC incorporation, *J. Pharm. Sci.* **93** (10), 2476-2487.



Lise Arleth er lektor i biofysik ved Institut for Grundvidenskab, Life Science Fakultetet på Københavns Universitet. Hun forsker i struktur og vekselvirkninger af biomolekyler i opløsning. De primære måleteknikker er småvinkel neutronspredning (SANS) og småvinkel Røntgenspredning (SAXS) samt lysspredning (DLS og SLS).

Gymnasieelever til fysikolympiade i Iran

Den 23. april 2007 skete den endelige udtagelse af det hold, som skal repræsentere Danmark ved den internationale fysikolympiade i Isfahan, Iran d. 13.-22. juli 2007.



Billedet viser holdet (fra venstre mod højre): Troels Irgens Møller, Støvring Gymnasium, Martin Elvers, Hamlet HTX Hillerød, Ida Marie Heerfordt, Marie Kruses Skole, Mads Bertelsen, Tårnby Gymnasium og Christian Ebbesen, Hasseri Gymnasium.

Neutronrefleksioner

Af Beate Klösgen, Institut for Fysik og Kemi, Syddansk Universitet, Odense og Kaspar Hewitt Klenø, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet

“Olie er vandafvisende”: de farverige overflader på vandpytter, giver synligt bevis for dette dagligdags fænomen. På samme måde kan stråler af neutroner, i stedet for lysstråler, bruges til at undersøge egenskaberne af meget tynde overfladelag. I det følgende vil vi fortælle om princippet ved neutronrefleksioner, og give eksempler på deres anvendelse.

Refleksion fra gennemsigtige overflader

Alle har oplevet irriterende refleksioner fra vinduesglas: Selv når man kigger vinkelret ind gennem et glasvindue, vil ca. 8 % af lyset blive reflekteret tilbage mod en, i stedet for at passere igennem. Figur 1 viser et billede taget af den ene forfatter, da hun kiggede ind i et museum ude fra gaden: Refleksionerne fra gaden overlapper med det transmitterede lys inde fra museet i en grad, så udstillingen næsten ikke kan ses. Den franske fysiker Fresnel (1788-1828) lavede et grundigt studium af lysets refraction vs. refleksion. Han kogte sine opdagelser ned til et, stadig gyldigt, sæt af ligninger, som beskriver graden af refleksion og transmission for en elektromagnetisk bølge som funktion af indfaldsvinklen, når den overgår mellem to medier med forskellige refraktionsindeks.



Figur 1. Transmitteret lys indefra et museum, blandet med refleksioner fra gadebilledet i et udstillingsvindue.

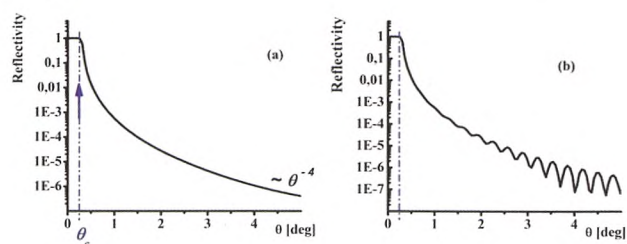
Et særligt tilfælde er totalrefleksion, som opstår, når lys bevæger sig fra et medie med høj densitet (n_{high}), til et med lav densitet (n_{low}) (f.eks. fra vand til luft); alt lys, som rammer overfladen med en vinkel mindre end den kritiske vinkel θ_c bliver reflekteret, og intet lys slipper igennem.

Moderne fysik har udvidet vores forståelse af optik, og har indlemmet lysets påvirkning af partikelbølger i den.

Når neutroner rammer en overflade

I 1924 postulerede De Broglie, at stof, som bevæger sig med høj hastighed, kan opfattes som en bølge, hvor bølgelængden $\lambda = h/(mv)$ er givet ved partiklens masse m , dens hastighed v og Plancks konstant h . Siden da har talrige eksperimenter givet beviser på denne såkaldte bølge/partikel-dualitet. På samme måde kan stråler af neutroner også opfattes som bølger: de har

typiske optiske egenskaber, som interferens, refleksion og diffraktion. Figur 2a viser et eksempel på refleksiviteten af en neutronbølge, med bølgelængde $\lambda = 4,6 \text{ \AA}$, som rammer en overflade mellem silicium og vand. Den kritiske vinkel, $\theta_c = \arcsin(n_{low}/n_{high})$, er meget lav sammenlignet med, hvad den ville være for en lysstråle.



Figur 2. a, venstre: for vinkler mindre end θ_c sker der total intern refleksion. Over θ_c falder intensiteten af den reflekterede stråle som θ^{-4} . b, højre: Et midterlag resulterer i en oscillerende, aftagende intensitet.

Neutroner afslører tynde lag mellem medier

De mange farver i olieforurenede vandpytter (se figur 3) skyldes interferens fra lys, som bliver delvist reflekteret fra toppen af olielaget, men også delvist går igennem olien, for så at blive reflekteret i overgangen fra olie til vand, da den lettere olie vil lægge sig som et tyndt lag ovenpå vandet. Der er en lille forskel i hvor langt de to lysstråler skal bevæge sig, hvilket svarer til et faseskift, som belyst med hvidt lys, medfører de farverige kanter. Det er muligt at analysere detaljerne i farvemønstret og på den måde beregne tykkelsen af olielaget. Under monokromatisk lys ses kanterne som en forskel i lysintensiteten. Men brugen af synligt lys har den begrænsning, at det ikke kan bruges til at undersøge lag, som er tyndere end lysets bølgelængde.



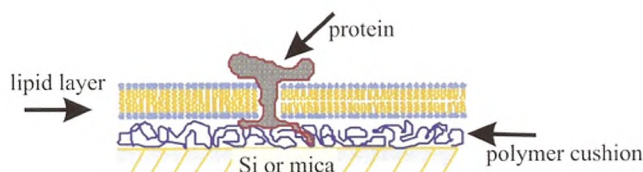
Figur 3. Olie, som flyder på en vandpyt, danner et tyndt mellemlag i overfladen mellem vand og luft.

I de tilfælde kommer den korte bølgelængde af "partikellys" én til undsætning: En neutronstråle med en bølgelængde på ca. 5-10 Å gør det muligt at studere lag med tykkelser i nanometer-området.

En simpel eksperimentel fremgangsmåde for at undersøge sådanne lag er at placere sine prøver i et tyndt lag på overfladen af en siliciumskive, parallelt med en neutronstråle. Så drejer man kontinuert prøven, så beamet rammer skiven nedefra under en meget lille vinkel. Da siliciumskiven typisk har en højere densitet end laget, opfyldes de optiske betingelser for totalrefleksion, så hele neutronstrålen bliver reflekteret fra overfladen. Kun når indfaldsvinklen bliver større end den kritiske vinkel, falder intensiteten af den reflekterede stråle. Pga. det tynde lag på overfladen af prøven, er det en anderledes situation end den i figur 2a, da vi her også vil have, at en del af strålen bliver reflekteret fra overfladen på undersiden af det tynde lag. De reflekterede stråler fra over- og undersiden af laget, interfererer med hinanden og giver, som funktion af indfaldsvinklen, et såkaldt Kiessig-mønster, som er vist i figur 2b. Essentielt er det det samme intensitetshenfald, som man ser i 2a med nogle forstyrrelser fra det tynde lag. Ud fra det præcise mønster, kan man så analysere sig frem til detaljer om laget, så som dets tykkelse og homogenitet. Metoden kan udvides til at analysere flere tynde lag ovenpå hinanden, men dette kræver mere komplicerede eksperimenter og dataanalyser.

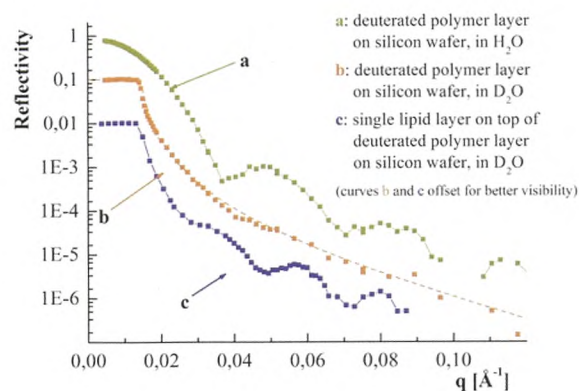
Hvad er interessant at undersøge?

Funktionelle membraner er almindelige i levende organismer. Fremtidig teknologi kan tænkes at imitere biologiske systemer for at løse bestemte opgaver, som at lave en kunstig membran, der kan filtrere affaldsstoffer. Naturen gør det ved brug af funktionelle proteiner, som sidder i en dobbeltmembran af fedt. I et bio-imiterende produkt kunne man sætte membranen fast på en siliciumskive med et lag polymer imellem for at støtte proteinet (se figur 4a). Derefter vil man kunne detektere affaldsstofferne med spektroskopi.



Figur 4a. Skematisk fremstilling af en bio-imiterende membran.

Der er mange lovende teknologiske muligheder i dette, men de teknikker, som evolutionen har frembragt, er svære at kopiere, hvilket til dels skyldes manglende indsigt i de grundlæggende egenskaber af disse sammensatte systemer. Metoder til at bygge membranlag skal udvikles, og resultaterne grundigt undersøges. Neutronrefleksionseksperimenter, som vist i figur 4b, fortæller os om den sekventielle opbygning af membraner, og deres strukturelle opbygning.



Figur 4b. Neutronreflektogrammer som viser Kiessig mønstre fra en polymermembran (~400 Å) med et enkelt fedtlag ovenpå (1,6 Å), monteret på en siliciumskive, og målt i hhv. normalt og tungt vand.

Litteratur

- [1] Koenig BW, Kruger S, Orts WJ, Majkrzak CF, Berk NF, Silverton JV, Gawrisch K. (1996), *Langmuir*, **12**, 1343-1350.
- [2] Fragneto-Cusani G (2001), *Journal of Physics: Condensed Matter*, **13**, 4973-4989.
- [3] Gutberlet T, Steitz R, Howse J, Estrela-Lopis I, Klös-gen B. (2002), *Applied Physics A-Materials Science & Processing*, **74**, S1262-S1263.
- [4] Penfold J. (2002), *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, **7**, 139-147.
- [5] Steitz R, Gutberlet T, Hauss T, Klös-gen B, Krastev R, Schemmel S, Simonsen AC, Findenegg GH. (2003), *Langmuir*, **19**, 2409-2418.



Beate Klös-gen er lektor i fysik på Syddansk Universitet og er en del af MEMPHYS centret. Hun beskæftiger sig med biologiske overflader, studeret med en lang række teknikker, herunder refleksion af röntgen- og neutronstråler.



Kaspar Hewitt Klenø er specialestuderende i fysik på Niels Bohr Institutet ved Københavns Universitet og arbejder med neutronspreddning.

Nedbremsning af neutroner – breddeopgave 27 med didaktisk kommentar

Af Jens Højgaard Jensen, IMFUFA, RUC.

Mit formål med artikelserien om breddeopgaver er – udover at gøre opmærksom på RUCs fysikuddannelse – dobbelt: Dels udvælger jeg opgaverne, så de kan have interesse som fysikproblemer i egen ret. Dels udvælger jeg dem med henblik på at kunne knytte didaktiske overvejelser til dem af interesse for fysikundervisere. I første omgang i forhold til universitetsundervisning. Men i anden omgang kunne der måske også trækkes paralleller til andre undervisningsniveauer.

Her bringes løsning og kommentarer til opgaven fra forrige nummer samt en ny opgave. Opgaven i sidste nummer af KVANT var denne breddeopgave fra RUC (nr. 27 i rækken her i KVANT):

27. Nedbremsning af neutroner

Lette kerner er bedre til nedbremsning af neutroner i reaktorer end tunge kerner. Hvordan afhænger det maksimale forholdsmæssige energitab af en neutron ved et elastisk sammenstød med en kerne af dennes masse? Begrund svaret.

Løsning

Det forholdsmæssige energitab for en neutron ved et sammenstød med en kerne med en given masse er størst ved et centralt sammenstød. Vi vil derfor nøjes med at regne i én dimension svarende til figuren:



Da der både er energibevarelse og impulsbevarelse under stødet, gælder der med figurens betegnelser, og idet vi regner klassisk:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}Mw^2 + \frac{1}{2}mu^2 \quad (1)$$

$$mv = Mw - mu \quad (2)$$

Ligning (1) kan omformes til $(v+u) \cdot (v-u) = (M/m) \cdot w^2$. Sammenholdes det med $v+u = (M/m) \cdot w$ fra (2) fås $v-u = w$. Lægges disse to sidste ligninger sammen fås $2v = (1 + M/m) \cdot w$, hvorefter vi får:

$$\Delta E/E = \frac{\frac{1}{2}Mw^2}{\frac{1}{2}mv^2} = \frac{4mM}{(m+M)^2} \quad (3)$$

for det forholdsmæssige energitab $\Delta E/E$.

Resultatet stemmer overens med, at $\Delta E/E$ skal gå imod 0 for m gående imod 0 og for M gående imod 0, og at $\Delta E/E$ skal være 1 for $m = M$.

Kommentarer

1. Umiddelbart skulle vi forvente, at $\Delta E/E$ afhang af de tre inputvariable m , M og v til problemet. Men det ses overraskende nok, at $\Delta E/E$ kun afhænger af forholdet imellem m og M , og ikke af v . Havde vi tænkt dimensionsanalytisk ville overraskelsen imidlertid have været til at forudse: det er ikke muligt at danne en dimensionsløs størrelse af m , M og v , der inddrager v .

Konklusionen ud fra dimensionsovervejelser, at det relative energitab ved nedbremsningen af neutroner ikke kan afhænge af deres fart, er bundet til, at fænomenet kan beskrives klassisk. Det kan det også i det væsentlige. Men sætter vi os for at udregne en relativistisk formel for det relative energitab, kan vi ikke forvente uafhængigheden af v .

I det tilfælde må vi nemlig regne med lysets hastighed c som en ekstra inputvariabel for problemet. Af dimensionsgrunde må vi derfor forvente, at $\Delta E/E$ bliver en funktion af v/c udover af M/m .

Med forkortelsen γ_v for $1/\sqrt{1-(v/c)^2}$ og tilsvarende for γ_u og γ_w kan energibevarelsen og impulsbevarelsen for vores centralstød relativistisk skrives:

$$m\gamma_v c^2 + Mc^2 = m\gamma_u c^2 + M\gamma_w c^2 \quad (4)$$

og

$$m\gamma_v v = M\gamma_w w - m\gamma_u u \quad (5)$$

Ved at udtrykke $\gamma_v v$ ved γ_v og tilsvarende for u og w , herefter eliminere γ_u , således at γ_w findes som funktion af γ_v , finder jeg efter en del mellemregninger resultatet:

$$\Delta E/E_{\text{kin}} = \frac{Mc^2(\gamma_w - 1)}{mc^2(\gamma_v - 1)} = \frac{2\alpha(\gamma_v + 1)}{\alpha^2 + 2\alpha\gamma_v + 1} \quad (6)$$

hvor α er en forkortelse for M/m . Altså som forventet en funktion af M/m ($= \alpha$) og v/c (via γ_v).

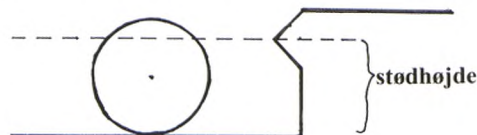
Jeg har valgt at sammenholde ΔE med neutronens kinetiske energi fremfor dens totalenergi for at kunne jævnføre med (3). Ligning (6) ses at stemme overens med (3) for $\gamma_v = 1$, som den skal. Resultatet stemmer – som det klassiske også gjorde – overens med, at $\Delta E/E_{\text{kin}}$ skal gå imod 0 for α gående imod 0 og for α gående imod ∞ , og at $\Delta E/E_{\text{kin}}$ skal være 1 for $\alpha = 1$.

2. Den opmærksomme læser tænker måske, at jeg finder dimensionsbetragtninger vigtige i undervisningen på breddekurset, siden jeg i 4 af de sidste 5 artikler i rækken her har været inde på emnet. Det har den opmærksomme læser i givet fald ret i. Jeg regner dimensionsbetragtninger for en vigtig del af det at kunne tænke som en fysiker.

Breddeopgave 28. Billard

Inden næste nummer af KVANT udkommer kan læserne eventuelt overveje løsningen til denne eksamensopgave fra breddekurset på RUC (fra sommereksamen 1997, nr. 28 i rækken her i KVANT):

Banderne på et billardbord er konstrueret med en stød højde (jvf. figur) for stød mellem baller og bander, således at en rent rullende bevægelse vinkelret mod banden reflekteres i en rent rullende bevægelse bort fra banden. Hvor stor er stød højden? Begrund svaret.



Løsning og kommentar bringes i næste nummer.

Aktuelle bøger

Af Finn Berg Rasmussen og Michael Cramer Andersen, KVANT

Tycho Brahes verden

Redigeret af: Poul Grinder-Hansen, Nationalmuseet 2006, 286 sider, rigt illustreret, 198 kr. inkl. moms. Se www.natmus.dk.

I forbindelse med Nationalmuseets udstilling "Tycho Brahes verden" har museet udgivet denne samling af 20 essays, der dækker væsentlige træk af Tycho Brahes tid og hans plads i den. Artiklerne kommer vidt omkring: herremandsliv, dragt, dans, musik, narre, arkitektur, dannelse, uddannelse, filosofi og religion.

Kun en af artiklerne, af Kristian Peder Moesgaard, diskuterer egentligt astronomiske spørgsmål. Det drejer sig især om det for den tid helt nye verdensbillede og om, hvorfor Tycho Brahe ikke helt kunne godtage den copernicanske opfattelse. Tycho Brahe mente helt korrekt, at sigteretningen til stjernerne måtte ændre sig gennem året, hvis Jorden gennemløb en bane om solen. Denne parallakse er for lille til at kunne observeres med Tycho Brahes instrumenter, og de deraf følgende stjerneafstande forekom ham utænkeligt store. Stjernernes tilsyneladende størrelse på 1 bueminut ville omvendt føre til, at stjernerne skulle være absurd store, nemlig af størrelse som Jordens bane om solen. Nøglepunktet er målenøjagtighed, og Moesgaard viser gennem en række smukke billeder eksempler på Tycho Brahes instrumentforbedringer. En anden artikel, om bygningerne på Hven, berører kort disses betydning for observationerne.

Der er to emner, som optager alle med interesse for Tycho Brahe: hvorfor forlod han Danmark, og hvordan døde han? Alex Wittendorff belyser det første ud fra et synspunkt, som i hvert fald for mig er nyt. Christian 4. udnævnte 1596, da han blev myndig, en ny kansler, Christian Friis til Borreby. Friis mente, at det var kongemagtens pligt at gennemtvinge den rette lutherske lære i landet. Idet Tycho Brahes opfattelse og praktisering af kristendommen ikke stemte med den rette lære, måtte han i betragtning af sin berømmelse og internationale anseelse regnes for en farlig mand. Friis og dermed kongen kunne derfor ikke længere se gennem fingre med Brahes vitterligt mange forsømmelser af sine lensherrepligter, som dermed blev et skudsikkert påskud til at indstille den årlige støtte til observatoriet på Hven og til at fjerne Brahes lensindtægter. Hvor fundamentalistisk religionsopfattelsen kunne være, fremgår af en tankevækkende historie fra 1553, der fortælles i artiklen "kirken og afvigerne" af Martin Schwarz Larsen. En gruppe på ca. 150 protestanter på flugt for religiøs forfølgelse i England landede i Helsingør og bad om ophold i Danmark. En gennemgang af deres kristentro viste imidlertid, at der var et punkt, hvor de afveg fra den lutherske lære: nadveren. De opfattede nadveren som et symbolsk måltid, hvorimod Luther (og med ham den danske konge og de danske kirkelege autoriteter) hævdede, at brødet og vinen virkeligt var Kristi legeme og blod. Denne "falske" opfattelse var nok til, at asylansøgerne blev afvist og sendt ud på havet igen i novembervejret.

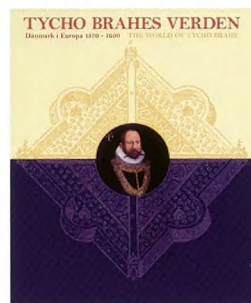
Artiklen "Tycho Brahes begravelse i Prag", af Jens Vellev, handler både om Brahes død og begravelse og om de senere undersøgelser af graven i Teynkirken i Prag. Johannes Keplers beskrivelse af det fatale sygdomsforløb 13.-24. ok-

tober 1601 gengives i oversættelse fra den latinske tekst i observationsprotokollen. Som formodentlig bekendt har en nylig undersøgelse af hårrester fra graven påvist en forhøjet kviksølvindtagelse et halvt døgn før Brahes død. Det kunne naturligvis støtte spekulationerne om et giftmord. Vellev prøver ikke på at tage stilling, men refererer forskellige samtidige udtalelser og senere formodninger. Man savner her en lægefaglig kommentar: var sygdommen ikke dødelig nok i sig selv og kunne der ikke have været brugt en kviksølvholdig medicin?

Hist og her i bogen er der nogle små fejl, og et par af dem er lidt pudsige: om forfatteren til artiklen "Dannelse og uddannelse" må man tro, at hans egen dannelse hverken har matematik eller sprog som styrkepunkter. Han oplyser (side 35), at Martin Luther levede fra 1483 til 1546, altså ca. 163 år, og unge adelsmænds dannelsesrejse, "den store tur" (Europa rundt), betegnes (side 43) "la grand tour". Det rette udtryk er "le grand tour". Den anden grammatisk korrekte mulighed "la grande tour" ville betyde "det store tårn". Man kan selvfølgelig ikke forlange indgående franskkundskaber hos en forfatter, der skriver på dansk, men hvis han vil smykke sin tekst med noget udenlandsk, bør der da citeres korrekt. En lille dansk sprogblokt (side 177) er "et hemmeligt sted langs Nilen"; hvor langt er det sted mon?

Bogen rummer mange smukke og relevante illustrationer, som gør det til en fornøjelse at læse eller bare kigge i den. Man får meget at vide om det åndelige klima på Tycho Brahes tid, om hans slægt og om forholdene på Hven. Der er også en del information, som astronomer og fysikere kan leve lykkeligt uden, fx om dans på herregårdene eller om mønstret i Tycho Brahes ligdragt.

FBR



Om bevidsthed og kosmologiske principper

Af: Kay Akselbo, Underskoven 2007, 182 sider, 279 kr. inkl. moms. Se www.underskoven.dk.

Redaktionen har modtaget bogen "Om bevidsthed og kosmologiske principper" af civilingeniør Kay Akselbo, der i øvrigt har skrevet et par artikler i KVANT de senere år.

Bogen er en filosofisk og kosmologisk undersøgelse, der tager udgangspunkt i den menneskelige bevidsthed og forholdet til verden som iagttagelsesobjekt. Forfatteren angriber problemet fra forskellige perspektiver: Filosofisk, biologisk, psykologisk, Newtonsk og relativistisk.

MCA

Bohrs samlede værker – komplette

Niels Bohr Collected Works – vol. 12, Popularization and People (1911-1962)

Redigeret af: *Finn Aaserud*. Amsterdam: Elsevier 2007 (www.elsevier.com), 610 sider, 150 euro (ca. 1.130 kr.).

Udgivelsen af Niels Bohrs samlede værker, har nået en afslutning efter 35 års arbejde under forskellige redaktører. De samlede værker indeholder samtlige af Bohrs publikationer, i facsimile og i engelsk oversættelse. Der bringes også upublicerede manuskripter og breve til belysning af publikationerne, historiske indledninger af redaktørerne samt illustrationer.

Bind 1-9 omhandler Bohrs arbejder indenfor fysik. Bind 10 rummer et udvalg af Bohrs filosofiske skrifter og bind 11 handler om hans politiske engagement.

I det nye bind 12 er samlet Bohrs populære arbejder samt nekrologer og andre lejlighedsskrifter for kolleger, venner og familie. Bind 12 er redigeret af videnskabshistoriker Finn Aaserud, leder af Niels Bohr Arkivet (www.nba.nbi.dk).

Bind 12 handler dels om Bohr som person og om hans bestræbelser på at forklare kvantemekanikken og dens konsekvenser for fysikere og almindelige mennesker. Dette skete bl.a. i radioforedrag for Skandinaviens gymnasieelever og i artikler til encyklopædier.

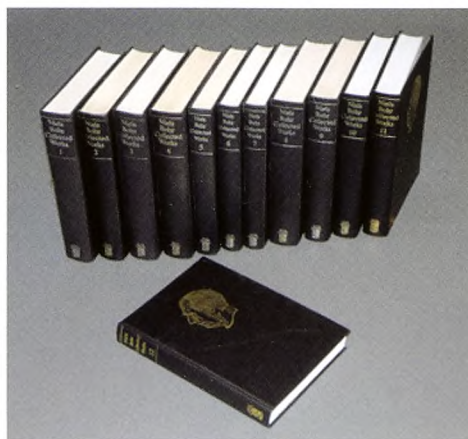
Hovedparten af bogen rummer Bohrs skrifter om store personligheder indenfor fysikken (f.eks. Newton), hans læremestre og kolleger (f.eks. Rutherford og Einstein), samt lejlighedsskrifter om venner og familie. Disse artikler vidner om Bohrs store sociale netværk og bidrager samtidig til at belyse Bohr selv.

Bogen bringer et udvalg af Bohrs relevante korrespondance og centrale manuskripter. Endelig slutter bogen af med en bibliografi, hvor Bohrs mange publikationer er ordnet kronologisk med angivelse af, hvor de kan findes i de forskellige bind af Bohrs samlede værker.

Mange af teksterne og fotografierne har ikke tidligere været offentliggjort. Det er en meget flot afslutning på værket, Finn Aaserud har redigeret.



Frontispice viser Bohr, der arrangerer det årlige gruppebillede af medarbejderne på Institutet (bind 12).



Bohrs samlede værker komplet i 12 bind.

Bøgerne i serien koster fra 150 til 438 euro (fra 1.130 til 3.300 kr.). Flere bind er udsolgt, men forlaget planlægger en samlet genudgivelse i 2008.