

TEKST NR 35

1980

HELGE KRAGH

HISTORISKE STUDIER

I DEN NYERE

ATOMFYSIKS UDVIKLING

TEKSTER fra

IMFUFA

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES
FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

Helge Kragh, "Historiske Studier i den Nyere
Atomfysiks Udvikling,"

IMFUFA Tekstrække nr. 35 (1980), RUC.

62 s. ISSN 0106-6242.

Teksten, der er antaget til forsvar for den naturvidenskabelige doktorgrad ved RUC, er en samlet oversigt over syv artikler om atom- og kvanteteoriens historie. Der gives en kortfattet gennemgang af to perioder i dette århundredes fysik. Bohrs teori for det periodiske system og opdagelsen af grundstoffet hafnium udgør det ene hovedområde, mens det andet udgøres af den tidlige kvantemekanik. I forbindelse med en analyse af den historiske sammenhæng mellem kvantemekanikken og relativitetsteorien i tyverne undersøges skabelsen af Diracs elektronteori, 1928. Endelig suppleres dette med en undersøgelse af nogle generelle filosofiske temaer i Diracs videnskabelige produktion.

HELGE KRAGH

HISTORISKE STUDIER I DEN NYERE
ATOMFYSIKS UDVIKLING

Forord

A.1.	Atomernes Struktur	5
A.2.	Bohrs Teori for det Periodiske System	12
A.3.	Atomstruktur mellem Fysik og Kemi	20
A.4.	Prioritetsstriden omkring Hafnium	26
B.1.	Bølgemekanikkens Fødsel	32
B.2.	Relativitetsteori og den Tidligste Kvantemekanik ..	38
B.3.	Mod en Relativistisk Kvantemekanik	44
B.4.	Atomteori og Æstetiske Principper	53

FORORD

Denne disputats består, udover herværende sammenfatning, af en række enkeltstudier i den nyere atom- og kvante-teoris historie. Disse studier er:

- (1) J.Kragh, "Chemical Aspects of Bohr's 1913 Theory," *J.Chem.Ed.*, 54 (1977), 208-210.
- (2) H.Kragh og P.Robertson, "On the Discovery of Element 72," *J.Chem.Ed.*, 56 (1979), 456-459.
- (3) H.Kragh, "Niels Bohr's Second Atomic Theory," *Hist.Stud.Phys.Sci.*, 10 (1979), 123-186.
- (4) H.Kragh, "Anatomy of a Priority Conflict: The Case of Element 72," *Centaurus*, 23 (1980), 277-303.
- (5) H.Kragh, "On the History of Early Wave Mechanics," IMFUFA Skriftserie no. 23, RUC 1979; 142 s.
- (6) H.Kragh, "The Genesis of Dirac's Theory of Electrons," *Arch.Hist.Ex.Sci.*, 16 (1980), pp. ??
- (7) H.Kragh, "Methodology and Philosophy of Science in Paul Dirac's Physics," IMFUFA Skriftserie no. 27, RUC 1980.

Som det fremstår af ovenstående titler, er der ikke tale om nogen egentlig kontinuitet eller fælles ramme, der på naturlig vis binder disse 7 studier sammen. Denne mangel på ensartethed gælder også afhandlingernes perspektiv, der for de flestes vedkommende er teknisk-internalistisk (hvilket nogle måske vil kalde mangel på perspektiv), men også indeholder betragtninger af mere videnskabsfilosofisk og -sociologisk art. Dækker afhandlingerne således ikke et enkelt, velafgrænset emne, set i ét bestemt perspektiv, så kan de dog med rimelighed henføres til to nogenlunde velafgrænsede emnekredse i fysikkens udvikling, nemlig:

- A. Den tidlige kvanteteori for atomernes struktur og deres forhold til det periodiske system og
- B. kvantemekanikkens udvikling og de første forsøg på at indpasse relativitetsteorien i den nye kvanteteori.

Tidsmæssigt dækker A-emnekredsen især perioden 1920-23, mens B-emnekredsen hovedsageligt beskæftiger sig med udviklingen i 1925-28. Men jeg har gjort mange afstikker og ikke bestræbt mig på en snæver afgrænsning af mit overordnede emne, udviklinger i den teoretiske fysik siden 1913.

I det følgende skal jeg forsøge at give en samlet, men unægtelig overfladisk, fremstilling af nogle hovedpunkter i disse udviklinger, fortrinsvis baseret på indholdet i mine egne undersøgelser. For at denne fremstilling ikke skal blive alt for fragmentarisk skal jeg bibeholde den nævnte inddeling i to hovedområder, A og B. Den saglige forbindelse mellem A og B er meget beskeden, og det ville være urimeligt at tvinge et fælles mønster ned over de to emnekredse. Bølgemekanikken har ikke meget at gøre med Bohr's teori for det periodiske system.

Da herværende oversigt ikke har noget egentligt videnskabeligt formål, har jeg næsten helt droppet de sædvanlige krav om minutiøse og systematiske kildeangivelser og dokumentation, der normalt tynger videnskabshistoriske arbejder. Der ville ikke være nogen saglig pointe i at fylde denne oversigt med referencer. Læsere, der skulle ønske detaljerede henvisninger til den overvældende litteratur, der dokumenterer det her skrevne, kan få deres lyst tilfredsstillet ved at se i mine enkelte skrifter. Eller, for sekundærlitteraturens vedkommende, i min bibliografiske oversigt (H.Kragh, "Bibliogra-

fisk Vejledning til Studiet af den Moderne Fysiks Historie," IMFUFA Skriftserie no. 5, 1978).

Jeg vil tillade mig at understrege, at herværende oversigt på ingen måde har nogen selvstændig værdi eller foregiver at være blot interessant læsning. Hvad der måtte være af værdifulde eller interessante ting i mine undersøgelser, må man søge efter i de enkelte artikler, hvis indhold denne oversigt kun giver et sløret og ufuldstændigt billede af. Når jeg alligevel har skrevet oversigten, er det udelukkende, fordi noget sådant er et formelt krav ved disputatsordningen.

Færdiggørelsen af disputatsen og undersøgelserne vedrørende (5)-(7) har været muliggjort af et kandidatstipendium ved IMFUFA/RUC. Jeg vil gerne udtrykke min taknemmelighed til IMFUFA herfor. Det gode miljø på instituttet har indirekte haft en positiv betydning for dette arbejde.

A.1. Atomernes Struktur (1), (3)

Hvis man ønsker at fastsætte en 'fødsel' for den moderne atomfysik, er året 1913 et rimeligt bud, idet Niels Bohr da offentliggjorde sin epokegørende trilogi af afhandlinger om atomets konstitution i lyset af den nye kvanteteori. I mangt og meget var Bohr's teori, især i den første afhandling, koncentreret omkring det simple brintatom, modelleret som en elektron, der cirkulerer omkring en 'proton'. Bohr's teori bliver, og blev, da også oftest opfattet som en teori for brintatomet. Men Bohr's ambitioner gik i 1913 langt videre, idet han også mente at kunne give et mere tilfredsstillende grundlag for radioaktivitet, magnetisme, røntgenstråling og især for de højere atomers elektronkonfiguration. Det er dette sidste problem, en forklaring af stoffernes fysisk-kemiske forhold i termer af atomernes indre struktur, jeg skal kommentere i det følgende.

Selve det nævnte program var ikke specielt for Bohr, idet det med stor styrke og dristighed var blevet fremsat et tiår tidligere af J.J.Thomson, elektronens opdager. Thomson arbejdede ud fra opfattelsen af, at atomer består af et antal elektroner, der er spredt rumligt i en positiv kugle med homogen ladningsfordeling. Ud fra denne atommodel forsøgte Thomson bl.a. at finde de elektronkonfigurationer, der giver stabile ligevægtsforhold og således må forventes at svare til virkelige atomers elektronkonfigurationer. Dette skete deduktivt-mekanisk, ved hjælp af ligevægts- og perturbationsberegninger i stil med de fra astronomien kendte. Thomson fandt faktisk på denne måde regelmæssigheder i elektronkonfigurationerne, som på slående vis antydede en forklaring af det periodiske system i termer af elektronernes placering i atomerne. Thomson's antydningssvise forklaring af hovedtrækkene

i grundstoffernes fysisk-kemiske forhold var dog helt utilstrækkelig. Ikke blot var atommodellen uholdbar, men Thomson's arbejder foregik på et rent klassisk grundlag, uden at tage hensyn til den nye kvanteteori. Alligevel var Thomson's program konstituerende for en stor del af atomfysikken, også efter 1913. Med en senere term kan Thomson's approach siges at være det første forsøg i *Atombau* traditionen, hvis ambitiøse mål var at deducere kemien ud fra atomets mekanik, med eller uden kvanteteori.

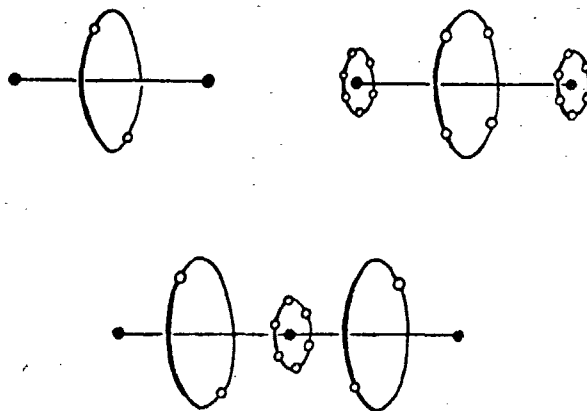
Den alternative metode til at opnå viden om atomernes struktur var den 'kemiske' approach, der ad induktiv vej håbede at kunne slutte fra de kemisk-fysiske erfaringers systematik, således som skematiseret i det periodiske system, til viden om elektronernes placering i atomerne. Denne metode gjorde Thomson også brug af, og den blev fulgt af enkelte spekulativt indstillede kemikere før 1913. Men iøvrigt var studiet af atomets indre struktur, hvad enten det foregik på den ene eller anden måde, knap nok anerkendt som en respektabel videnskabelig beskæftigelse før 1913.

Niels Bohr's behandling af højere atomers struktur i 1913 indeholder elementer af både *Atombau* metoden og af den kemiske metode, ofte blandet sammen. Følgende en kvanteteoretisk modifikation af Thomson's mekaniske stabilitetsberegninger søgte Bohr at finde grænserne for den atomteoretiske metodes formåen og erkendte, at metodens anvendelighed var stærkt begrænset, når det gjaldt andre systemer end det simple brintatom. Derfor støttede han sig stærkt på empiriske data for grundstofferne, dels af kemisk art og dels af spektroskopisk art. Bohr's forhold til de to forskellige metoder, den teoretisk-deduktive og den empirisk-induktive, var udpræget eklektisk. Når metoderne

gav modstridende resultater for elektronkonfigurationerne, var han tilbøjelig til at vurdere den kemiske metode som den mest pålidelige. Som et for Bohr specielt, og meget karakteristisk, metodologisk element finder vi anvendelsen af generelle, ikke-kvantitative principper af en *a priori* eller 'æstetisk' natur. Disse principper, der i 1913 kun var vagt og implicit formuleret, gik på elektronkonfigurationernes symmetriegenskaber og på, hvad Bohr kaldte "the general view of formation of atoms". Dette var en antagelse om, at elektronopbygningen skulle ske succesivt, uden at ændre på de allerede bundne elektroners kvantetal.

De resultater, Bohr i 1913 nåede frem til med hensyn til atomernes opbygning, var ikke særligt gode, d.v.s. stemmer kun dårligt med den senere opnåede viden (se tabellen i afsnit A.2). Specielt var de angivne strukturer fejlagtige netop på de steder, hvor Bohr forlod sig på mekaniske beregninger. Alligevel var Bohr's resultater et stort skridt fremad mod en mere realistisk forståelse af atomstrukturens forhold til grundstoffernes egenskaber. Selvom detaljerne i 1913 var uholdbare, finder man hos Bohr for første gang en helt klar og principielt korrekt forståelse af det periodiske systems atomteoretiske grundlag. Bohr søgte også, i sidste del af trilogien, at give en atomfysisk teori for simple molekylers struktur, idet han udviklede en dynamisk model for den covalente binding. Dette skete igen med den karakteristiske blanding af klassiske og kvanteteoretiske beregninger, der præger hele 1913 teorien. Bohr's model for den covalente binding, forstået som en fælles roterende ring af to eller flere elektroner, blev især udviklet med H_2 molekylet

som eksempel. I dette tilfælde lykkedes det Bohr at give en atomfysisk begrundelse for, hvorfor brintatomer kombinerer til et molekyle og endda at beregne en værdi for dannelsesvarmen, som var i rimelig overensstemmelse med eksperimenterne.



Bohr's molecular models of H₂, O₂, and H₂O from 1912. Reproduced from Bohr's drawings in the Memorandum from summer 1912.

På trods af den tidlige Bohr models lovende ansatser til skabelsen af en atomfysisk funderet forståelse af kemien, blev denne del af teorien dog på det nærmeste ignoreret. Fysikerne koncentrerede sig helt om Bohr's kvanteteoretiske program og dets forhold til spektroskopien; og kemikerne fandt ingen fordele ved Bohr's atommodel og hans komplicerede beregninger, som nok de færreste af dem forstod. For Bohr selv var det iøvrigt første og sidste gang, han forsøgte sig i rollen som teoretisk kemiker; i sin senere teori fra 1921 undlod han helt at beskæftige sig med spørgsmålet om den kemiske binding.

Udviklingen m.h.t. at formulere en atomteori for grundstoffernes struktur var i tiåret efter 1913 til dels præget af de to allerede nævnte traditioner, en kemisk-induktiv og en fysisk-deduktiv, der begge blev kraftigt udbygget. Den kemiske approach blev især udviklet af Lewis og Langmuir og nåede sin foreløbige kulmination hos Charles Bury, umiddelbart før Bohr's nye teori. Bury byggede på en forestilling om et statisk arrangement af elektroner i kugleskaller og fandt populationstallene fra grundstoffernes fysisk-kemiske egenskaber. Den kemiske atommodel manglede enhver fysisk retfærdiggørelse og havde en udpræget *ad hoc* karakter. Alligevel viste kemikernes metode sig profitabel og gav hos Bury for første gang de korrekte elektronfordelinger.

Hvis fysikerne ville undgå de komplicerede og lidet realistiske beregninger, der prægede Atombau-traditionens drøm om en matematisk kemi, og samtidig undgå den fysisk set utilfredsstillende kemiske approach, var der et alternativ i spektroskopien. Denne videnskab spillede jo en vigtig rolle for Bohr's teori, men det var først efter Bohr - med Moseley's grundlæggende arbejder fra 1913 - at der rigtig blev åbnet op for en ny vej til en fysisk forståelse af de højere atomers struktur. Den røntgenspektroskopiske approach var baseret på eksperimentelle studier af antal, frekvens og intensitet af røntgenlinier, idet sådanne, efter Bohr's og Moseley's forestillinger, måtte hidrøre fra de indre elektroners kvantespring. Frekvensen af de enkelte røntgenlinier afhænger bl.a. af de involverede kvantebaners populationstal, således at disse kan findes ved fitning til eksperimentelt bestemte frekvenser. Metoder af denne type blev omkring 1920 dyrket af mange fysikere, fx. Debye, Kroo og Vegard, for derigennem at finde fordelingen af elektroner

i atomerne. Men heller ikke den røntgenspektroskopiske metode viste sig særlig velegnet til dette formål, bl.a. fordi den afhang kritisk af modelforestillinger for atomet. Det mest gennemførte forsøg inden for denne tradition skyldtes måske den norske fysiker Lars Vegard, der omkring 1918 forsøgte at give en omfattende fysisk forklaring på det periodiske system, baseret på røntgenspektroskopiske resultater. Det var dog typisk, at Vegard i en lang række tilfælde måtte tage tilflugt til kemiske ræsonnementer eller til rene antagelser uden nogen fysisk begrundelse. Det var først senere, da røntgenteknikken var blevet forfinet og den teoretiske forståelse øget, at det af Vegard og andre fulgte program gav bonus. Den teori, som Stoner foreslog i 1924, og som giver en korrekt kvantebeskrivelse af det periodiske system, var helt baseret på det røntgenspektroskopiske program.

Bohr selv havde for en årrække opgivet at forfølge sine 1913-ansatser m.h.t. en teori for elektronernes antal og arrangement i atomerne. Andres forsøg på at realisere dette program fulgte han interesseret, men mente, at tiden endnu ikke var moden, og at kvanteteorien først måtte generaliseres og forstås bedre. Det var da også denne opgave, der især optog Bohr i perioden 1913-21, hvor han, sammen med Sommerfeld og andre, skabte den såkaldte 'gamle kvanteteori' eller Bohr-Sommerfeld teorien. Denne var teknisk baseret på de Sommerfeldske kvantiseringsregler og begrebsmæssigt især på Bohr's korrespondensprincip, der knyttede kvanteteorien til den klassiske fysiks resultater. Eksperimentelt var den gamle kvanteteori, især som Bohr udviklede den, tæt knyttet til den optiske spektroskopi, der også var korrespondensprincipets vigtigste arbejdsområde.

I Bohr's oprindelige atomteori og dens umiddelbare videreudvikling blev atomet opfattet som et system af koncentriske og roterende ringe, hver indeholdende et bestemt antal elektroner. Bohr blev hurtigt klar over, at denne primitive model, så at sige overtaget fra Thomson's klassiske teori, var utilfredsstillende og måtte erstattes af en mere dynamisk struktur, hvor de enkelte elektroners banebevægelser ikke var begrænset til cirkler, men i almindelighed var ellipser. Elliptiske elektronbaner var studeret af især Sommerfeld i forbindelse med dennes indpasning af relativitetsteorien i Bohr atomet. Men Sommerfeld's elliptiske baner var begrænset til atomets yderste elektron, valens- eller lyselektronen, mens de indre elektroner enten blev opfattet som et ring-system eller blot som en udifferentieret 'atomrest'. Bl.a. ud fra korrespondensovervejelser mente Bohr, at kun mere komplicerede bevægelsestyper, medregnende vekselvirkningen mellem forskellige elektronbaner tilhørende samme hovedkvantetal, kunne give et tilfredsstillende billede af atomet.

Bohr's fornyede interesse for atomernes struktur og det periodiske system var bl.a. forårsaget af hans lange og frugtesløse forsøg på at give en forklaring på heliumatomets spektroskopiske egenskaber. Som det næstsimpleste atom var helium et oplagt objekt at studere med den for brintatomet så succesrige teori. Men mens brintspektret, og ligeledes en række andre 'brintlignende' spektre, så smukt lod sig forklare ud fra den gamle kvanteteori, så modstod heliumspektret alle forsøg. Bohr selv arbejdede, sammen med H.A.Kramers, intensivt med heliumatomet i perioden 1915-20 i håbet om at kunne forklare spektret og beregne ioniseringsenergien. Men forgæves. Det drilske heliumatom provokerede Bohr til at søge nye veje i spørgsmålet om atomernes bygning, og dets fortsatte gådefuldhed blev

omkring 1923 til en af de 'kriser', der afgørende svækkede tilliden til den gamle kvanteteoris forklaringskraft. Heliumproblemet er faktisk uløseligt inden for den gamle kvanteteoris rammer og blev først afklaret i 1927, med den ny kvantemekanik.

A.2. Bohr's Teori for Det Periodiske System (3)

Niels Bohr vendte med fuld kraft tilbage til sit 1913-forskningsprogram, atomernes struktur i termer af elektronkonfigurationer, i slutningen af 1920, og beskæftigelsen hermed fortsatte indtil 1922, hvor Bohr's nye atomteori var fuldt udviklet. Bohr beskrev først sine nye ideer om atomets struktur i et par 'letters' til tidsskriftet *Nature*; heri gav han en generel, og ikke særlig klar, indføring i sine tanker. På ruinerne af det gamle ringatom, såvel som af kemikernes statiske atommodeller, tegnede Bohr nu et billede af atomet efter følgende hovedtræk:

Elektronernes tilstand beskrives gennem to kvantetal, hovedkvantetallet (n) og det azimuthale kvantetal (k), der tilsammen definerer banekurven, som tilnærmelsesvist bliver elliptisk. Antallet af elektroner i hver gruppe, og den måde elektronerne bevæger sig på, dirigeres af korrespondensprincippet. Ved opbygningen af atomet vil elektronerne successivt placeres i de laveste kvantegrupper, idet de dog i nogle tilfælde, svarende til kemiens overgangsgrupper, vil 'springe over' ikke-opfyldte niveauer. De i ellipser bevægende elektroner vil vekselvirke inden for samme gruppe, men vil også, som noget nyt, vekselvirke med de indre elektroner i atomresten og derved skabe en kobling.

Dette billede siger ikke i sig selv meget, og anvendelsen af det på bestemte atomer var hos Bohr

gennemgående kryptisk og lidet overbevisende. Men lad os, før vi ser på reaktionen på Bohr's nye teori, nævne dens vigtigste kendetegn og dens resultater, (idet jeg ikke skelner mellem de forskellige faser, hvori Bohr udviklede teorien i 1921-22; se dog tabellen). Bohr's teori kan metodologisk beskrives efter de komponenter, der er angivet i nedenstående figur. Denne beskrivelse er en rekonstruktion og altså ikke et udtryk for, hvorledes Bohr tænkte, da han skabte sin teori. I hovedtrækkene kan vi genfinde de komponenter, der også udgjorde den Bohr'ske metode i 1913, nemlig erfaringer fra den eksperimentelle fysik og kemi på den ene side og generelle principper på den anden side. Ræsonnementer af sidstnævnte type spillede en fremtrædende rolle i 1921-teorien og var meget karakteristiske for Bohr's almindelige måde at tænke videnskabeligt på. De erstattede på en måde den *Atombau* approach, som især

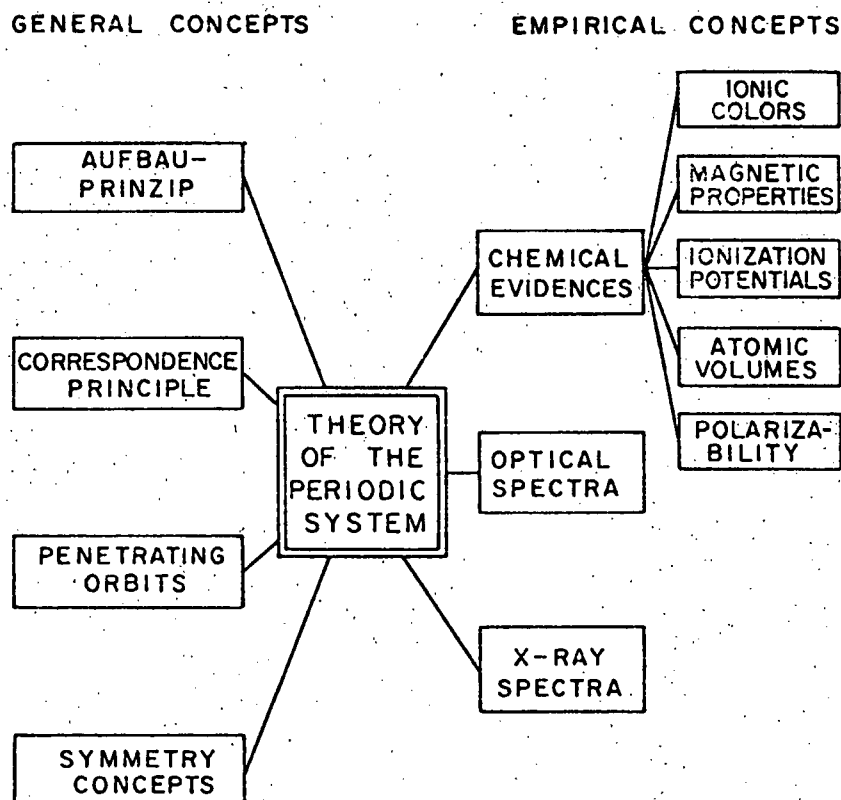


Figure 2. The conceptual structure of Bohr's theory. The scheme surveys the most important parts of the development of Bohr's second atomic theory.

tyske teoretikere satte deres lid til, men som Bohr selv afviste som utilstrækkelig og præmatur. Som i 1913, men nu endnu mere udpræget, dyrkede Bohr en pluralistisk metode, idet han frit blandede empiriske og teoretiske argumenter på en ofte meget uigen-nemsigtig vis.

Selv om teorien også hvilede på en sammenfatning og systematisering af empiriske data, så var den dog langt fra af den induktivt-empiriske type, sådan som man kan få indtryk af gennem senere fremstillinger af teorien. Det specifikt Bohr'ske i teorien lå i de fire generelle principper, for hvilke den direkte empiriske støtte var fraværende eller meget ringe. Det var disse kvalitative principper, der beåndede Bohr's teori, og som mystificerede samtiden. Forståelsen af deres rolle i atomernes opbygning er vanskelig og har næppe været helt klar; heller ikke for Bohr, der benyttede dem halvt intuitivt. Jeg skal nøjes med at nævne to af disse principper, der tilsammen giver en illustration af Bohr's tankegang.

Teorien om 'indtrængende baner' eller 'inddyknings-effekt' blev samtidig opfundet af Schrödinger og Bohr, men det var kun sidstnævnte, der anvendte den til studiet af højere atomers struktur. Ideen er simpelthen, at valenselektronen i en del af sin elliptiske bane 'dykker' ind i de indre elektroners område, hvorved dens bane ændres. Formelt kan dette udtrykkes ved, at dens hovedkvantetal ændres til et ikke-heltalligt s.k. effektivt kvantetal. Fysisk svarer denne ændring i det effektive kvantetal til en stærkere binding af elektronen. Ud fra en kvantitativ beregning af fænomenet, følgende *Atombau* traditionen, mente Schrödinger, at f.x. natriumatomet's valenselektron måtte være i kvantetilstanden 2_1 og ikke, som hidtil antaget, i en 1_1 tilstand (n_k notation). Bohr havde foreslået ideen om indtrængende elektronbaner lidt før Schrö-

dinger, men uden at publicere den. I sine publikationer brugte Bohr altid ideen på en bred, kvalitativ måde, uden at angive hvilke beregninger der eventuelt lå bag. Det almindelige indtryk, man får af Bohr's afhandlinger fra perioden, er, at såvel korrespondensprincippet som inddykningseffekten af Bohr var blevet anvendt i en højt udviklet kvantitativ form. Men faktisk var disse ideer kun i meget ringe grad matematisk udviklet hos Bohr.

Kun en gang, ved en berømt konference i Göttingen i juni 1922, løftede Bohr sløret for det matematiske indhold i sin anvendelse af inddykningseffekten. Bohr's Göttingen-forelæsninger blev aldrig offentliggjort, men findes som manuskript (og nu også optrykt i *Collected Works*). I Göttingen viste Bohr bl.a., hvorledes kvantetilstanden for natrium ikke er 2_1 , som antaget af Schrödinger, men derimod 3_1 , et vigtigt resultat for forståelsen af hele det periodiske system. I sin videre brug af inddykningseffekten undlod Bohr helt kvantitative beregninger og forlod sig på sin intuition, støttet af det empiriske kendskab til grundstoffernes egenskaber. Ud fra rent kvalitative betragtninger over inddykningseffektens virkninger argumenterede Bohr bl.a., at denne måtte være ansvarlig for den særlige slags elektronopbygning, der finder sted i overgangsgrupperne og i de sjældne jordarters gruppe. Bohr gav endda argumenter for, at den indre opfyldning af elektroner netop finder sted ved de elektronantal, der karakteriserer overgangsmetallerne. Men disse argumenter var lidet kontante og virker ikke særligt overbevisende.

Den stadige henvisning til begreber som 'symmetri' og 'harmoni' er et andet karakteristisk træk i Bohr's forklaringer. Symmetriprincipper som grundlag for stofteorier er jo meget almindelige, ikke mindst i moderne fysik og kemi, og spillede også en betydelig rolle i andre datidige teorier. Men Bohr formulerede

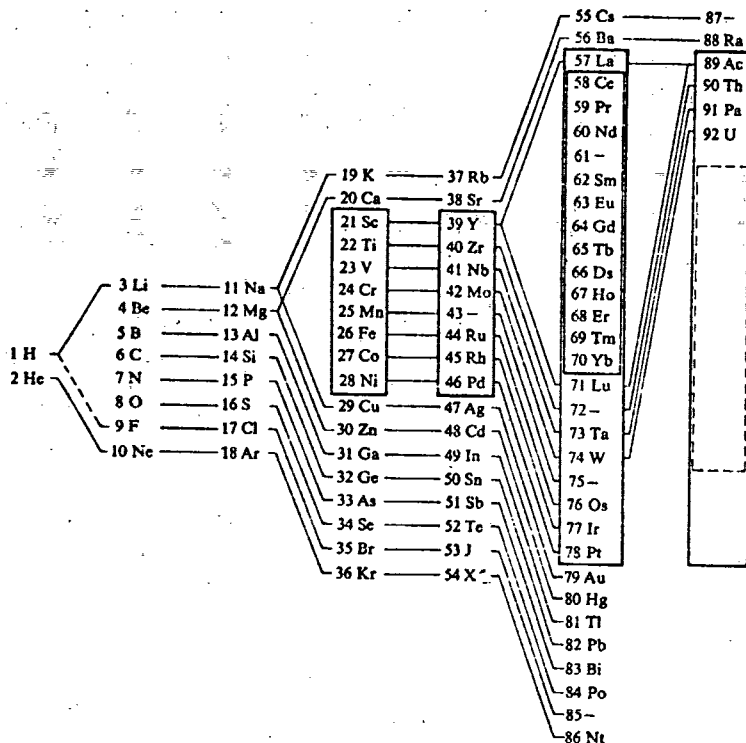
aldrig noget egentligt symmetriprincip, og hans brug af symmetriargumenter har intet at gøre med senere tiders anvendelse af f.x. symmetrigrupper. På trods af sin flittige brug af symmetri- og harmoniargumenter, og deres vigtige funktion i hele teorien, forklarede Bohr aldrig, hvad han mente med disse begreber; han nøjedes med vage antydninger af en intuitiv karakter. Det var således et typisk Bohr argument, når han i Göttingen, over for blomsten af den tyske teoretiske fysik, forklarede, at 3_3 niveauet ikke blev videreudbygget straks efter scandium, fordi en ny 3_3 elektron her ville betyde "einen sehr heimtückischen Überfall auf die Symmetrie".

Et nøje studium af Bohr's teori, fra upublicerede manuskripter og breve og fra de offentliggjorte artikler, viser ganske klart, at teorien i helt overvejende grad var baseret på en intuitiv anvendelse af de generelle principper, som Bohr anså for den eneste mulige vej i en tid, hvor kvanteteorien endnu ikke gav håb om en rationel forståelse af atomernes struktur. Korrespondensprincip, symmetriargumenter m.v. fungerede som midlertidige redskaber til at gøde den mark, der endnu ikke var moden til dyrkning. Derved blev teorien for det periodiske system af en intuitiv, næsten privat, karakter, afspejlende Bohr's specielle måde at tænke på. Derfor er det intet under, at teorien mystificerede datidens fysikere, hvoraf mange mente, at der bag Bohr's kvalitative argumenter måtte skjule sig komplicerede beregninger over korrespondens- og inddyknings-effekter for hvert enkelt atom, beregninger der blot ventede på at blive offentliggjort. Denne fornemmelse, at der i Bohr teorien ligger et uhyre beregningsarbejde af *Atombau* typen, får man nemt ved læsning af Bohr's arbejder. Og det blev endda antydnet af Bohr selv. Men man leder som nævnt forgæves efter dem. Heller ikke i arkivmaterialet er der det mindste tegn på, at Bohr skulle

have forsøgt at opbygge en matematisk-deduktiv teori for hele det periodiske system på samme måde, som han en tid havde forsøgt med heliumatomet. Sådanne beregninger blev et par år senere forsøgt på Bohr's institut af F.Hoyt, der videreudviklede Kramer's kvantitative formulering af korrespondensprincippet. Men Hoyt's bombastiske beregninger viste sig ganske værdiløse som en teori for virkelige atomers elektronkonfiguration.

De vigtigste resultater af Bohr's teori, således som den fremstod i 1922, blev sammenfattet i en ny version af det periodiske system, som Bohr havde arvet efter sin landsmand, kemikeren Julius Thomsen (se figuren). Denne havde iøvrigt selv, omkring 1895, spekuleret over den atomteoretiske baggrund for grundstoffernes regularitet og havde fremhævet, at antallet af grundstoffer i perioderne måtte være udtrykt gennem atomernes indre konstitution. Det lykkedes Bohr at forklare en meget stor del af den systematik, som det periodiske system udtrykker. Dette gjaldt f.x. variationerne i elektropositivitet og atomrumfang samt grundtrækkene i de optiske spektre og i stofferne magnetiske egenskaber. Det er dog tydeligt, at Bohr's forklaringer ikke blot deduceres fra teorien, men at fænomenerne til en vis grad selv bruges induktivt til forklaringen. Det samme gælder forklaringen på overgangsgrupperne placering.

Da Bohr mente at have baseret sin teori på principper, der helt alment gjaldt for atomernes opbygning, voldte det ham intet besvær at argumentere for samtlige atomers konfiguration, fra brint til uran. Han angav endda elektronkonfigurationer for de dengang hypotetiske transuranske grundstoffer og forudsagde f.x., at atomnummeret 118 måtte svare til en ædelgas. Bohr's teori var en typisk overgangsteori og levede



kun få år på sine laurbær, før den blev erstattet af bedre teorier, fremsat af h.h.v. Stoner og Pauli. Men den var alligevel den første atomfysiske teori for det periodiske system, der gav den helt korrekte grovstruktur for alle atomers opbygning, d.v.s. det korrekte antal elektroner i de forskellige 'skaller'. Derimod viste den sig snart at svigte på finstrukturen, idet den underinddeling af hovedkvantegrupperne, som Bohr's teori foreskriver, ikke er korrekt.

Som nævnt spillede røntgenspektroskopiske overvejelser, at den type som Vegard havde foretaget, ingen rolle for skabelsen af Bohr's teori. Men Bohr indså, at røntgenspektroskopien, der blev stærkt eksperimentelt udviklet omkring 1921, ville være en vigtig test for teorien, og begyndte et dybtgående studium af teo-

rien for denne videnskab, baseret på sine nye forestillinger om atomernes bygning. Sammen med Dirk Coster lykkedes det Bohr at indpasse det røntgenspektroskopiske erfaringsmateriale i sin teori på smukkeste vis. Et af de kontroversielle punkter i Bohr's forklaring på det periodiske system var afgrænsningen af de sjældne jordmetallers gruppe, idet Bohr ud fra nogle ret vage symmetriargumenter mente, at der måtte være netop 14 sjældne jordarter, og at disse måtte slutte ved atomnummer 71. Denne opfattelse var i modstrid med herskende kemiske opfattelser, der opererede med flere sjældne jordarter, heriblandt det endnu ukendte grundstof nr. 72. Da de sjældne jordarter efter Bohr defineres ved en udfyldning af den tredieyderste 'skal', og da røntgenstråler jo netop kommer fra indre kvanteovergange, forsøgte han at finde støtte for sit synspunkt ved hjælp af røntgenspektroskopiens resultater. Sammen med Coster lykkedes det Bohr at fortolke røntgenfrekvenserne i god overensstemmelse med teorien. At røntgenspektroskopien ikke gav nogen utvetydig bekræftelse af Bohr's teori var dog klart; ikke mindst i Paris, hvor Dauvillier og de Broglie ved hjælp af tilsvarende metoder og data nåede til væsentligt andre resultater. I 1921-22 var studiet af atomstruktur og røntgenspektroskopi opdelt i to rivaliserende lejre, den ene i Paris og den anden i København og Lund. Uenigheden drejede sig om eksperimentel pålidelighed såvel som om teoretisk fortolkning af måleresultaterne. Specielt havde franskmændene en anden opfattelse af, hvorledes de sjældne jordarter skulle afgrænses og mente, at nr. 72 måtte være en sjælden jordart. De tidligere kontroverser mellem København og Paris m.h.t. den korrekte brug af røntgenspektroskopi i studiet af atomstrukturen blev fortsat i den langt mere bitre konflikt omkring prioriteten til opdagelsen af grundstof 72.

Table 1. Development of Bohr's configurations of electrons in the noble gases. The configurations in the scheme are not immediately comparable, since I have written them in the original nomenclature, which differed in the various representations; for the meaning of the symbols see the text. For the sake of comparison, Stoner's distributions have been written in Bohr's nomenclature, that is, without taking into account the subdivision according to the inner quantum number.

Source Element	Bohr, Phil. Mag. (1913)	Bohr, Nature (Feb. 1921)	Bohr, Nature (Sep. 1921)	Bohr, Fys. Tidsskr. (Oct. 1921)	Stoner, Phil. Mag. (Oct. 1924)
2 He	2	2_1	2_1	$(1_1)^2$	$(1_1)^2$
10 Ne	8,2	$2,8_2$	$2,8_2$	$(1_1)^2(2_1)^4(2_2)^4$	$(1_1)^2(2_1)^2(2_2)^6$
18 Ar	8,8,2	$2,8_2,8_2$	$2,8_2,8_2$	$-(3_1)^4(3_2)^4$	$-(3_1)^2(3_2)^6$
36 Kr	—	$2,8_2,18,8_2$	$2,8_2,18,8_4$	$-(3_1)^6(3_2)^6(3_3)^6$ $(4_1)^4(4_2)^4$	$-(3_1)^2(3_2)^6(3_3)^{10}$ $(4_1)^2(4_2)^6$
54 Xe	—	$2,8_2,18_2,18,8_2$	$2,8_2,18_2,18,8_2$	$-(4_1)^6(4_2)^6(4_3)^6$ $(5_1)^4(5_2)^4$	$-(4_1)^2(4_2)^6(4_3)^{10}$ $(5_1)^2(5_2)^6$
86 Rn	—	$2,8_2,18_2,32,18,8_2$	$2,8_2,18_2,32,18,8_2$	$-(4_1)^6(4_2)^6(4_3)^6(4_4)^6$ $(5_1)^6(5_2)^6(5_3)^6(6_1)^4(6_2)^4$	$-(4_1)^2(4_2)^6(4_3)^{10}$ $(5_1)^2(5_2)^6(5_3)^{10}(6_1)^2(6_2)^6$

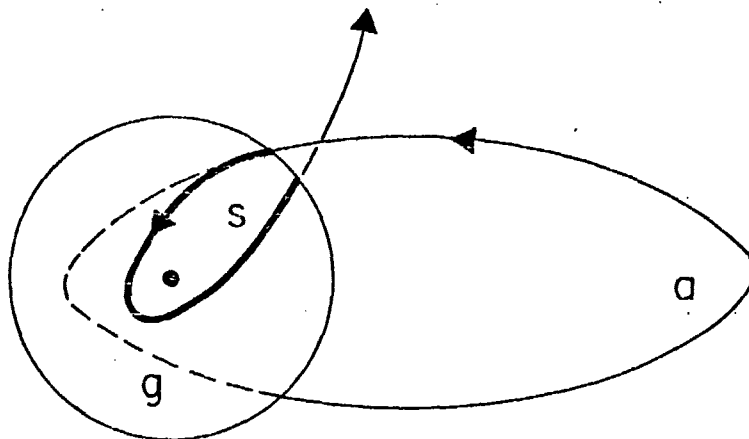


Figure 3. The concept of penetrating orbits used by Bohr in Göttingen and on other occasions. The figure may, for instance, illustrate Bohr's ideas on the alkali atoms in which the optical electron penetrates the kernel with noble gas structure, here symbolized by the circle.

A.3. Atomstruktur mellem Fysik og Kemi (2), (3), (4)

Jeg har nævnt, hvorledes man i studiet af atomernes opbygning historisk og metodologisk kan skelne mellem to traditioner, en kemisk og en fysisk. Netop atomernes struktur, altså spørgsmålet om antallet, fordelingen og tilstanden af givne atomers elektroner, er et emne, der har interesse for både fysikere og kemikere, og som ikke klart hører under den ene af de to videnskaber. Dette forhold, og de forskellige metoder, der karakteriserer de to fag, gav omkring 1922 anledning til ganske forskellige vurderinger af Bohr's teori i de to lejre; og det forårsagede en vis rivalisering, der i forbindelse med opdagelsen af hafnium gav sig markante udslag.

Ved fremkomsten af Bohr's teori blev den overalt positivt modtaget af fysikerne, omend den blev vurderet forskelligt. Hos Tysklands teoretiske fysikere, med hvem Bohr havde en nær professionel og personlig kontakt, fik teorien entusiastisk støtte, men ud fra i det væsentligste forkerte forudsætninger. I starten troede de tyske teoretikere nemlig, at Bohr havde baseret teorien på kvanteteoretiske beregninger og således havde virkeliggjort den gamle Kantske drøm om en matematisk kemi. Som nævnt var dette ikke tilfældet, og ved Göttingen møderne fik de tyske fysikere en mere realistisk forestilling om ånden i Bohr's teori. For nogle af dem, f.x. Sommerfeld og Born, blev forståelsen af den Bohrske blanding af generelle principper og induktivt ordnet erfaringsmateriale en skuffelse, idet det ikke modsvarede deres forventninger om en teoretisk atommekanik. Sommerfeld var ude af stand til at værdsætte Bohr's intuitive brug af symmetri- og korrespondensargumenter og mente nu, at Bohr's teori var rent fænomenologisk. Andre fysikere af den ældre årgang, f.x. Rutherford, mente ligeledes, at teorien var induktiv-empirisk, og

at dens styrke mest lå i dens evne til at sammenfatte velkendte fænomener og forudsige nye.

For mange af den unge generations fysikere, der i løbet af få år skulle skabe den nye kvantemekanik, var det imidlertid de generelle forklaringsprincipper i Bohr's teori, der virkede inspirerende. For både Heisenberg og Pauli, der som studenter deltog i Göttingen seminarerne, virkede Bohr's program stærkt fascinerende. Filosofien i Bohr's teori, at der måtte søges generelle forklaringer på det periodiske system, var af afgørende betydning for Pauli, da han nogle år senere formulerede det udelukkelsesprincip, der nu er accepteret som den teoretiske baggrund for grundstoffernes periodicitet.

Når teorien kunne blive så forskelligt vurderet af samtidens fysikere, skyldtes det dens kvalitative og mystificerende præsentation, der tillod vidt forskellige fortolkninger. Men det skyldtes også forskellige opfattelser af, hvad en teoretisk forklaring i fysikken burde være. Bohr mente, at hans kvalitative brug af korrespondensprincip m.v. var en acceptabel teoretisk forklaring, mens f.x. Sommerfeld opfattede de Bohr'ske principper som fænomenologiske, som blot nogle udtryk for empiriske data. Fysikernes forskellige vurderinger var således også et udtryk for forskellige psykologiske træk, for hvad man ville acceptere som en fysisk teori.

Det periodiske system som forskningsområde 'tilhører' jo traditionelt kemien, og også efter 1913 var det genstand for teoretisk interesse fra kemikernes side. Den kemiske approach, sådan som dyrket af folk som Lewis, Langmuir og Bury, var som nævnt væsensforskellig fra fysikernes forsøg på at forklare det periodiske system, idet man ikke interesserede sig for opstillingen af fysisk konsistente atomstrukturer, men for at modellere atomerne direkte efter de kemiske erfaringer. I overensstemmelse med kemikernes

måde at tænke på, og deres ønske om at skabe kemisk forståelige og anvendelige atommodeller, vurderede de Bohr's model ganske anderledes, end fysikerne gjorde. I den udstrækning kemikerne overhovedet forstod og interesserede sig for teorien, var de mere reserverede og langt fra imponerede. Og som kemikere havde de heller ingen grund til begejstring for Bohr's teori, som faktisk ikke var i stand til at kaste meget lys over de problemer, der optog kemikerne. M.h.t. en forståelse af den covalente binding, redoxprocesser, koordinationsforbindelser m.v. gav Bohr's teori ikke meget håb. Kemikerne var derfor kølige over for teorien, hvis ånd og indhold de ikke helt forstod. De foretrak at opfatte den efter deres egne standarder, som en induktiv-empirisk teori; og som sådan havde den ingen væsentlige fortrin fremfor Lewis-Langmuir teorien. Når kemikerne i 1923 alligevel værdsatte Bohr's teori, var det p.g. af dens enkelte kemisk interessante resultater; især blev opdagelsen af hafnium, forudsagt af teorien, opfattet som et vigtigt resultat.

Blandt kemikerne var der adskillige forsøg på at forene Bohr's dynamisk-fysiske atom med det kemisk set mere profitable statiske atom; forsøg, der dog blot viste, at man helt misforstod intentionerne og pointerne hos Bohr. Kemikernes tiltro til, at en forståelse af atomernes elektronarrangementer bedre kunne opnås induktivt, gennem en omfattende systematisering af det samlede kemiske erfaringsmateriale, syntes at blive bekræftet allerede i 1924, hvor Main Smith gennem en sådan kemisk metode udviklede et fuldstændigt system af elektronkonfigurationer. Main Smith's resultater afveg fra Bohr's, men var i overensstemmelse med det af Stoner foreslåede system, der byggede på røntgenspektroskopi. For kemikerne var det periodiske system hermed forklaret, mens fysikerne, *qua* fysikere,

stadig måtte søge efter de generelle lovmæssigheder, der lå bag de induktivt indvundne kvantetal for grundstoffernes elektroner.

De kemikere, der aktivt interesserede sig for Bohr's teori og for atomstruktur i det hele taget, var fåtalige og ikke særligt repræsentative for datidens kemikersamfund. Traditionelt har kemien altid levet på et stærkt empirisk paradigme, hvor man bevidst har modsat sig spekulationer om stoffets mikrostruktur. Denne holdning var også dominerende i tyverne, hvor den traditionelle kemis modsætningsforhold til den ny atomfysik kom klart frem i forbindelse med grundstof nr. 72. Mange kemikere var foruroliget over, hvad de anså for fysikkens skamløse indtrængen på deres forskningsområde, grundstoffernes kemiske egenskaber. Fysikernes drøm om at skabe en matematisk kemi var et mareridt for disse kemikere, der så deres faglige identitet og videnskabelige legitimation truet; ganske vist var idealet om den matematiske kemi også mange kemikers drøm, men i og med at denne drøm nu syntes på vej til at blive realiseret, truede den vitale dele af kemikersamfundets interesser. Et af de anerkendte felter for traditionel analytisk kemi var opdagelsen af nye grundstoffer, og især på dette område havde kemikerne fået hård konkurrence efter Moseley havde skabt grundlaget for en hurtig og entydig identifikation af grundstoffer ud fra deres karakteristiske røntgenspektre.

Antallet og klassificeringen af de sjældne jordarter var i årtier blevet dyrket som et speciale under den analytiske kemi, uden at man havde opnået en klar forståelse af spørgsmålet. I 1921, hvor Bohr gav sit atomfysiske begrundede bud herpå, mente de fleste kemikere, at nr. 72 måtte være en sjælden jordart, modsat Bohr's opfattelse. Faktisk havde kemikerne søgt efter dette grundstof i mange år med deres ar-

bejdskrævende og kostbare analyseteknikker. Nu kom atomfysikerne med al deres matematik og deres smarte apparater og påstod, at nr. 72 måtte være homolog med zirkonium, selv om kemikernes erfaring sagde noget andet. Ja, de udefra kommende københavnske fysikere påstod endda at have bekræftet dette eksperimentelt, ikke med kemiens anerkendte og afprøvede analysemetoder, men med den ny fysiske teknik, røntgenspektroskopien.

Den prioritetsstrid, der fulgte efter forudsigelsen og opdagelsen af hafnium i København i slutningen af 1922, blev bl.a. næret af den her antydede professionelle jalousi. Det er karakteristisk, at hafnium blev afvist af alle de traditionelle kemikere, der i årevis havde beklaget sig over atomfysikernes utildige indblanding i deres videnskab, opdagelsen af grundstoffer. Og det er karakteristisk, at oppositionen mod hafnium kun i ringe grad beskæftigede sig med Bohr's teori og dens eksperimentelle støtte, men mest var baseret på extravidenskabelige argumenter. En af hafniums rivaler var 'oceanium', et stof som kemikeren Scott havde fundet før Coster og Hevesy's hafnium, og som nu blev lanceret som det 'rigtige' nr. 72. Skønt Scott's påstand savnede enhver berettigelse, blev den en tid bakket helhjertet op af det engelske kemikersamfund; dels fordi opdagelsen var engelsk, dels fordi den var kemisk.

En tilsvarende fagpolitisk diskussion, med baggrund i kemikernes ønske om at forsvare deres professionelle interesser og standarder, udspandt sig i forbindelse med en anden rival til pladsen som nr. 72 i det periodiske system, celtium. Dette stof var først blevet fundet i 1911 af kemikeren Urbain ved hjælp af traditionel analyseteknik og var en sjælden jordart, således som kemikerne forventede. I 1923, hvor man diskuterede, hvorvidt celtium eller hafnium skulle anerkendes som nr. 72, støttede de fleste kemikere celtium. Dette stof var historisk og metodologisk tæt knyttet til den kemiske tradition og, følte mange,

en anerkendelse af hafniums prioritet ville derfor også være et nederlag for den traditionelle kemiske videnskab og dens krav på at være den retmæssige udforsker af grundstofferne. Modsat var hafnium associeret med den mistænkelige atomteori og ville således åbne dørene for en yderligere kolonisering af kemien fra fysikkens side. Sådanne argumenter blev selvfølgelig ikke klart fremført i prioritetsstriden. Det har aldrig været anerkendt at blande fagpolitik ind i videnskab. Men det sker alligevel hyppigt, og i dette tilfælde er det fagpolitiske element i kemikernes argumentation klart. Især den czekoslovakiske kemiker Bohuslau Brauner, en anerkendt veteran i udforskningen af de sjældne jordarter, havde svært ved at skjule sit politiske ubehag mod hafnium. Bohr's teori, sagde han, kunne være god nok for atomfysikerne, men dens anvendelse på de sjældne jordarter viste kun fysikernes beklagelige mangel på 'kemisk sans', en sans der kun var givet professionelle kemikere.

Den officielle anerkendelse af hafnium trak ud i adskillige år, selvom sagen videnskabeligt set burde være afsluttet i 1923. En medvirkende faktor til modviljen mod hafnium var igen den professionelle rivalisering mellem kemikere og fysikere. Anerkendelse og navngivning af nye grundstoffer foregår i regi af den Internationale Kemiske Union, d.v.s. bestemmes af ledende kemikere. Disse kemikere var betænkelige ved at acceptere det atomfysisk baserede hafnium og samtidig diskreditere celtium, hvis opdager var en meget fremtrædende person i det internationale kemiske miljø.

A.4. Prioritetsstriden omkring Hafnium (2), (4)

Som nævnt var det af Coster og Hevesy i forbindelse med Bohr's teori opdagede grundstof med atomnummer 72, hafnium, fra sin fødsel involveret i en prioritetskonflikt. For noget tidligere havde Urbain og Dauvillier i Paris bekendtgjort målinger af røntgenlinier fra det af Urbain i 1911 isolerede stof, celtium. Disse frekvenser svarede til atomnummer 72 efter Moseley's lov. I 1923 fik hafnium endnu en konkurrent under navnet oceanium, som jeg dog ikke skal omtale yderligere her. Detaljerne i hafnium-celtium konflikten er ganske indviklede, men udgangspunktet var, at celtium var identificeret som en sjælden jordart, mens hafnium var fundet som en zirkonium homolog, tilhørende gruppe fire, i overensstemmelse med Bohr's teori. Derfor blev diskussionen om, hvorvidt nr. 72 var fundet i Paris eller København, ikke blot til en meriteringsstrid, men af væsentlig teoretisk interesse, idet den blev af betydning for vurderingen af Bohr's atomteoretiske forestillinger.

Nu blev det hurtigt klart, at nr. 72, uanset hvor det først var blevet fundet, faktisk måtte tilhøre gruppe fire i det periodiske system, og grundstoffets opdagelse blev således en triumf for Bohr's teori. Imanges øjne var hafnium endda den afgørende eksperimentelle bekræftelse på Bohr's teori, som da også blev fremstillet, som om den præcist forudsagde det nye grundstofs egenskaber. I virkeligheden er den indre forbindelse mellem Bohr's atomteori og hafniums opdagelse kun svag. Bohr's forudsigelse af hafnium var i det væsentlige en påstand, med støtte i meget vage og intuitive argumenter, og langt fra en overbevisende forudsigelse af samme type som f.x. forudsigelsen af neptun. Der er intet i Bohr's fremstilling

af sin teori, der utvetydigt foreskriver, at nr. 72 må have fire yderste elektroner. Og faktisk blev hafnium ikke fundet som et eksperimentelt svar på Bohr's 'forudsigelse', som et slags *crucial experiment*.

Alligevel blev hafnium ofte af københavnerne fremstillet som uadskilleligt forbundet med teorien. Derved blev Bohr's autoritet overflyttet til hafnium, og efter accepten af hafnium blev opdagelsen brugt til at styrke teoriens autoritet.

(Efter jeg skrev om hafniums opdagelse, er jeg blevet opmærksom på, at Popper i "The Logic of Scientific Discovery" (s.69) bruger denne opdagelse som et eksempel på en forudsigelse, der er 'videnskabelig' - ikke har karakter af et rent eksistensudsagn - fordi den var teoretisk funderet i Bohr's teori. "... all attempts to find it were in vain until Bohr succeeded in predicting several of its properties by deducing them from his theory", skriver Popper. Dette er imidlertid ganske forkert, således som min historiske analyse viser; Popper's eksempel er misvisende, omend det ikke berører hans almindelige tese om eksistensudsagns ikke-videnskabelige karakter).

Hafnium-celtium kontroversen gennemløb forskellige faser, hvis indhold jeg ikke her behøver at komme ind på. Jeg skal nøjes med at henvise til enkelte punkter, der har en mere principiel interesse for videnskabshistorien og videnskabssociologien.

Først kan man spørge, om det overhovedet er en rimelig beskæftigelse for videnskabshistorikere at undersøge prioritetsproblemer, hvem der ud af flere kandidater opdagede hvad, og hvornår. Bør den slags ikke overlades til psykologer, biografer og populærvidenskabelige forfattere? Det bør den ikke, for der er vigtige videnskabsteoretiske og -sociologiske

pointer gemt i prioritetsproblematikken. Disse pointer er blevet fremhævet af bl.a. Merton, Kuhn og Lakatos og viser ikke blot, at prioritetsstridigheder er interessant studiemateriale, men også at de spiller en helt rationel, og i almindelighed progressiv rolle i videnskabens udvikling. Deres rolle er nemlig langt fra kun at udpege den kandidat, der bør hædres for en bestemt opdagelse, men også at afgøre hvilket forskningsprogram der skal anses for progressivt. Derfor er prioritetsstridigheder til en vis grad konstituerende for fremtidens faglige forskningspolitik.

Urbain og Dauvillier's krav om at have opdaget nr. 72 hvilede på blot to yderst svage røntgenlinier, altså et skrøbeligt eksperimentelt grundlag. Hvorvidt disse linier nu også stammede fra nr. 72, blev debattens hovedemne. Franskmandene mente, at der var utvetydige beviser for deres påstand, men i København var man tilbøjelig til at mene, at linierne overhovedet ikke fandtes, og at franskmandene var ofre for selvsuggestion eller direkte havde svindlet. Linierne - hvis de eksisterede - var så svage, at de ikke kunne reproducere fotografisk og blev faktisk kun set af de franske videnskabsmænd selv. Hvorvidt det franske bevismateriale har eksisteret i sædvanlig objektiv forstand, vil aldrig blive opklaret. Men det er i sig selv bemærkelsesværdigt, at videnskabsmænd opfatter fremtrædende kollegers eksperimentelle materiale som i virkeligheden ikke-eksisterende, som et udtryk for psykiske, ikke fysiske, tilstande. Eksempler på, at observationer, eller 'observationer', kan skyldes stærke personlige ønsker om at observere noget, men ikke kan observeres af andre, og således ikke opfylder det sædvanlige krav om transsubjektivitet, er dog ikke helt usædvanlige i videnskabens historie, heller ikke i nyere tid.

Diskussionen om pålideligheden af de franske røntgenlinier udartede snart til ren propaganda, blot-
tet for videnskabelig rationalitet. Mens påstand
stred mod påstand i dette spørgsmål, blev hafniums
praktiske overlegenhed demonstreret i København.
Til dels som følge af den pinlige prioritetsstrid
iverksatte man et omfattende forskningsprogram,
der i løbet af meget kort tid resulterede i et
næsten komplet kendskab til det nye grundstofs
fysiske og kemiske forhold og til isoleringen af
det i større mængder. Disse og andre undersøgelser
var en direkte følge af kontroversen og ville ikke
have fundet sted i det omfang og med den hast, hvis
ikke der havde været tale om multiple opdagelser med
en tilhørende prioritetsstrid. At prioritetskonflikter
ofte har en sådan forskningsfremskyndende effekt, er
blevet fremhævet af Merton.

Selvfølgelig bliver netop spændte situationer som
prioritetskonflikter, der principielt ligger uden for
anstændig videnskabelig praksis, nemt ofre for myte-
dannelse og historieforfalskning. Dette var også til-
fældet med hafnium-celtium kontroversen, hvor man
hyppigt tog tilflugt til direkte usandheder i det
stadig mere desperate forsvar for celtium. Og disse
usandheder og forvanskninger, hvis formål var at
legitimere det franske krav, er blevet gentaget af
enkelte senere kommentatorer. Det var iøvrigt karak-
teristisk for konflikten, at den mest blev udkæmpet
mellem udenforstående tilhængere, mens de direkte
involverede forskere holdt sig mere beskedent i
baggrunden. Også dette forhold synes at være et
almindeligt træk ved prioritetskonflikter, som
fremhævet af Merton.

I foråret 1923 var det videnskabelige indhold i
kontroversen udtømt, og den antog en ulige karakter,
idet københavnerne valgte at indstille kampen, sikre

på sejren. Men dette betød langtfra afslutningen på konflikten, der nu antog en stadig mere tydelig 'politisk' karakter.

Et af disse 'politiske' aspekter var knyttet til kemikernes mistillid til, hvad man fornemmede som den truende fysiske fagimperialisme, idet man associerede celtium med traditionelle kemiske interesser, hafnium med atomfysikkens. Dette fagpolitiske aspekt er omtalt i A.3. En anden og formentlig endnu vigtigere grund til, at prioritetsstriden kunne udvikle sig hinsides alle videnskabeligt rimelige grænser, lå i det datidige Europas magtpolitiske forhold. Den internationale forskningspolitik var i tyverne stærkt præget af spændingerne mellem krigens tabere og sejrherre, der bl.a. gav sig udslag i en allieret boykot af tysk videnskab. Denne situation skabte en almindelig stemning af hysterisk nationalisme i især England og Frankrig, boykotbevægelsens 'høge'. Videnskabsmændenes ideologi blev splittet mellem patriotisme og deres traditionelle tro på videnskabens supernationale karakter. Der er selvfølgelig intet nyt i, at heller ikke videnskabsmænd er immune over for patriotisme og andre former for national eller politisk loyalitet, og at dette bringer dem i konflikt med den videnskabelige ethos. I forbindelse med hafnium-celtium sagen kan man følge, hvorledes chauvinistiske tendenser virker i et bestemt tilfælde.

I Frankrig og England blev opdagelsen af hafnium mere eller mindre opfattet som en skummelt forsøg på at tilsmudse de militære sejrherres videnskab, som et led i en tysk revanchistisk politik på forskningsfronten. En sådan opfattelse kan synes utrolig, ikke mindst i betragtning af at hafnium jo ikke var en tysk opdagelse, men blev fundet i det neutrale Danmark af en ungarer (Hévesy) og en hollænder (Coster). Men patriotismens pervers logik associerede

alligevel hafnium med en slags 'teutonisk videnskab'. Bl.a. accepterede høgene i de allieredes boykotbevægelse ikke Danmark som ægte neutralt, men opfattede den danske politik som i realiteten tysk-venlig. Blot det forhold, at Hevesy under krigen gjorde militærtjeneste i den østrig-ungarske hær, gjorde det vanskeligt at acceptere hafnium officielt i den betændte atmosfære, der herskede i Europa omkring 1923. Det er et deprimerende vidnesbyrd om de politiske kræfters betydning, at hafnium først blev officielt anerkendt i 1930, efter at den anti-tyske boykot var ophævet og det internationale forskningssystem reorganiseret.

Mange af de træk, der karakteriserer prioritetsstriden omkring grundstof nr. 72, er formentlig gyldige også for de fleste andre prioritetskonflikter, der dog heldigvis sjældent når den bitterhed, som prægede det her studerede tilfælde. Flere af de i vort århundrede opdagede grundstoffer har en opdagelsehistorie, der næsten til forveksling ligner hafniums.

B.1. Bølgemekanikkens Fødsel (5)

Det, vi i dag kender som kvantemekanikken, er resultatet af en sammensmeltning af to meget forskellige fysiske teoridannelser, matrixmekanikken og bølgemekanikken. Disse to teorier var baseret på væsentligt forskellige forskningsprogrammer, de havde vidt forskellig baggrund og tilblivelseshistorie og fremstod ved deres skabelse som to formelt og begrebsmæssigt adskilte teorier. Matrixmekanikken - eller kvantemekanikken, som den ofte blev benævnt i de første år - blev især udviklet af tyske fysikere omkring Göttingens universitet og kan betragtes som resultatet af forsøg på at løse de kriser, som den gamle kvanteteori havde viklet sig ind i. Der går en lige, omend ikke simpel, linie fra Bohr-Sommerfeld teorien og dens anvendelse inden for især spektral- og dispersionsfysik frem til Heisenberg's og andres matrixmekanik. Disse problemer var ganske uvæsentlige for skabelsen af bølgemekanikken, der bygger på en anden tradition og tankegang. Også i sociologisk henseende viser denne forskel sig: mens Göttingen mekanikken blev til i form af team-work, et frugtbart samarbejde mellem en lille gruppe danske, hollandske og tyske fysikere, så var bølgemekanikken i høj grad produktet af en enkelt forskers geni.

Men selvom bølgemekanikken ubetinget skyldes Erwin Schrödinger alene, så skabte han selvfølgelig ikke sin teori ud af intet. Den havde vigtige forudsætninger i især Einstein's og de Broglie's arbejder. Einstein's indflydelse på bølgemekanikken foregik gennem relativitetsteorien og, mere umiddelbart, gennem hans vigtige bidrag til den statistiske kvanteteori fra omkring 1924. Schrödinger's indgang til en ny atomfysik, baseret på bølgeforestillinger, skete via et kritisk studium af den af Einstein og Bose påbegyndte statistiske kvanteteori for gasser.

Med nogen ret kan man sige, at Schrödinger's arbejde "Zur Einsteinschen Gastheorie", afsluttet i midten af december 1925, betegner første fase i hans bølgemekaniske forskningsprogram.

Men den statistiske approach er principielt ikke orienteret mod spørgsmål om atomernes struktur, og på trods af Einstein's utvivlsomt inspirerende indflydelse ville en egentlig bølgemekanik ikke kunne være blevet skabt på den kvantestatistiske basis alene. Af større betydning for Schrödinger var mødet med de Broglie's ideer, der også selv stod i afgørende gæld til Einstein's teorier inden for relativitetsmekanik og kvantestatistik. Med stor ret kan man betegne bølgemekanikken som kulminationen af et Einstein-de Broglie-Schrödinger program, som iøvrigt fortsatte i den senere diskussion om den korrekte fortolkning af kvantemekanikken. Fra de Broglie overtog Schrödinger den generelle ide om en dybtliggende forbindelse mellem partikler og bølger, idet han dog stræbte mod en ren bølgeteori, hvori materielle partikler blev repræsenteret ved bølgepakker, og ikke en dualistisk partikel-bølge opfattelse, sådan som de Broglie foreslog. Specielt blev Schrödinger af de Broglie inspireret til at anvende sine ideer på problemet om det enkelte atoms opbygning, og i denne forbindelse til at opstille den fundamentale bølgeligning for atomets energiværdier.

Denne ligning - Schrödingerligningen - er et helt afgørende udgangspunkt for hele bølgemekanikken, og derfor må et historisk studium heraf i høj grad fokusere på, hvorledes Schrödingerligningen blev til. I forsøgene på at rekonstruere Schrödinger's vej til sin bølgeligning, og derved til bølgemekanikken, har man naturligt nok koncentreret sig om de første artikler, hvori ligningen fremkom, nemlig første og anden del af Schrödinger's monumentale serie "Quantisierung als Eigenwertproblem". Dette har ført til

noget forskellige opfattelser af Schrödingerligningens skabelse, idet de to udledninger, Schrödinger gav i Q_1 (første del af "Quantisierung", dateret 28. januar 1926) og Q_2 (anden del, dateret 23. februar 1926), er meget forskellige og til dels uigennemskuelige. Spørgsmålet om, hvorvidt Q_1 eller Q_2 metoden var Schrödinger's originale, er blevet besvaret forskelligt af fysikhistorikere. Og ligeledes er der forskellige opfattelser af, hvornår Schrödinger først fandt sin ligning. Dette hænger igen sammen med spørgsmålet om Schrödingerligningens ikke-relativistiske form, idet vi ved, at Schrödinger oprindeligt forsøgte at konstruere en relativistisk teori og herunder faktisk fandt en relativistisk bølgeligning, der imidlertid aldrig blev publiceret. I min rekonstruktion af Schrödingerligningens skabelseshistorie, som jeg straks skal antyde, har jeg vist, at Schrödinger's originale metode hverken er den i Q_1 eller Q_2 anførte, men en helt tredje. Desuden har jeg givet en nøjagtigere, og mere pålidelig, version af de overvejelser, der ledte Schrödinger fra sin først nedskrevne ligning til den endelige publicering. Det væsentligste kildemateriale i denne henseende har været Schrödinger's videnskabelige notesbøger. Dette uvurderlige materiale har af en eller anden grund hidtil undgået historikernes opmærksomhed.

Idet jeg undlader al dokumentation og henvisninger til på hvilke punkter min analyse adskiller sig fra tidligere fremstillinger, kan min rekonstruktion af Schrödingerligningen fremstilles således, stærkt komprimeret:

Schrödinger studerede indgående de Broglie's teori i slutningen af oktober 1925. Anledningen var et kollokvium i Zürich under Debye, hvor Schrödinger skulle rapportere om de Broglie's ideer. Dette studium in-

spirerede Schrödinger til at anvende de Broglie's synspunkter på brintatomets stationære tilstande og til at søge efter den tilhørende bølgeligning. Senest omkring midten af december 1925 havde Schrödinger fundet sin ligning. Dette kan ikke have voldt ham besvær, idet han så at sige udkrystalliserede den af de Broglie's arbejder. Denne, formentlig første, metode havde sit udgangspunkt i to af de Broglie's formler: For en Coulomb-bundet elektron er fasehastighed og frekvens af elektronbølgen givet ved

$$v = \lambda \nu = \frac{h}{p} \cdot \nu = \frac{h\nu}{m\beta c} \sqrt{1 - \beta^2}$$

og

$$h\nu = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - \frac{e^2}{r}$$

Elimineres partikelhastigheden β herfra, fås fasehastigheden som funktion af ν og r . Indsættes i bølgeligningen

$$\Delta \psi + k^2 \psi = 0 \quad \text{med} \quad k = \frac{2\pi\nu}{v}$$

fås direkte

$$\Delta \psi + \frac{4\pi}{h^2} m^2 c^4 \left[\left(\frac{h\nu}{mc^2} + \frac{e^2}{mc^2 r} \right)^2 - 1 \right] \psi = 0 \quad (1)$$

Denne ligning optræder i Schrödinger's noter om "H Atom, Eigenschwingungen", formentlig skrevet i slutningen af 1925. Sætter man $E=h\nu$, genkender man Klein-Gordon ligningen, den relativistiske Schrödingerligning.

Ved juletid 1925 havde Schrödinger altså fundet egenværdiligningen for brintatomet på relativistisk form. Hvorvidt denne ligning havde nogen som helst værdi, kunne kun afgøres ved at løse den, d.v.s. finde energiegenværdierne og sammenligne disse med de eksperimentelt bestemte. Brints energispektrum var i forvejen præcist angivet ved Sommerfeld's

finstrukturformel fra 1916, og Schrödinger håbede derfor, at hans ligning ville reproducere Sommerfeld's udtryk.

Energiegenværdierne til (1) fremgår af dens radiale del, der har formen

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\chi}{dr} + \left(A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2} \right) \chi = 0$$

Løsningen af denne ligning voldte Schrödinger store problemer, der blev overvundet omkring midten af januar 1926. Schrödinger fandt et resultat, der stemte med finstrukturformlen, men med andre værdier for kvantetallene. Denne forskel er imidlertid aldeles ødelæggende for teoriens overensstemmelse med erfaringen, således at Schrödinger måtte erkende, at (1) ikke kunne være den helt korrekte ligning. Men den var besnærende tæt ved, og Schrödinger skrev formentligt et manuskript til publicering om sin relativistiske bølgeligning. Dog kun for at trække det tilbage og erstatte det med et andet, hvori der kun var en kort hentydning til relativitet. I sin endelige artikel, Q₁, baserede Schrödinger sine beregninger på den ikke-relativistiske tilnærmelse af (1), men den matematiske diskussion af egenværdiløsningerne var iøvrigt en tro kopi af den tidligere, relativistiske behandling.

Når Schrödinger valgte at publicere en ikke-relativistisk teori, var det formentligt af taktiske grunde, idet han derved kunne reproducere Bohr's energitermer og fremstille sit program i en empirisk mere overbevisende form. Mens løsningen af Schrödingerligningen i Q₁ sker i nøje overensstemmelse med den originale, relativistiske metode, så er selve udledningen af bølgeligningen helt forskellig. Q₁ metoden er blottet for hentydninger til de Broglie's bølgeforestillinger og er i det hele taget ejendommelig formel og fysisk ubegrundet.

Den virker udpræget *ad hoc*, kun berettiget via sit resultat. Denne *ad hoc* karakter kan forstås ud fra, at Schrödinger allerede kendte resultatet, nemlig fra den ikke-relativistiske tilnærmelse til (1). Q_1 metoden er i det væsentlige en oversættelse af den analytiske mekaniks energiligning, hvor der for virkningsfunktionen S substitueres

$$S = K \ln \psi$$

Ved at udsætte den herved fremkomne ligning for et mindstevirkningskrav, nemlig

$$\delta \int [(\nabla\psi)^2 - \frac{2m}{K^2} (E + \frac{e}{r^2})\psi^2] dx dy dz = 0$$

fås ligningen

$$\Delta\psi + \frac{2m}{K^2} (E + \frac{e}{r^2})\psi = 0$$

D.v.s. Schrödingerligningen for $K = \frac{h}{2\pi}$. Denne procedure, som Schrödinger selv betegner som "Unverständlich", har muligvis sin baggrund i optikken, idet Schrödinger ønskede at formulere en mikrobølgemekanik, der forholdt sig til den sædvanlige makromekanik, som bølgeoptikken forholder sig til den geometriske optik. Q_1 metoden blev oprindeligt af Schrödinger anvendt på det relativistiske tilfælde, hvor den imidlertid giver samme uheldige resultat som det ovenfor nævnte.

En fysisk acceptabel udledning af egenværdiligningen blev først givet i Q_2 . Denne version var baseret på Hamilton's gamle optisk-mekaniske analogi og på de Broglie's tanker og er ofte blevet antaget at have været Schrödinger's oprindelige bud på bølgemeknikken. Dette er imidlertid ikke rigtigt. Hamilton's analogi spillede dog en rolle, også i Schrödinger's tidligste overvejelser over den ny mekanik, modsat af hvad Armin Hermann har hævdet.

Schrödinger havde altså, i januar 1926, publiceret sin bølgeligning på urelativistisk form, som en erstatning for den empirisk utilfredsstillende relativistiske ligning. Selvom Schrödinger i foråret 1926 med stor succes udviklede sin fysik på dette grundlag, var han sig pinligt bevidst, at den ikke var i overensstemmelse med relativitetsteorien. For Schrödinger, som for andre af tidens fysikere, måtte en virkelig tilfredsstillende teori være relativistisk invariant, og Schrödinger gjorde da også flere forgæves forsøg på at reetablere bølgemeknikken i sin oprindelige relativistiske form. Retrospektivt må det betegnes som meget heldigt, at Schrödinger, omend modstræbende, gav afkald på sine relativistiske ambitioner og ikke gjorde Klein-Gordon ligningen til basis for sin bølgemekanik. En konsistent og generel kvantemekanik ville ikke have kunnet udvikles på basis af en ligning af Klein-Gordon typen.

B.2. Relativitetsteori og den Tidligste Kvantemekanik (5), (6)

I 1925 var den specielle relativitetsteori forlængst en fuldt accepteret bestanddel af den teoretiske fysiks redskabslager. Selvom der var uenighed om relativitetsteoriens filosofiske fortolkning, og selvom der blandt enkelte outsiders blev ført en kampagne mod den Einstein'ske fysik, så havde den specielle relativitetsteori som instrument og standard fået paradigmatiske status overalt i fysikkens frontforskning. Dette betød specielt, at fysiske love, også inden for atomteori, måtte være på Lorentz-invariant form. Som nævnt i B.1. spillede relativitetsteorien en afgørende

rolle for de Broglie' og Schrödinger's udvikling af bølgemeknikken. Det er faktisk svært at forestille sig, hvorledes bølgemeknikken historisk kunne være blevet til i et miljø, der ikke var domineret af det relativistiske paradigme.

Men også tidligere, før kvantemekanikken, havde der været bestræbelser på at knytte atomfysikken sammen med relativitetsteorien. Disse tidlige bestræbelser var ikke mindst knyttet til forsøgene på at give en kvanteteoretisk forklaring på spektrenes finstruktur, såvel i røntgenområdet som i det optiske område. Til dette formål havde Bohr i 1915 delvis inkluderet elektronens masseforøgelse i sin atomteori, måske det tidligste forsøg på at anvende relativistiske betragtninger i studiet af atomets struktur. En virkelig succesrig relativistisk teori for atomet blev kort efter givet af Sommerfeld, der udledte sin berømte finstrukturformel på dette grundlag. Sommerfeld's formel har spillet en ganske bemærkelsesværdig rolle i atomteoriens historie: Den gengav overmåde nøjagtigt de eksperimentelle resultater fra spektroskopien og syntes specielt at forklare brintatomet ned til mindste detalje. Succesen var imidlertid i en vis forstand ufortjent, idet overensstemmelsen med erfaringen skyldes en tilfældighed, da Sommerfeld's relativistiske kvantisering netop dækker over effekter af elektronens spin, som var ukendte i 1916. Derved forhindrede Sommerfeld's teori fremkomsten af en 'brintgåde' og sporede fysikernes interesse væk fra det simple brintatom. Hvorfor beskæftige sig med et fænomen, der allerede er fuldt opklaret?

Den gamle kvanteteoris stadig mere krisefyldte udforskning af spektrene gik da også uden om brintspektret. Mens kriserne hobede sig op i forbindelse med Zeemaneffekt, heliumspektrum og røntgendubletter,

stod brintatomet og dets forklaring via kvante-teori plus relativitet som en klippe i et uroligt hav. Det var først efter en lang og indviklet proces at interessen atter blev rettet mod brintatomet, og der blev rejst tvivl om den Sommerfeld'ske forklaring. Denne tvivl blev først til vished med kvantemekanikken og spinteorien.

Den i 1925 udviklede matrixmekanik adskilte sig, blandt meget andet, fra den senere bølgemekanik ved sit forhold til fysisk anskuelighed og til relativistisk overensstemmelse. Mens Schrödinger's test-case var et virkeligt fysisk system, brintatomet, og hans teori var udviklet i nøje tilknytning til relativitetsteorien, så fremstod Heisenberg's fysik som meget formalistisk og helt uden tilknytning til relativitetsteorien. Det var først i januar 1926, at matrixmekanikken blev anvendt på brintatomet og da i en urelativistisk udgave. Dette skete i et vigtigt arbejde af Pauli, der kunne reproducere Bohr's energiformel, d.v.s. nåede samme resultat som Schrödinger samtidigt havde fundet på helt anden vis. I virkeligheden var matrixmekanikkens overvejelser over relativitet og virkelige atomer dog af tidligere dato, hvilket upublicerede kilder viser.

Allerede på et meget tidligt tidspunkt, i foråret 1925, forsøgte Heisenberg at anvende sine ideer om virtuelle oscillatorer på brintatomet, og det var hovedsageligt p.g.a. matematiske komplikationer, at han blev tvunget til at forlade brintatomet til fordel for den uharmoniske oscillator som test-case. Men Heisenberg fortsatte forsøgene på at tackle brintatomet, omend uden held. Pauli's matrixmekaniske behandling var klar allerede i oktober 1925, men blev forsinket af frugtesløse forsøg på at inkludere relativitetsteorien, for derved også at kunne redogøre for finstrukturen. Ikke blot Pauli, men også Heisenberg og Jordan forsøgte i 1925 at formulere

matrixmekanikken relativistisk, d.v.s. på en invariant firedimensional måde. Disse forsøg, der ikke lykkedes, var især forbundet med den af Uhlenbeck og Goudsmit fænomenologisk indførte hypotese om spinelektroner.

Det viste sig umuligt at etablere en ægte relativistisk matrixmekanik, men Pauli-Jordan-Heisenberg metoden blev modificeret til alligevel at kunne redegøre for relativitets- og spineffekter. Dette muliggjordes ved at addere korrektionsled svarende til magnetiske og relativistiske bidrag i tilnærmelse. På denne måde udtrykte Heisenberg og Jordan i marts 1926 et atoms energi ved hamiltonfunktionen

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3$$

hvor f.x. H_3 er det relativistiske bidrag til det uperturberede brintatoms energi H_0 . H_3 indeholder middelværdier over r^{-1} og r^{-2} , og det var beregningen af sidstnævnte, der forhindrede Pauli i at give sin teori en relativistisk afslutning. I marts faldt brikkerne på plads, det relativistiske bidrag blev beregnet og spinbidraget ligeså. Heisenberg-Jordan teorien var et meget betydeligt bidrag til kvantemekanikken, idet den på overbevisende måde redegjorde for spektrenes udseende. Den reproducerede den tilnærmede Sommerfeld formel, men afslørede nu, at Sommerfeld's oprindelige rent relativistiske forklaring i virkeligheden dækkede over en kombination af spin og relativitet. Af stor betydning var også Heisenberg og Jordan's indføring af spinhypotesen i matrixmekanikken, hvilket skete ved at tilskrive elektronen et spinimpulsmoment, der bidrog med det dobbelte af baneimpulsmomentet til det samlede magnetiske moment.

På trods af sin instrumentelle succes var matrixmekanikken for atomer, som den fremstod i foråret 1926, ikke ganske tilfredsstillende. Jordan-Heisenberg teoriens redegørelse for spinnet var *ad hoc* præget, idet man blot havde overtaget spinhypotesen med den af Thomas indførte korrektionsfaktor. En egentlig forklaring af spinnet, d.v.s. en udledning inden for selve kvantemekanikkens rammer, blev ikke givet. Ligeledes var teorien jo ikke Lorentz-invariant, idet den kun inkluderede første ordens relativitet som en perturbation. Den matrixmekaniske behandling af relativitet var således anderledes end den fra starten invariante behandling, som Schrödinger stræbte efter. Den var i æstetisk henseende mindre tilfredsstillende, men viste sig praktisk overlegen, idet den fuldt ud matchede den eksperimentelle nøjagtighed.

At de to kandidater til en ny kvanteteori, matrixmekanikken og bølgemekanikken, på trods af deres forskelligheder var formelt identiske, blev klart i det tidlige forår 1926. Flere fysikere viste på denne tid den matematiske ækvivalens mellem de to teorier, først publiceret af Schrödinger. Ækvivalensbeviset, som gennemført af Schrödinger, byggede på matrix- og bølgemekanik i deres urelativistiske former. Hvorvidt ækvivalensen også holdt i det relativistiske tilfælde, blev ikke diskuteret på tryk, men Pauli, der uafhængigt af Schrödinger havde vist ækvivalensen, var opmærksom på problemet. I breve fra sommeren 1926 undersøger han den relativistiske Schrödingerligning og dens forhold til matrixmekanikken. Disse undersøgelser, der aldrig blev publiceret, viste, at den relativistiske Schrödingerligning vanskeligt kunne bringes til at harmonere med matrixmekanikken. Dette utilfredsstillende forhold fik Pauli til at tvivle på den Lorentz-invariante Schrödinger-teori og til at søge efter en bedre relativistisk

kvantemekanik. Disse bestræbelser førte dog ikke til noget resultat og blev først indfriet i 1928, med Dirac's teori.

De hidtil nævnte bestræbelser på at indføre relativitetsteorien i atomfysikken har alle drejet sig om den specielle relativitetsteori. I tyverne var der dog også mange forsøg på at forene kvanteteori med Einstein's generelle relativitetsteori. Disse forsøg viste sig i det væsentligste at være en blindgyde, men spillede en vigtig rolle i tiden. Især i de tidlige tyvere, hvor relativitetsteorien blev genstand for en voldsom videnskabelig og kulturel interesse, florerede disse forsøg på at skabe en syntese af Bohr-Sommerfeld atomteorien og gravitationsteorien. Disse forsøg må i dag betegnes som vildskud. Men også vildskud bærer blomster; et af disse vildskud, der skyldtes Schrödinger, viste sig betydningsfuldt for den senere skabelse af bølgemekanikken.

Det mest spændende forsøg på at sammenfatte gravitation, elektromagnetisme og kvanteteori i én stor teori, skyldtes Oskar Klein, en af Niels Bohr's assistenter. I sit ambitiøse projekt, der startede omkring 1922, blev Klein, helt uafhængigt af samtidige bestræbelser, ført til en bølgemekanisk opfattelse, der havde lighedspunkter med Schrödingers senere teori. Klein formulerede sine ideer indenfor rammerne af en femdimensional relativitetsteori og havde muligvis allerede i sommeren 1925, et halvt år før Schrödinger, etableret en generel relativistisk bølgeligning, der som særtilfælde har den relativistiske Schrödingerligning. På trods heraf forblev Klein's projekt dog uden væsentlig indflydelse på den videre udvikling. De syntetiske ambitioner - en forløber for vor tids *Grand Unified Theory* - bragte Klein ud i håbløse matematiske komplikationer, der endda tilslørede det fysiske indhold af hans ideer

i en sådan grad, at han ikke selv erkendte samhørigheden med de Broglie's teori, da han blev præsenteret for denne i sommeren 1925. Også af rent ydre årsager - langvarig sygdom og intellektuel isolation - blev Klein's projekt forsinket, således at det først blev formuleret efter Schrödinger's bølgemekanik. I april 1926 publicerede Klein endelig sin generel-relativistiske bølgemekanik, indeholdende den første relativistiske version af 'Schrödingerligningen'. I perioden derefter var der talrige andre forsøg på at formulere kvantemekanikken på en alment covariant måde, at forene de da kendte fundamentale naturlove. Klein's teori blev bl.a. fulgt op af Fock, Rosenfeld og de Broglie.

Den forenede feltteori, anno 1926, viste sig at være på det nærmeste impotent i fysisk henseende; den nåede aldrig rigtig ud over det spekulative og matematisk-formalistiske plan. En karakteristik, der også i nogen grad gælder senere anstrengelser inden for samme tradition.

B.3. Mod en Relativistisk Kvantemekanik (5), (6), (7)

Året 1926 frembragte en lang række bidrag til en relativistisk formulering af Schrödinger's bølgeligninger. Det første var, som nævnt, Klein's. Disse ligninger, nu kendt som Klein-Gordon ligningerne, kan for en fri elektron skrives

$$\left\{ \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right\} \psi = 0 \quad (2)$$

og

$$\Delta \psi + \frac{1}{\hbar^2 c^2} (E^2 - m^2 c^4) \psi = 0 \quad (3)$$

Af disse havde Schrödinger som nævnt udledt (3) på et tidligt tidspunkt, men upubliceret. Schrödinger offentliggjorde først sin behandling af en relativistisk bølgemekanik i juni 1926, hvor han gav en generaliseret version af (2). Men Schrödinger havde, nu som før, kun begrænset tiltro til den relativistiske ligning, idet han ikke kunne finde nogen udvej for egenværdiligningens tidligere nævnte utilstrækkelighed m.h.t. den spektrale finstruktur. Denne og andre vanskeligheder ved Klein-Gordon ligningen var fuldt erkendt, men afholdt ikke fysikere fra at arbejde flittigt med teorien.

"Der relativistischen Gleichung 2-Ordnungs mit den vielen Vätern", kaldte Pauli Klein-Gordon ligningen. Og Pauli's betegnelse var berettiget, for ligningen blev udledt af en halv snes fysikere i 1926, på forskellige og delvis uafhængige måder. En af fædrene var iøvrigt Pauli selv, der uafhængigt af Schrödinger konstruerede ligningen i et brev til Jordan i april. Pauli's metode var i det væsentlige identisk med Schrödingers oprindelige metode fra december 1925, en metode der også blev anvendt af de Broglie i juli. Andre metoder, især byggende på Schrödingers urelativistiske metoder fra Q_1 og Q_2 , blev samme år anvendt af bl.a. Gordon, Kudar, Fock og Guth. I efteråret 1926 var Klein-Gordon teorien da en etableret del af den nye kvantemekanik. Den udspringer af det klassisk-relativistiske energiudtryk

$$E^2 = c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4,$$

ved standard substitutionerne

$$p_k \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \quad \text{og} \quad E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

I 1926 blev Klein-Gordon ligningen anvendt med held på enkelte fysiske problemer, og det viste sig muligt at tilskrive den en strømtæthed, således som

vist af Klein og Gordon. For Schrödingerligningen var (sandsynligheds-) strømmen givet ved

$$\rho = \psi\psi^* \quad \text{og} \quad \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*),$$

der tilfredsstiller kontinuitetsligningen. For Klein-Gordon teorien blev de tilsvarende udtryk

$$\rho' = -\frac{\hbar}{2mc} (\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t}) \quad \text{og} \quad \vec{j}' = \vec{j}.$$

På trods af enkelte kritikere, især Pauli, blev Klein-Gordon teorien ret bredt accepteret som værende den relativistisk-quanteteoretiske teori for elektroner. Medvirkende hertil var utvivlsomt dens smukke covariante form.

Men trods sine æstetiske dyder stod Klein-Gordon ligningen magtesløs over for f.x. finstruktur og anomal Zeeman-effekt, og inden for matrixmekanikken havde man større tiltro til en tilnærmelsesvis relativistisk formulering, sådan som givet af Heisenberg og Jordan. Det stod allerede i 1926 klart, at det nye spinbegreb, indført i kvantemekanikken gennem Heisenberg-Jordan teorien, på en eller anden måde måtte være nært knyttet til spørgsmålet om relativitet, måske ligefrem være en ren relativistisk effekt. Der var enkelte forsøg på at forklare spinnet ud fra Klein-Gordon teorien, men forgæves. Det var først med Pauli's og Darwin's omtrent samtidige teorier, fra foråret 1927, at spinnet blev fuldt indpasset i et kvantemekanisk skema. Specielt var Pauli's indførelse af en to-komponent bølgefunktion til beskrivelse af elektronens spintilstande, samt hans explicitte formulering af spinmatricerne, vigtige bidrag.

Pauli's spin-quantemekanik byggede i det væsentlige på Heisenberg-Jordan teorien. D.v.s. filosofien var at opskrive Hamiltonfunktionen som et antal korrektionsled, svarende til spineffekter og relativitet, cf. B.2. Ud fra de af Heisenberg og Jordan formulerede spinimpulsmomentrelationer fandt Pauli spinmatricerne

til at have formen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

ofte kaldt Pauli matricerne.

I England fulgte Darwin en groft set parallel vej, men byggede på en vektoropfattelse af bølgefunktionen, hvor spinnet blev opfattet som polarisationstilstande, og uden at bruge spinmatricerne. Både Pauli og Darwin gik frem på en halv-empirisk måde, følgende den tidligere Heisenberg-Jordan approach. I forsommeren 1927 var situationen for, hvad man kan kalde Pauli-Darwin-Jordan-Heisenberg fremgangsmåden, da følgende: Teorien var empirisk tilfredsstillende, idet den var i stand til at forklare alle eksisterende spektroskopiske gåder, især den anomale Zeemaneffekt og Sommerfeld's finstrukturformel. Men sidstnævnte kun i en første-ordens tilnærmelse, forårsaget af at teorien ikke var ægte relativistisk; relativiteten var kun 'påklistret' som et korrektionsled. Tilsvarende var også spinnet indført 'udefra' som en korrektion, ikke egentligt forklaret. Den halvt deskriptive karakter af Pauli-Darwin teorien og dens ikke-invariante form var skønhedspletter, som generede både Darwin og Pauli. De søgte at forbedre teorien, så den blev Lorentz-invariant, men uden held. På trods af sine dyder var Darwin-Pauli teorien derfor ikke i stand til at kaste nyt lys over det stadig mere påtrængende problem, at forstå den indre sammenhæng mellem spin, relativitet og kvantemekanik. Denne opgave blev løst af Dirac på en helt anden og yderst original vis.

I 1926-27, efter at ækvivalensen mellem bølgemekanik og matrixmekanik var blevet bevist, blev fortolkningen og generaliseringen af kvantemekanikken det vigtigste problem for kvantefysikerne. I teknisk henseende havde diskussionen herom nået en afklaring i foråret 1927 med den s.k. statistiske transformationsteori. Denne

teori, udviklet samtidigt af Jordan og Dirac, gav en fælles formalisme for de da eksisterende kvanteteoretiske metoder. Den generelle transformationsteori byggede på den af Born foreslåede sandsynlighedsfortolkning, hvorefter Schrödinger's ladningstæthed $\psi\psi^*$ forstås som sandsynligheden for, at elektronens tilstand har en bestemt værdi. I 1927 blev den 'generelle kvantemekanik' fuldt udbygget og accepteret.

Imidlertid var der i denne accept indbygget en problematisering af den ønskede forening af kvantemekanik og relativitetsteori, omend kun ganske fysikere i tiden erkendte dette problematiske forhold. Den eneste kandidat for en fuldt relativistisk kvantemekanik, Klein-Gordon teorien, var nemlig uforenelig med den generelle kvantemekaniks formalisme, erkendte Pauli og Dirac. Pauli viste, i brev til sine kolleger, at Klein-Gordon ligningen ikke harmonerer med de krav, man må stille til en ordentlig kvantemekanisk teori. Han foreslog at erstatte (2) med dens tilhørende første-ordens version, d.v.s.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = c \sqrt{m^2 c^2 + \vec{p}^2} \psi, \quad (4)$$

men nåede ikke videre ad denne vej. At problemet med Klein-Gordon ligningen netop ligger i, at den er af anden orden i den tidsafledede, stod klart for Dirac: Den generelle kvantemekanik kræver, at den kvantemekaniske bevægelsesligning skal være af første orden, uden hvilket transformationsteorien ikke giver mening. Men her ved støder kvantemekanikken tilsyneladende sammen med relativitetsteorien, der jo kræver bevægelsesligninger, som er kvadratiske i energien.

Den situation, Dirac stod over for i efteråret 1927, var altså: På den ene side var der Klein-Gordon ligningen, som var i smukkeste overensstemmelse med relativitetsteorien, men syntes uforenelig med den gene-

relle kvantemekaniks grundlag, og som desuden stod fremmed over for spinnet. På den anden side var der Pauli-Darwin Teorierne, som indeholdt spinnet og var i overensstemmelse med den generelle kvantemekanik, men som kun indeholdt relativitet tilnærmet. Forbindelsen mellem spin og relativitet var erkendt, og nogle forskere søgte at generalisere Pauli-Darwin-teorien ud i en Lorentz-invariant form. Dette var dog ikke Dirac's metode, der direkte tog sit udgangspunkt i dilemmaet mellem generel kvantemekanik og relativitet: To teoribygninger, der begge *måtte* være sande, men som alligevel syntes at være i modstrid med hinanden.

Dirac's vej til en relativistisk kvanteteori for elektronen kan kun mangelfuldt følges gennem selve hans artikel. Ved at medtage upublicerede kilder og senere kommentarer kan teoriens skabelse rekonstrueres efter disse hovedlinier:

Hvis teorien skal harmonere med den generelle kvantemekanik, *må* den være lineær i $\partial/\partial t$; og hvis den også skal være Lorentz-invariant *må* den være lineær i $\partial/\partial x_k$. Et naturligt udgangspunkt er derfor den af Pauli betragtede første-ordens ligning (4). Men den kan ikke selv være den søgte kandidat. Ikke blot er den matematisk ubehagelig, men den er ikke lineær i impulserne. Indføres dette krav om linearitet forsøgsvis, stilles man over for spørgsmålet om at linearisere en kvadratrods af fire kvadratiske led. Dirac blev her vejledt af en egenskab ved Pauli matricerne, han tilfældigvis havde fundet (og som ikke optræder i litteraturen). For spinmatricerne gælder nemlig

$$\sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2} = \sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3,$$

og i forsøgene på at udvide denne relation til fire led kom Dirac på den ide at bruge 4x4 matrixkoeffici-

enter. Med passende sådanne fås nu

$$\sqrt{(mc)^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2} = \beta(mc) + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3$$

Og så den søgte bølgeligning for en fri elektron

$$\left(\frac{E}{c} + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta mc\right)\psi = 0.$$

Med disse simple overvejelser havde Dirac fundet den sande relativistiske bølgeligning for elektronen. Det er bemærkelsesværdigt, at spinovervejelser ikke spillede nogen rolle for Dirac, der faktisk blev overrasket, da han indså, at spinnet i virkeligheden er indeholdt i ligningen. Dirac havde, viste det sig, endelig *udledt* spinnet fra grundlæggende principper; et træk, der selvfølgelig var særdeles tilfredsstillende. Ligningen viste sig også at kunne reproducere den eksakte Sommerfeld'ske finstrukturformel, omend dette ikke blev vist af Dirac selv, men af Darwin og Gordon umiddelbart efter Dirac-teoriens fremkomst.

Det viser sig, at det motiv, der ledte Dirac frem til sin bølgeligning, i det væsentlige var en forventning om, at det generelle kvantemekaniske skema også måtte gælde i det relativistiske område; specielt at den ønskede ligning måtte være lineær i energien. Derimod spillede overvejelser over ladnings- eller sandsynlighedstætheden formentlig ingen rolle for Dirac, sådan som det gør i senere fremstillinger. I Klein-Gordon teorien er ρ ikke explicit positiv, sådan som man må kræve af en sandsynlighedstæthed, og alene af den grund må Klein-Gordon teorien synes kvantemekanisk suspekt. Men faktisk blev dette spørgsmål slet ikke kommenteret i 1926-27, selvom det muligvis har været erkendt.

Dirac's relativistiske kvantemekanik for elektronen blev modtaget med begejstring i 1928 og straks videreudviklet af en lang række fysikere og matematikere.

At teorien måske stillede flere spørgsmål, end den besvarede, stod snart klart. Især ét forhold blev problematiseret med Dirac's teori, nemlig spørgsmålet om de negative energitilstande. Dette spørgsmål udspringer ikke af Dirac teorien, men ligger i selve det relativistiske energiudtryk, hvor energien jo er

$$E = +c\sqrt{m^2c^2 + \vec{p}^2} \quad \text{eller} \quad E = -c\sqrt{m^2c^2 + \vec{p}^2} .$$

Kvantemekanisk overtages det dobbelte fortegn. Og her bliver det alvorligt, da kvantemekanikken, i modsætning til klassisk mekanik, åbner mulighed for kvantespring over energigabet $2E$. Indtil Dirac's teori blev den tilsyneladende eksistens af negative energier i Klein-Gordon teorien imidlertid fortrængt. I 1928 trak Dirac problemet frem i dagens lys, men uden at kunne gøre noget ved det. De negative energier, der formelt optræder i teorien, kunne ikke længere negligeres, og man blev klar over, at hele sundheden i Dirac's iøvrigt meget stærke teori stod og faldt med en forklaring på, hvilken rolle de negative energitilstande spillede. Det blev Dirac selv, der gav det overraskende svar herpå, nemlig i sin berømte teori om antipartikler fra 1930.

I konstruktionen af denne teori lod Dirac sig inspirere af Pauli's udelukkelsesprincip, sådan som det finder anvendelse ved opbygningen af atomernes elektronstrukturer. Dirac overtog ideen om de ikke-besatte elektron-tilstande og foreslog at indføre en negativ-energi 'verden' eller 'hav', der normalt er opfyldt af negativt ladede, negativ-energi 'elektroner'. Enkelte huller i dette hav vil manifestere sig som partikler med positiv ladning og positiv energi, anti-elektroner. I fremsættelsen af denne dristige og noget spekulative teori var Dirac naturligt nok urolig over, at sådanne nye partikler, og deres annihilation med sædvanlige

elektroner, aldrig var blevet observeret. Teoriens symmetriske form syntes at kræve, at anti-elektronerne havde samme masse som elektronerne, men Dirac foreslog først, at hans 'huller' var de sædvanlige protoner. Herved blev Dirac fri for at postulere en ny slags partikler, uden nogen empirisk støtte, og endnu vigtigere, der blev skabt baggrund for en unitær elementarpartikelteori: Bortset fra fotonen, der ikke blev betragtet som en rigtig partikel, kendte man i 1930 kun to elementarpartikler, hvoraf alt stof mentes opbygget. Hvis protonen i virkeligheden var en maskeret elektron, så ville filosofernes gamle drøm om at føre alt stof tilbage til en enkelt elementarpartikel være gået i opfyldelse, tænkte Dirac.

Det blev dog hurtigt vist, at Dirac's oprindelige ide om at identificere 'huller' med protoner ikke var rigtig, og enhedsdrømmen måtte opgives i denne omgang. I stedet postulerede Dirac nu eksistensen af positivt ladede elektroner, positroner som de senere blev kaldt. Dirac's forudsigelser af positronen var særdeles dristig, både fordi sådanne partikler var aldeles ukendte, og fordi hul-teorien langt fra var matematisk tilfredsstillende. Anti-elektron teorien blev da heller ikke vel modtaget af samtidens fysikere, hvoraf mange troede, at Dirac's partikler var udstyret med negativ energi. Så sent som i 1933 afviste Pauli anti-elektron teorien med henvisning til, at annihilationsprocesser aldrig var blevet iagttaget. Men på dette tidspunkt var udviklingen allerede løbet fra Pauli's indvending, idet Anderson året før faktisk havde detekteret den positive elektron. Således var Dirac's dristige forudsigelser blevet bekræftet, og positronen holdt sit indtog i den dengang endnu eksklusive skare af elementarpartikler. I virkeligheden var Anderson's opdagelse nu ikke en opdagelse

af Dirac's partikel eller en bekræftelse på Dirac's hul-teori, som Anderson slet ikke kendte.

Positronen var endnu en triumf for Dirac's teori, men betød langt fra den endelige afklaring på den relativistiske kvantemekanik. Tværtimod blev dennes vanskeligheder et voksende problem i trediverne, især i forbindelse med den utilfredsstillende udvikling af kvanteelektrodynamikken. I midten af trediverne mente mange fysikere, og ikke mindst Dirac, at det grundlæggende problem omkring en forening af kvante- og relativitetsteori stadig var uløst. For Dirac's vedkommende førte dette til nærmest desperate redningsforslag. Bl.a. foreslog han at forkaste princippet om energibevarelse på atomart niveau og at genindføre en version af den æther, som relativitetsteorien havde likvideret i 1905.

B.5. Atomteori og Æstetiske Principper (7)

I skabelsen af fundamental videnskab indgår altid elementer af 'ikke-videnskabelig' art, motiver og forventninger, der ikke er empirisk eller logisk begrundede. Sådanne regulative principper kan man kalde *æstetiske*. De er altså, på en eller anden måde, udtryk for forventninger om, hvorledes naturlovene skal se ud.

En række af bredt anerkendte (meta)videnskabelige principper kan med god grund henregnes til denne gruppe, omend deres status og funktion inden for forskningen er ganske forskellig. Jeg skal nøjes med at henviser til to æstetiske principper, der har spillet en fremtrædende rolle (også) i den moderne teoretiske fysik, og hvis funktion jeg har eksemplificeret i forbindelse med Dirac's teorier.

Plenitude princippet ('fuldhedsprincippet') er en forventning om, at de muligheder, man kan tænke sig til på konsistent vis, også er realiseret i naturen. Altså noget i retningen af, at hvis en ting kan eksistere, så eksisterer den faktisk også. Potentielle eksistensmuligheder må ikke 'gå til spilde', men manifestere sig i naturen. I sådanne vage versioner har plenitude princippet spillet en stor rolle i idéhistorien. I moderne videnskab, som hos Dirac, kan plenitude princippet nærmest formuleres som et udsagn om forholdet mellem fundamentale naturlove, matematisk formalisme og fysisk eksistens: Fænomener, der er mulige, d.v.s. som er konsistente med grundlæggende naturlove, og som kan beskrives matematisk konsistent, vil også svare til en fysisk realitet.

Skønheds princippet (Principle of Beauty) er en forventning om, at naturens fænomener på deres fundamentale niveau skal kunne beskrives på en (matematisk) smuk måde. I sin søgen efter sammenhænge i naturen, og formuleringen af dem, vil og bør forskeren være vejledt af ønsket om at skabe smukke teorier og ligninger. Og, ligger der også i skønhedsprincippet, netop de teorier, der har denne æstetiske kvalitet, vil være de sande og rigtige teorier. I valget mellem to forskellige teorier vil kravet om maksimal skønhed sikre, at den bedste teori, også i empirisk henseende, foretrækkes.

Selvsagt er sådanne principper meget vage og kan fortolkes på mange måder. Specielt for skønhedsprincippet gælder, at det er rent subjektivt, idet der ikke findes fælles standarder for, hvornår en teori er smuk, en anden grim. Ganske vist har fysikere ofte fornemmelser i den retning; f.x. vil de fleste mene, at simpelhed, universalitet og fuldstændighed er kendetegn for smukke teorier. Men dette giver ikke skønhedsprincippet fastere grund under fødderne,

forskyder blot subjektiviteten fra ét plan til et andet. I praksis viser det sig da også, at skønhedsprincippet, der mere eller mindre eksplicit værdsættes højt af fremtrædende fysikere og spiller en afgørende rolle i skabelsen af fundamentale teorier, ikke kan formuleres som et brugbart metodologisk redskab. Dirac har ofte udtrykt troen på skønhed som en metodologisk morale, en almen heuristik for fundamental fysik. Men da matematisk skønhed er og bliver et subjektivt begreb, vil anbefalinger om at 'søge det smukke' ikke kunne bruges systematisk. At æstetiske principper, kreativt aktive som de er på det subjektive plan, ikke kan danne basis for en offentlig forskningsstrategi, synes bekræftet af den moderne fysiks historie.

Lad mig understrege, at når jeg siger, at Dirac i sin videnskab var vejledt af f.x. plenitude princippet, så skal det ikke forstås i en direkte eller bevidst forstand. Jeg har forsøgt at *rekonstruere* Dirac's teorier, baseret på en fortolkning af den kreative proces ved hjælp af æstetiske principper. Det kan nemlig, ud fra kendskabet til Dirac's baggrund og personlighed, betragtes som sikkert, at han ikke var direkte påvirket af filosofiske synspunkter eller i det hele taget interesserede sig for meget andet end at lave ren fysik.

Eksempler på plenitude princippet kan hos Dirac findes i hans elektronteori og i hans omtrent samtidige teori for magnetiske monopoler. Dirac's forslag om eksistensen af antipartikler kan således ses som en manifestation af plenitude princippet: Når teorien, der er i så smuk overensstemmelse med relativitetsteori og kvantemekanik, indeholder matematiske muligheder, svarende til negative energitilstande, så må disse muligheder også være materialiseret i en eller anden form. En eller anden for, for Dirac afviste naturligvis eksistensen af fysiske partikler

med negativ energi; i stedet skabte han et billede, hvor disse muligheder manifesterede sig på en fysisk acceptabel måde, d.v.s. med positiv energi.

Mere tydeligt træder plenitude tankegangen frem i monopolteorien fra 1931. Her viste Dirac simpelthen, at eksistensen af magnetiske monopoler er teoretisk forenelig med kvantemekanikken, modsat hvad man hidtil havde troet. Da teoretiske størrelser som magnetiske monopoler således ikke er forbudt af nogle grundlæggende årsager, så må man forvente, at naturen også har gjort brug af denne mulighed, d.v.s. realiseret partiklerne. Et andet æstetisk motiv til Dirac's forudsigelse af monopolen ligger i, at der herved skabes en baggrund for at forstå den empirisk kendte, men teoretisk uforståede, kvantisering af den elektriske ladning. Og endelig bliver de elektromagnetiske grundligninger bragt på en perfekt symmetrisk form, der ikke kan undgå at virke æstetisk tiltalende. I modsætning til Dirac's forudsigelse af positronen er hans forudsigelse af monopolen forblevet ubekræftet på trods af mange forsøg på at opdage disse partikler, der egentlig burde være nemme at påvise. Plenitudeprincippet, sådan som man finder det i monopolteorien, kan iøvrigt også findes i senere teorier. Især viser teoriene om de såkaldte tachyoner (partikler, der bevæger sig med overlyshastighed) en klar metodologisk lighed med Dirac's monopolteori. 'Forudsigelsen' af tachyoner er helt klart baseret på et plenitude princip.

Logisk set er Dirac's forudsigelse af monopolen et s.k. eksistensudsagn, idet den kan koges ned til påstanden om, at "der eksisterer magnetiske monopoler", d.v.s. mindst én (og eventuelt kun en) monopol i hele universet. Dette betyder, at teorien ikke kan falsificeres eksperimentelt og således er en tvivlsom affære set ud fra popperianske standarder (i realiteten ville teorien dog være tilbagevist, hvis man kunne vise, at dens forudsætninger ikke holder stik,

f.x. vise at monopoler alligevel er i modstrid med kvantemekanikken).

En noget anden form for æstetisk princip eller ekstravidenskabelig forventning viser sig hos Dirac i hans kosmologiske spekulationer, sådan som de først blev fremført i 1937. Hovedtrækket i Dirac's kosmologiske teori er postulatet om, at der er en sammenhæng mellem de dimensionsløse kombinationer af fundamentale naturkonstanter. Med særdeles beskednen empirisk støtte formulerede Dirac, hvad han kalder 'de store tals princip', nemlig at de nævnte dimensionsløse tal alle vil gruppere sig ved ca. 10^{39} eller $(10^{39})^2$, og at denne sammenhæng er udtryk for en dyb forbindelse mellem naturkonstanterne. Denne sammenhæng er af 'historisk' art, idet universets alder indgår heri. Det mest markante resultat af Dirac kosmologien er formentligt, at gravitations'konstanten' nu bliver tidsafhængig, idet den må antages at variere omvendt proportionalt med universets alder, målt i atomare tidsenheder. Der er ingen eksperimentel evidens for dette resultat, som stadig testes.

Dirac's kosmologiske teori har en tydelig metodologisk lighed med den af Eddington forfulgte tankegang, hvori numerologiske argumenter spiller en stor rolle. Hos Dirac viser det pythagoræiske element sig klart, bl.a. i hans forhåbninger om at basere en samlet, syntetisk viden om naturen på en korrespondens med de hele tal. Dette er forblevet en drøm hos Dirac og andre, men dens realisering synes stadig tvivlsom.

Dirac's opfattelse af skønhedsprincippet er nøje knyttet til hans ideer om forholdet mellem matematik og fysik, mellem teori og empiri. Disse ideer blev i fragmentarisk form fremsat i midten af trediverne og er siden blevet hyppigt gentaget, uden at Dirac dog nogensinde har følt sig fristet til at formulere noget, der kan minde om en videnskabsfilosofi omkring

disse forhold. Selv af en fysiker at være har Dirac altid været sjældent ufilosofisk. Den Dirac'ske opfattelse, således som klarest formuleret i 1937, er baseret på den ældgamle idé om, at naturen besidder en 'matematisk kvalitet', og at denne kvalitet sikrer naturlovene en bestemt, smuk form, der er erkendelig for fysikerne af matematisk-æstetisk vej. D.v.s. af alle mulige naturlove vælger naturen netop de, der har den højeste grad af matematisk skønhed. Som forskningsstrategisk morale betyder dette, at den teoretiske fysiker må stræbe efter matematisk skønhed for at gengive naturens iboende æstetik. Og dette betyder også, at man af ren matematisk vej kan afgøre, hvorvidt teorier er fysisk sande, idet der sættes lighedstegn mellem sandhed og skønhed.

Mere specifikt tilråder Dirac en 'først matematik, så fysik' metode som den mest profitable inden for teoretisk fysik: Man bør, siger Dirac, ikke starte studiet af fundamentale naturlove ved at se på naturen, men ved at se på matematikken. Man skal vælge en passende matematisk basis på grundlag af, hvad der giver den smukkeste matematik, og så udvikle denne basis rent matematisk. Hvis matematikken er virkelig smuk, vil den også modsvare træk i naturen, og først på dette stadium kommer empirien ind i billedet. Denne morale var for Dirac især retfærdiggjort af udviklingen i kvantemekanik og relativitetsteori, der er hans modeller for skabelsen af fundamental fysisk viden og hans paradigmatisk eksempler på skønhed i videnskaben. Hvad der i æstetisk henseende knytter relativitetsteori og kvantemekanik sammen, er ikke blot deres generalitet og universalitet, men også det forhold, at de begge udtrykker invarianser i form af transformationsgrupper. 'Interessante' transformationsegenskaber, som f.x. Lorentz-transformationen, er for Dirac et vigtigt tegn på matematisk skønhed og

et tegn, der da antages at sikre også en dyb fysisk sandhed. Allerede i 1930 udtrykte Dirac sin tro på, at den sikreste metode i den teoretiske fysik består i at søge stadig mere generelle transformationsgrupper.

Især på sine ældre dage har Dirac ofte henvist til Einstein's generelle relativitetsteori for at illustrere, hvorledes den teoretiske fysiker bør balancere mellem teori og eksperiment. En balancegang, der hos Dirac er stærkt forskudt mod teorien. Pointen er, at teorier af den smukke, generelle type, som relativitetsteorien er det bedste eksempel på, må være sande alene i kraft af deres matematiske skønhed. Lige så lidt som relativitetsteorien blev skabt for at redegøre for empiriske anomalier i tidligere teorier, lige så lidt kan den kuldkastes af nye anomalier. Hvis en virkelig smuk og fundamental teori bliver imødegået af eksperimentelle resultater, så bør den ikke forlades af den grund. Heller ikke hvis der er tale om vigtige ('crucial') eksperimenter af stor pålidelighed. Teoriens interne kraft, dens intellektuelle skønhed, vil sikre, at den alligevel er sand, og at det er eksperimenterne, der til syvende og sidst er noget galt med.

En sådan morale, at fundamentale teoriers matematiske skønhed har prioritet fremfor eksperimentelle tests, er ikke Dirac's opfindelse, selvom den sjældent er formuleret stærkere end netop af Dirac. Især var Einstein af en lignende overbevisning, hvorfor det er berettiget at betegne moralen som Dirac-Einstein moralen. Denne tese er iøvrigt, i stærkere eller svagere formuleringer, ret hyppigt praktiseret af teoretiske fysikere, omend sjældent åbent accepteret. Den er nogle gange anvendt med succes, andre gange med fiasko.

Dirac-Einstein tesen, såvel som Dirac's andre metodologiske anbefalinger, hviler på det noget tvivlsomme begreb 'matematisk skønhed'. Dette er, som tidligere nævnt, temmelig uklart, idet det ikke i sig selv kan være genstand for rationel argumentation. Kun hvis

der findes et invariant, arketypisk matematisk skønhedsbegreb, eller hvis de teoretiske fysikere er helt enige om, hvad de skal forstå ved skønhed i deres videnskab, kan dette begreb fungere som et effektivt metodologisk redskab. Men ingen af disse forudsætninger er til stede. Videnskabelige teories æstetiske værdi er, som æstetik i det hele taget, afhængig af det til enhver tid herskende intellektuelle og sociale miljø. Og faktisk er der ikke, heller ikke i moderne fysik, nogen som helst enighed om, hvilke kriterier man skal anlægge for at vurdere, hvor vidt enkelte teorier er smukke eller ej. Dirac's videnskabelige karriere giver selv eksempler på det uholdbare i at ophøje ideen om matematisk skønhed til et universelt metodologisk princip. Den historiske analyse af Dirac's fysik viser, at hans metodologiske moraler ikke har nogen særlig støtte i hans egne videnskabelige frembringelser.

-
- 1/78 "TANKER OM EN PRAKSIS" - et matematikprojekt
Anne Jensen, Marianne Kesselhahn, Lena Lindenskov og Nicolai Lomholt.
Vejleder: Anders Madsen.
- 2/78 "OPTIMERING" - Menneskets forøgede beherskelsesmuligheder af natur og samfund.
Projektrapport af Tom J. Andersen, Tommy R. Andersen, Gert Kreinøe og
Peter H. Lassen. Vejleder: Bernhelm Booss
- 3/78 "Opgavesamling", breddekursus i fysik.
Lasse Rasmussen, Aage Bonde Kræmmer, Jens Højgaard Jensen.
- 4/78 "Tre essays" - om matematikundervisning, matematiklæreruddannelsen og
videnskabsrindalismen.
Mogens Niss.
- 5/78 "BIBLIOGRAFISK VEJLEDNING til studiet af DEN MODERNE FYSIKS HISTORIE"
Helge Kragh.
- 6/78 "Nogle artikler og debatindlæg om - læreruddannelse og undervisning i fysik,
og - de naturvidenskabelige fags situation efter studenteroprøret"
Karin Beyer, Jens Højgaard Jensen, Bent C. Jørgensen.
- 7/78 "Matematikens forhold til samfundsøkonomien"
B.V. Gnedenko.
- 8/78 "DYNAMIK OG DIAGRAMMER". Introduktion til energy-bond-graph formalismen.
Peder Voetmann Christiansen.
- 9/78 "OM PRAKSIS' INDFLYDELSE PÅ MATEMATIKKENS UDVIKLING"
Motiver til Kepler's: "Nova Stereometria Doliorum Vinarium"
Projektrapport af Lasse Rasmussen.
Vejleder: Anders Madsen.
-
- 10/79 "TERMODYNAMIK I GYMNASIET"
Projektrapport af Jan Christensen og Jeanne Mortensen
Vejledere: Karin Beyer og Peder Voetmann Christiansen.
- 11/79 "STATISTISKE MATERIALER"
red. Jørgen Larsen.
- 12/79 "Lineære differentiaalligninger og differentiaalligningssystemer"
Mogens Brun Heefelt.
- 13/79 "CAVENDISH'S FORSØG I GYMNASIET". Projektrapport af Gert Kreinøe.
Vejleder: Albert Chr. Paulsen.
- 14/79 "Books about Mathematics: History, Philosophy, Education, Models, System
Theory, and Works of Reference etc.: A Bibliography".
Else Høyrup.
- 15/79 "STRUKTUREL STABILITET OG KATASTROFER i systemer i og udenfor
termodynamisk ligevægt". Specialeopgave af Leif S. Striegler.
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen.

- 16/79 "STATISTIK I KRÆFTFORSKNINGEN". Projektrapport af Michael Olsen og Jørn Jensen.
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 17/79 "AT SPØRGE OG AT SVARE i fysikundervisningen"
Albert Christian Paulsen.
- 18/79 "MATHEMATICS AND THE REAL WORLD", Proceedings of an International Workshop, Roskilde
university centre (Denmark), 1978. Preprint.
Bernhelm Booss & Mogens Niss (eds.).
- 19/79 "GEOMETRI, SKOLE OG VIRKELIGHED".
Projektrapport af Tom J. Andersen, Tommy R. Andersen og Per H.H. Larsen.
Vejleder: Mogens Niss.
- 20/79 "STATISTISKE MODELLER TIL BESTEMMELSE AF SIKRE DOSER FOR CARCINOGENE STOFFER".
Projektrapport af Michael Olsen og Jørn Jensen.
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 21/79 "KONTROL I GYMNASIET - FORMÅL OG KONSEKVENSER".
Projektrapport af Crilles Bacher, Per S. Jensen, Preben Jensen og Torben Nysteen.
- 22/79 "SEMIOTIK OG SYSTEMEGENSKABER (1)". 1-port lineært response og støj i fysikken.
Peder Voetmann Christiansen.
- 23/79 "ON THE HISTORY OF EARLY WAVE MECHANICS - with special emphasis on the role of
relativity".
Helge Kragh.
- 24a/80 "MATEMATIKOPFATTELSER HOS 2.G'ERE" 1. En analyse.
24b/80 "MATEMATIKOPFATTELSE HOS 2.G'ERE" 2. Interviewmateriale.
Projektrapport af Jan Christensen og Knud Lindhardt Rasmussen.
Vejleder: Mogens Niss.
- 25/80 "EKSAMENSOPGAVER" Dybdemodulet/fysik 1974-79.
- 26/80 "OM MATEMATISKE MODELLER". En projektrapport og to artikler.
Jens Højgaard Jensen m.fj.
- 27/80 "METHODOLOGY AND PHILOSOPHY OF SCIENCE IN PAUL DIRAC'S PHYSICS"
Helge Kragh.
- 28/80 "DIELEKTRISK RELAXATION - et forslag til en ny model bygget på væskernes visco-
elastiske egenskaber".
Projektrapport, speciale i fysik, af Gert Kreinøe.
Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 29/80 "ODIN - undervisningsmateriale til et kursus i differentiailligningsmodeller".
Projektrapport af Tommy R. Andersen, Per H.H.Larsen og Peter H. Lassen.
Vejleder: Mogens Brun Heefelt.
- 30/80 "FUSIONSENERGIEN" - - - ATOMSAMFUNDETS ENDESTATION".
Oluf Danielsen.
- 31/80 "VIDENSKABSTEORETISKE PROBLEMER VED UNDERVISNINGSSYSTEMER BASERET PÅ MÆNGDELÆRE"
Projektrapport af Troels Lange og Jørgen Karrebæk.
Vejleder: Stig Andur Pedersen.
- 32/80 "POLYMERE STOFFERS VISCOELASTISKE EGENSKABER - BELYST VED HJÆLP AF MEKANISKE IMPEDANS-
MÅLINGER OG MØSSBAUEREFFEKTMÅLINGER".
Projektrapport, speciale i fysik, af Crilles Bacher og Preben Jensen.
Vejledere: Niels Boye Olsen og Peder Voetmann Christiansen.

- 33/80 "KONSTITUERING AF FAG INDEN FOR TEKNISK-NATURVIDENSKABELIGE UDDANNELSER: I-II."
Arne Jakobsen.
- 34/80 "ENVIRONMENTAL IMPACT OF WIND ENERGY UTILIZATION". ENERGY SERIES NO.1.
Bent Sørensen:
- 35/80 "HISTORISKE STUDIER I DEN NYERE ATOMFYSIKS UDVIKLING".
Helge Kragh.



ISSN 0106-6242