

**Kvanteteori
for gymnasiet**

2. MATERIALE

PROJEKTRAPPORT AF:

Birger Lundgren

Henning Sten Hansen

John Johansson

Vejleder:

Torsten Meyer

TEKSTER fra

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

KVANTETEORI FOR FYMNASIET
2. Materiale

IMFUFA tekst nr. 92/85

234 sider

ISSN 0106-6242

Abstract:

Projektet er et undervisningsmateriale for gymnasiet, der introdukerer elementær kvanteteori.

Det er tænkt anvendt i fysikundervisningens valgfrie emner, og kan benyttes i sin helhed eller i uddrag.

Projektet indeholder 2 dele:

1. Lærervejledning.
2. Elevmateriale.

Lærervejledningen indeholder en begrundelse og beskrivelse af materialet, samt beskrivelse af de EDB-programmer, der medfølger materialet.

Elevmaterialet udgøres af kvanteteorien, der er fremstillet i et historisk perspektiv, herunder de fundamentale erkendelsesteoretiske problemer - primært fremstillet i 2 artikler af Niels Bohr.

Som appendix til dette materiale er vedlagt øvelsesvejledninger for henholdsvis EDB-øvelser og undervisningsforsøg.

Indholdsfortegnelse.

1. De historiske forudsætninger for Bohr atomet.	side 1
1.1 Lyseksperimenter.	2
1.1.1 Polarisationsplaner.	2
1.1.2 Elektromagnetiske bølger.	3
1.2 Spektrallinier - bølgelængder	4
1.2.1 Balmers formel	4
1.2.2 Balmer/Rydbergs formel	6
1.2.3 Hydrogen - spektralserier	8
1.3 Zeeman effekt	8
1.4 Sort legeme stråling	10
1.4.1 Jeans terning	10
1.4.2 Energifordeling	11
1.4.3 Den ultraviolette katastrofe	12
1.5 Planck's energipakker	13
1.6 Den fotoelektriske effekt	14
1.6.1 Fotoner - løsrivelsesarbejde	15
1.6.2 Planck's konstant påvist	16
1.6.3 Lysets dualitet	16
1.7 Rutherford's planetmodel	17
1.7.1 Elektron - spiralisering ind i kernen	18
2. Bohr-Sommerfeld kvanteteori.	20
2.1 Bohrs atomteori	20
2.1.1 Bohrs postulater	20
2.1.2 Atommodellen	22
2.1.3 Brintspektret	26
2.1.4 Franck-Hertz' forsøg	27
2.1.5 Korrespondensprincippet	29
2.2 Sommerfelds kvanteteori	30
2.2.1 Sommerfelds elliptiske atommodel	30
2.2.3 Impulsmoment og magnetisk kvantetal	31
2.2.4 Zeeman-effekten	33
2.3 Kvanteteoriens krise	35
2.3.1 Spektrenes finstruktur	35
2.3.2 Stern-Gerlach eksperimentet	36

2.4 Pauliprincippet.	side 37
2.5 Spin.	37
2.6 Det periodiske system	40
3. Mod en konsistent kvanteteori	44
3.1 Stoffets partikel-bølge dualitet	47
3.1.1 Dobbeltspalte-eksperimentet	50
3.2 Schrødingers bølgemekanik	55
3.3 Bølger og bølgepakker	56
3.3.1 Bølger og fasehastighed	56
3.3.2 Bølger og gruppehastighed	58
3.3.3 Komplex, eksponentiel bølgefunktion	62
3.4 Stofbølger og Schrødingertiligningen	66
3.4.1 Lysbølgers dispersionslov	67
3.4.2 Stofbølgers dispersionslov	68
3.4.3 Bølgeligningen for en fri partikel	69
3.4.4 Operatorer for energi og impuls	70
3.4.5 Schrødingertiligningen	71
3.4.6 Schrødingertiligningen for stationære tilstande	72
4. Kvantemekanikkens afrunding	77
4.1 Borns sandsynlighedsfortolkning	77
4.2 Ubestemthedsrelationerne	79
4.2.1 Heisenberg's gammastrålemikroskop	81
4.2.2 Dobbeltspalteeksperimentet	83
4.2.3 Brintatomet	84
4.3 Middelværdi og spredning	85
4.3.1 En fri partikels impulsspredning	86
4.4 Ehrenfest's sætning	88
4.5 30 års revolution	90
4.6 Eksperimentel bekræftelse på stoffets bølgenatur	92
4.6.1 Davisson & Germer's diffraktions-eksperimenter	92
4.6.2 Thomson's katodestråle-eksperiment	94

5. Anvendt kvantemekanik	side 97
5.1 Partikel i en potentialbrønd	99
5.1.1 Potentialspring	100
5.1.2 Potentialbrønd med uendelig høje vægge	103
5.1.3 Dobbeltbrønden	106
5.1.4 Kronig-Penney modellen	108
5.2 Brintatomet	112
5.3 Schrödingerligningen for et coulombpotentiale	114
5.3.1 Separation af bølgefunktionen	117
5.3.2 Vinkelligningen	118
5.3.3 Impulsmoment og dets kvantisering	122
5.3.4 Radialligningen	125
5.3.5 Elektronfordelingen i brintatomet	132
6. Erkendelsesteoretiske problemer i kvantemekanikken	139
6.1 Komplementaritetsprincippet	141
6.1.1 Bohr: Kvantepostulatet og atomteoriens seneste udvikling	141
6.2 Bohr-Einstein dialogen	171
6.2.1 Bohr: Diskussion med Einstein om erkendelsesteoretiske problemer i atomfysikken	173
APPENDIX: Øvelsesvejledninger.	
1.1 Superposition af bølger	(indsættes senere)
1.2 Potentialbrønden	
2.1 Franck-Hertz' forsøg	
2.2 Elektronernes bølgelængde	
2.3 Planck's konstant, bestemt ved sort-legeme stråling	

Handwritten notes and scribbles, possibly including the characters 'A', 'B', and 'C'.

Small handwritten mark or signature on the right edge of the page.

1. DE HISTORISKE FORUDSÆTNINGER FOR BOHR-ATOMET.

Omkring år 1900. mente de førende fysikere i Vesten, at nu var næsten alle fysiske fænomener forstået og fastlagt. Men hvad var baggrunden for denne antagelse ?

I det 19. århundrede kom der 3 store udvidelser af fysikken, som idag danner kernen i den klassiske fysik. Det blev en modificering og stadfæstelse af den tidligere korpuskulære (partikel) model - dvs. den kinetiske model af naturen. De 3 udvidelser er : termodynamikken, elektrodynamikken og den statistiske fysik. Årsagen til den stærke udvikling må tillægges et snævert samarbejde mellem den tekniske udvikling og naturvidenskaben. Eksempelvis kan peges på Ørsted/Faradays arbejder, der muliggør fremstilling af dynamoen, der gør det muligt at fremstille elektricitet med stor effekt.

Den stærke teknologiske udvikling gør det muligt for naturvidenskabelige forskere at foretage eksperimenter, (som gav en større forståelse af naturens opbygning), der ikke tidligere var mulig. Disse eksperimenter fører i slutningen af 1800-tallet til en erkendelse af, at den klassiske fysik ikke er tilstrækkelig til at beskrive "hele naturens opbygning". Et af naturens fænomener, som er med til at ødelægge den smukke "teoribygning", som den klassiske fysik hviler på, er noget så enkelt og dagligdags som "lyset".

1.1 Lyseksperimenter.

Ja men hvad er lys da ?
 Newton (ca 1700) foretog
 en række lyseksperimenter
 med hvidt lys gennem et
 prisme og opdagede herved at
 hvidt lys var sammensat af
 en række farver, det vi idag
 kalder lysets farvespektrum.

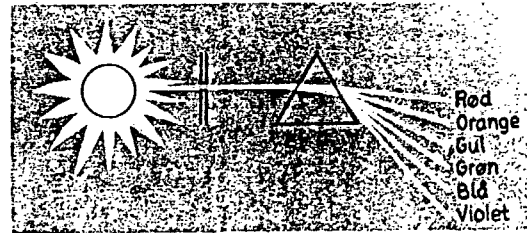


Fig. 1.1 En solstråle splittes i alle regnbuens farver.

Newton fremsatte på grundlag af sine eksperimenter og andre optiske fænomener sin teori : lys er en partikelbevægelse.

En anden samtidig fysiker Huygens mente at lys var bølger udsendt fra forskellige lysgivere, ligesom lyd bliver udsendt fra forskellige lydgivere.

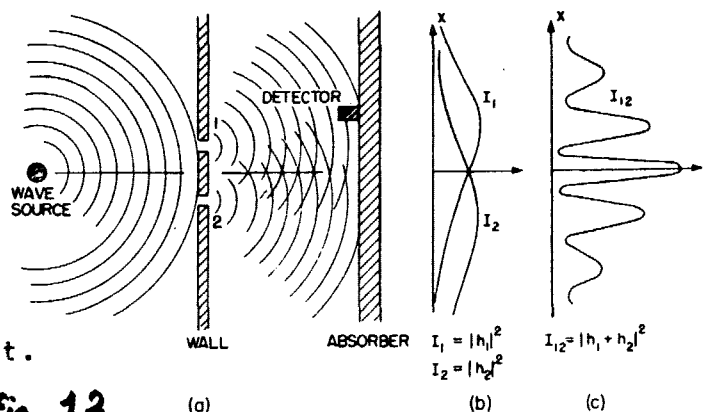
Det var først ca 1800 at Young/Fresnel foretog en række dobbeltspalte forsøg der klart viser, at lys har bølgeegenskaber.

(sådan som Huygens havde forudsagt)

Dermed var Newtons teori afvist.

1.1.1 Polarisationsplaner

Fig. 1.2



I 1845 påviser Faraday, at upolariseret lys ved hjælp af polarisationsfiltre kan filtreres og danne polarisationsplaner :

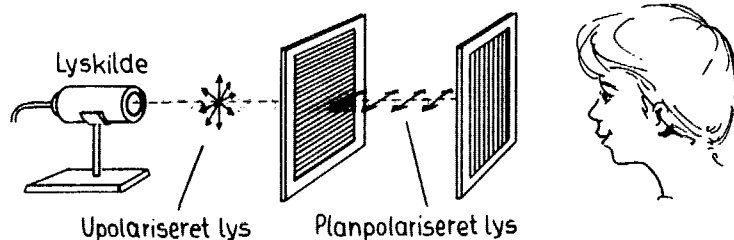


Fig. 1.3 Lysstråle gennem to polarisationsfiltre der har polarisationsplanet vinkelret på hinanden.

Han viser også, at lysets polarisationsplaner kan drejes af magnetfelter, og herfra er der jo ikke langt til at antage, at lys er en slags elektromagnetiske bølger.

1.1.2 Elektromagnetiske bølger.

Det var på basis af disse arbejder

mm, at Maxwell i 1862 kunne fremsætte sin teori om elektromagnetiske bølger, og herunder konkluderede han, at lys indeholder nogle tværgående bølgebevægelser af samme type som de elektriske og magnetiske fænomener.

Teorien var en ren forudberegning baggrund, dvs. ingen havde indtil da påvist eksistensen af elektromagnetiske bølger.

The first great unification

AT THE beginning of the 19th century, scientists considered magnetism and electricity to be independent. But in 1819 Hans Christian Oersted showed that a steady electric current generated a magnetic field, and in 1831 Michael Faraday showed that a time-varying magnetic field would generate an electric current in a conductor. Together these results produce the combined subject of electromagnetism.

In 1862, James Clerk Maxwell wrote his famous paper in the *Philosophical Magazine* in which he assumed that a time-varying electric field (the displacement current) would also generate a magnetic field. This led to his prediction that electromagnetic waves existed and would propagate at a velocity c equal to the ratio of electromagnetic to electrostatic units of measurement. Numerically c turned out to be remarkably close to "the velocity of light in air, as determined by M. Fizeau" which was "70 843 leagues per second". Maxwell concluded that "we can scarcely avoid the inference that light consists of the transverse undulations of the same medium which is the cause of electric and magnetic phenomena." Thus the theory of light was unified with the theory of electromagnetism, although it took another 30 years before Heinrich Hertz was able to demonstrate positively that electromagnetic waves did exist. □



Maxwell—the first unifier

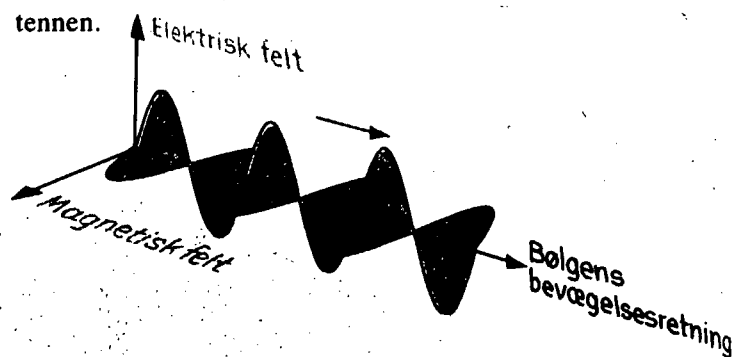


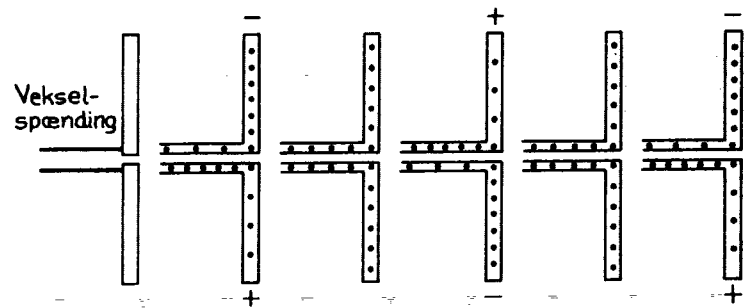
Fig. 1.4 En elektromagnetisk bølge.

Disse elektromagnetiske bølgers eksistens blev først påvist 25 år senere (1888) af H.Hertz.

Ved hjælp af en elektrisk svingningskreds lykkedes det ham, at accelerere elektroner i en antenne op (se fig), og herved blev der frigivet noget energi i form af elektromagnetiske bølger, som han opfangede på en anden antenne.

Dette var helt i overensstemmelse med Maxwell's teori. Denne egenskab ved accelererede elektroner er vigtig.

Fig. 15 Når en vekselspænding fremkalder elektromagnetiske svingninger i en antenne, så fungerer antennen som en bølgekilde, der sender elektromagnetiske bølger ud i rummet.



Disse elektromagnetiske bølger er det vi idag kalder radiobølger, og hermed er grunden lagt for radio, trådløs telegrafi og TV.

På basis af Maxwell's teori om at lys var elektromagnetiske bølger samt de nye tekniske muligheder, var der mange fysikere der i 1870-erne kastede sig over opgaven at løse de sidste "problemer omkring atomet".

1.2 Spektrallinier - bølgelængder.

En af de veje der blev brugt, var i et glasrør der var pumpet tom for atmosfære, at udsætte et kendt stof for en stærk elektrisk spænding, hvorefter det var muligt at iagttage det lys, som stoffet udsendte.

Når stoffet i glasrøret blev udsat for et stærkt elektrisk felt skulle det ifølge Maxwell accelerere stoffets egne elektriske ladninger og herved udsende elektromagnetiske bølger i form af lys. Det gjorde det også, men det lys man iagttog kom i form af adskilte farvestriber (spektrallinier) med en klar symmetri, og disse fænomener kunne ikke rigtigt forklares.

1.2.1 Balmer's formel.

Gennem mange observationer og målinger blev en række grundstoffers spektrallinier fastlagt og bølgelængderne målt. Især blev stoffet Hydrogen meget nøje undersøgt.

Ved at sammenligne disse målinger fra de 4 ultraviolette linier (ex Ångström) lykkedes det svejtseren Balmer at "lave en formel", der kunne beregne disse linier's bølgelængde ud fra en fundamental faktor ("h") for Hydrogen og mente, at det måske var muligt også at finde andre fundamentale faktorer for andre stoffer med hensyn til deres atomvægt.

Balmer's : "h" = $3645,6 \text{ mm}/10^7$

$$H = \frac{m^2}{m^2 - 2^2} \cdot ("h") \quad 1.1$$

TABLE OF WAVELENGTHS OF THE HYDROGEN LINES, IN 10^{-7} m.

Fraunhofer notation	$H_\alpha = 9h/5$	$H_\beta = 4h/3$	$H_\gamma = 25h/21$	$H_\delta = 9h/8$	$H_\epsilon = 49h/45$	Ultraviolet				Mean values of fundamental number h
	C	F	before G	h	just before H_I	$H_\zeta = 16h/15$	$H_\eta = 81h/77$	$H_\theta = 25h/24$	$H_i = 121h/117$	
<i>Observer</i>										
van der Willigen†	6565.6	4863.94	4342.80	4103.8	($H_I = 3971.3$)	—	—	—	—	3674.821
Ångström	6562.10	4860.74	4340.10	4101.2	($H_I = 3968.1$)	—	—	—	—	3645.589
Mendenhall	6561.62	4860.16	—	—	—	—	—	—	—	3645.232
Mascart	6560.7	4859.8	—	—	($H_I = 3967.2$)	—	—	—	—	3644.842
Ditscheiner	6559.5	4859.74	4338.60	4100.0	($H_I = 3966.8$)	—	—	—	—	3644.460
Huggins	—	for the ultraviolet H lines of white stars				3887.5	3834	3795	3767.5	3643.846
Vogel	—	—	—	—	3969	3887	3834	3795	3769	3644.379
<i>Formula</i>										
$H = \frac{m^2}{m^2 - 2^2} h$	$m = 3$	$m = 4$	$m = 5$	$m = 6$	$m = 7$	$m = 8$	$m = 9$	$m = 10$	$m = 11$	
$h = 3645.6$	6562.08	4860.8	4340	4101.3	3969.65	3888.64	3834.98	3797.5	3770.2	
$h = 3645$	6561	4860	4339.283	4100.625	3969	3888	3834.35	3796.875	3769.615	

† If these values, which are on average higher by 1/1500, are given only one-third the weight of the remaining observations, the mean value for h is exactly 3645.

Fig. 1.6

Balmer blev gjort opmærksom på, at observationer af stjerner har givet Huggins yderligere linier for H (op til 14 linier), men en del af de sidste er ikke helt i overensstemmelse med formlen, og indikerer at formlen måske kun er en tilnærmelse.

1.2.2 Balmer/Rydberg's formel.

Svenskeren Rydberg arbejdede med det samme problem, men valgte, at opdele spektrallinierne i serier/perioder for forskellige stoffer :

RYDBERG: EMISSION SPECTRA

Sharp series			Diffuse series		
Li	Na		Li	Na	
	Series 1	Series 2		Series 1	Series 2
3290.2	3165.6	3159.0	5338.3	5386.7	5386.8
1694.5	1647.0	1655.6	2476.7	2484.9	2477.0
			1349.5	1357.9	1363.9

VALUES OF Δn

Series	Ordinal number of difference							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Li[P ₁₂]	16026.8	5542.4	2556.6	1364.4	824.6	533.8	369.5	258.9
Na[D ₁]	—	5386.7	2484.9	1357.9	813.9	523.5	—	—
Ca[D ₁]	—	4996.7	2323.9	1246.3	723.4	—	—	—
Na[P ₁]	13314.9	4751.4	2280.2	1233.5	—	—	—	—
Tl[S ₂]	12278.3	4395.1	2089.6	1213.0	732.4	465.6	350.1	250.2
K[P ₁]	11685.9	4303.8	2050.3	1158.0	723.0	451.8	322.5	245.5
Mg[S ₁]	10679.5	4017.2	1957.5	1116.5	685.6	—	—	—
Ca[S ₁]	8943.7	3507.8	1759.3	1015.0	620.6	—	—	—
Na[S ₁]	7484.8	3165.6	1647.0	962.6	600.1	407.6	—	—
K[D ₁]	—	2842.7	1507.5	881.2	550.5	385.8	256.9	—
Mg[D ₁]	6241.8	2775.3	1476.7	868.4	561.4	—	—	—
Zn[D ₁]	5812.3	2636.4	1416.8	862.7	—	—	—	—

Fig 17

ud fra disse serier opdagede han, at der var en klar tendens, når man tager differensen mellem de enkelte linier, og følger denne differens gennem en periode, vil alle andre serier have samme størrelse.

Denne forskel kan udtrykkes som en funktion :

$$\Delta n = F(m + \mu) \quad m = \text{helt tal} \quad 1.2$$

$\mu = \text{konstant}$
(for masse).

efter nogle gennemregninger over denne funktion, når han

$$n = n_0 - N_0 / (m + \mu)^2 \quad N_0 = \text{konstant} \quad 1.3$$

$n = \text{helt tal}$
 $n_0 = \text{---}$

denne formel er generelt gældende.

Det opdager Balmer og omskriver ligningen til det udtryk vi idag kender :

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad m \text{ og } n = \text{hele tal}$$

$m < n$
 $R = \text{Rydberg's}$
 $\text{konstant.} \quad 1.4$

ud fra Balmer/Rydberg's formel kan enhver bølgelængde fastlægges, og vi ser da også for Hydrogens vedkommende, er der flere linier, som senere eksperimentelt verificeres :

1.2.3 Hydrogen - spektral-serier.

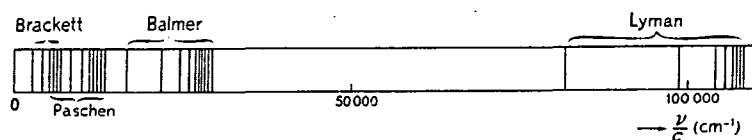


Fig. 1.2.3 The spectrum of hydrogen. There should exist near $\nu/c = 0$ many more complex series, but those left of the Brackett series ($m = 4$) are omitted to avoid confusion.

- $m = 1$ (Lyman serien)
- $m = 2$ (Balmer serien)
- $m = 3$ (Paschen serien)
- $m = 4$ (Brackett serien)
- $m = 5$ (Pfund serien)

Disse linier ligger alle med klare spring (diff) imellem.

1.2.4 Rydberg - basis for udvikling af kvantemekanikken.

Rydberg gør endvidere opmærksom på, at frekvensen for et spektrum er givet som differensen mellem 2 perioder, som hver er et helt tal. Det viser sig at Rydberg's opdagelser bliver meget vigtige for udviklingen af kvantemekanikken.

Rydberg's formler er baseret på eksperimenter, og kan ikke forstås ud fra klassisk teori, hvor man vil forvente, at atomets elektroner bevæger sig i en slags periodisk bevægelse og producerer bølger lys af samme type. I 1890'erne arbejdes der videre med problemerne omkring atomets opbygning og dette at finde en teori, der er overensstemmelse med den klassiske fysik herunder elektromagnetismen.

1.3 Zeeman effekt.

En række forsøg med polariseret lys i magnetfelter viser ejendommelige reflekteringer. I 1897 får en tysk forsker

Zeeman opbygget en meget kraftig elektromagnet, og når en lyskilde placeres imellem polerne så opsplittes den i en eller flere linier. Denne effekt kaldes idag Zeeman effekten, og er den dag idag en af de undersøgelser, der arbejdes med for at få flere oplysninger om stoffernes opbygning.

Denne Zeeman effekt kan heller ikke forklares ud fra den klassiske teori. (først i 1915 lykkes det Lorentz at fremsætte en teori, der kan forklare denne effekt).

1.4 Sort legeme stråling.

En anden vej at gå for at løse problemet omkring atomernes opbygning var at undersøge den stråling, der udsendes fra opvarmede legemer, som består af en blanding af alle mulige bølgelængder. Hvis temperaturen øges, sker der også hurtigt en forøgelse af den totale mængde udsendt strålingsenergi (proportional med T^4 ifølge Boltzmann) og en forkortelse af den dominerende bølgelængde (proportional med T^{-1}). En sammenligning mellem energifordelingen ved forskellige bølgelængder og forskellige temperaturer (vist på fig), med kurver der viser energifordelingen/hastigheden mellem gas-molekyler (se fig), ser man en tydelig analogi mellem disse, idet begge typer kurver viser et tydeligt maximum, der forskydes ved en temperaturændring.

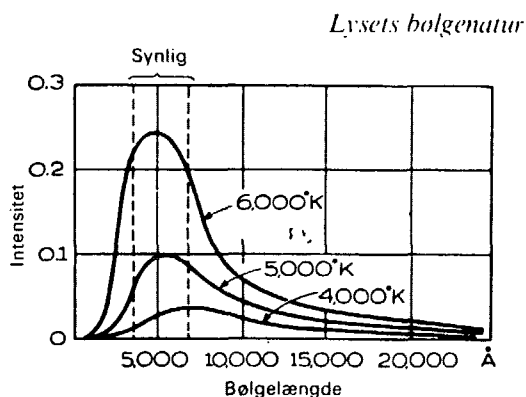


Fig 1.9

1.4.1 Jean's terning.

Dette energifordelingsproblem mellem bølgelængder/strålingsenergi søgte den engelske fysiker James Jean at løse ved hjælp af statistiske beregningsmodeller (ca 1890). Han anvendte en ren abstrakt figur den såkaldte "Jeans terning".

Denne terning er hul og består af vægge lavet af ideelle spejle, som kan tilbagekaste enhver stråling (hvilket

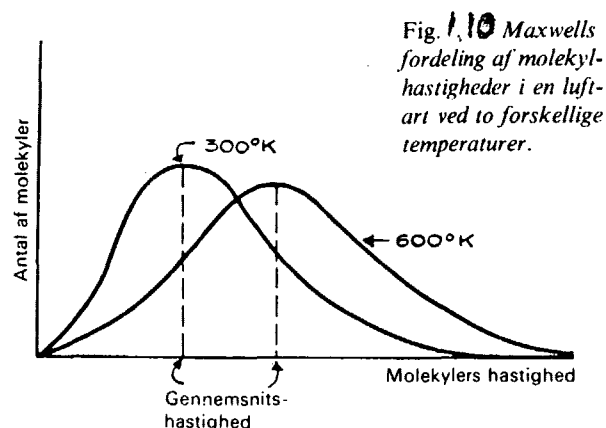


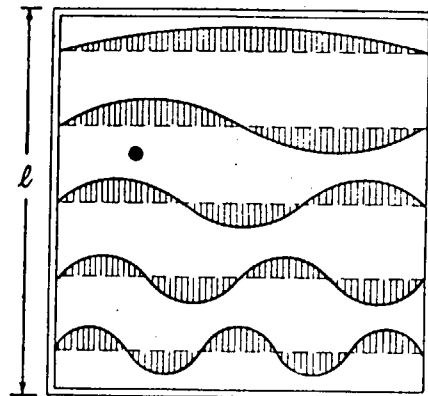
Fig. 1.10 Maxwells fordeling af molekyl-hastigheder i en luft-art ved to forskellige temperaturer.

naturligvis er urealistisk). Gennem et lillebitte hul kan vi indføre en stråling.

Strålingen har en hastighed : $v = v\lambda$

Da rummet er et kubisk rum, vil de ideelle spejlvægge reflektere strålingen således, at der opstår stående bølger med knudepunkter i de reflekterende vægge. Den længste bølgelængde der kan være inde i terningen må være (2×0.5) og derefter (2×1) osv. (se fig), og heraf følger at frekvensen ændres proportionalt med λ s ændring, hvis hastigheden og dermed energien er bevaret (hvilket nu er en klar fysisk grundregel).

Fig. 1.11 Et tværsnit af »Jeans terning«, som viser de forskellige bølger, der kan eksistere i den. Her vises kun de bølger, der breder sig i vandret retning. Den sorte plet er en lille kulstøvpartikel.



1.4.2 Energifordeling.

I terningen antages at være nogle få "kulstøvparkler" for at opnå en energiudveksling mellem strålingen og partiklerne. Via thermodynamikken er man nået frem til, at den disponible energimængde fordeler sig ligeligt på en vilkårlig indespærret gasart's molekyler således, at gennemsnitsenergien på hver enkelt gasmolekyle er lig med den totale disponible energimængde divideret med antallet af molekyler.

Hvis vi bruger samme statistiske beregningsmodel på Jean's terning vil vi få, at den samlede strålingsenergi

i terningen skal fordelt ligeligt mellem de forskellige bølgelængders frekvenser.

1.4.3 Den ultraviolette katastrofe.

Dette lyder umiddelbart rimeligt, men her opstår et problem: Hvis vi ser på antallet af gasmolekyler i én "terning", så er der tale om et enormt stort tal (Avogadro), men dog endeligt, hvorimod antallet af frekvenser i Jean's terning går mod uendeligt. Hvis energien's ligefordeling også holder for strålingen vil hver enkelt frekvens få en uendelig lille mængde E af den totale energimængde. Da bølgelængderne kun kan fortsætte i det uendelige mod kortere og kortere bølgelængder vil det betyde, at al den disponible energi vil blive koncentreret i området med uendeligt korte bølger. Heraf følger at hvis vi fylder "terningen" med rødt lys (længste bølger), vil de hurtigt gå mod lilla, ultraviolet, røntgenstråler, gammastråler osv uden nogen grænse nedad. Dette blev derfor også kaldt for den ultraviolette katastrofe.

Hvis denne energifordeling for stråler gælder som Jean's abstrakte "terning" viser, betyder det at også dagligdags stråling må indeholde samme effekt, og det vil sige at rødgloedende kulstumper i brændeovnen efterhånden vil udsende røntgen - gammastråler, så "mester" foran ovnen vil blive forvandlet til et skelet, og det er da heldigvis ikke tilfældet.

Her er altså endnu et eksempel på, at den klassiske fysik ikke er dækkende og formår at forklare, hvad der sker med energifordelingen fra "stråling".

Der er nu i slutningen af 1890'erne samlet så mange oplysninger omkring atomernes opbygning, der alle viser at den klassiske fysik ikke dækker atomernes område.

1.5 Planck's energipakker.

I 1899 fremsatte den tyske fysiker Planck, der arbejdede med thermodynamiske problemer, den revolutionerende ide, at energien fra varmeudstrålingen fra sorte legemer ikke fulgte ligefordelingen af energien, men blev udsendt i små energipakker eller lyskvanter. For at løse problemet omkring Jean's ultraviolette katastrofe tog han, som matematiker fat på problemet og løste det enkelt og smukt ved at sige, at hvert lyskvant må være ligefrem proportional med frekvensen gange en fast konstant :

altså
$$E = h \cdot \nu$$
 (hvor h er Planck's konstant)

1.5

Planck antog altså, at lyskvanterne fra forskellige strålingstyper indeholdt forskellige energimængder.

Hvordan adskiller dette sig fra energiens ligefordeling? For elektromagnetiske bølger (som stråling er vist at være) er hastigheden : $\nu = c$ (dvs fast 3×10^8 m/s)

heraf fås
$$c = \nu \cdot \lambda$$

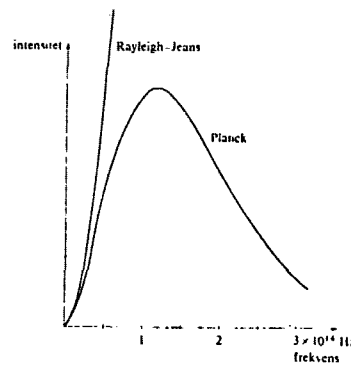
$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

1.6

heraf ses, at hvis λ er stor, så bliver ν lille, og omvendt hvis ν er lille bliver λ stor. Indsætter vi nu

ν i Planck's ligning ser vi, at der ikke bliver samme energipakke til lange bølger, som til korte bølger og hermed er energifordelingen ikke lige, og vi undgår Jean's ultraviolette katastrofe.

Optegnet som funktioner ser vi de 2 situationer sammen og bemærker, at Planck's kurve går mod $E = 0$, både for korte og lange bølger.



Denne teori blev i første omgang forbigået i tavshed, da den jo kun var et tankespin uden fast forbindelse til eksperimenter.

1.6 Den fotoelektriske effekt.

Der skulle gå yderligere 5 år inden der skete noget på arenaen, som på overbevisende måde fik fastslået disse energipakkers eksistens.

Manden der løste dette problem var : ALBERT EINSTEIN. Han fremsatte sin teori/eksperiment for den fotoelektriske effekt, og hermed begynder kvanteteorien for alvor at få fast grund under fødderne.

Einstein fik den ide (i forbindelse med relativitetsteorien), at undersøge hvilken energimængde der skal tilføres elektroner for at de løsriveres fra et stof. Nogle fysikere havde (ca. 1900) opdaget, at metaller kunne emitere elektroner fra overfladen, når de blev bestrålet med lys. Disse forsøg blev "genoptaget" af Einstein for at få fastlagt dette fænomen. Herunder blev det konstateret, at det kun var violet lys --- og nedefter (i bølgelængde) uafhængig af intensitet, der kunne løsrive elektroner. Dette kan ikke forklares ud fra den almindelige teori, hvor lys opfattes som bølger (Huygens), for så skal lysenergien jo komme som en jævn strøm af bølger, og ikke være afhængig af frekvens/bølgelængde.

Det forhold, at elektroners emitering fra metaloverflad er kun afhænger af lysets frekvens, kaldes idag den fotoelektriske effekt.

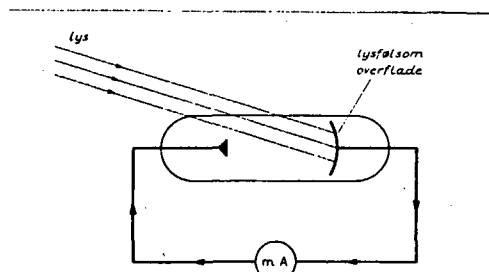


fig 1.13

Selv det kraftigste røde lys kan ikke frembringe strøm i kredsen, men svagt blåt lys kan.

1.6.1 Fotoner - løsrivelsesarbejde.

Ud fra dette og sammenholdt med Planck's energipakker, fremsatte Einstein den teori at lys kunne opfattes som små bølgepakker = partikler, der var afhængig af frekvensen. Disse partikler kaldte han fotoner. Disse fotoner vil alle have samme energimængde hvis de har samme frekvens, og heraf får vi, at lys med stor frekvens (violet lys) har større energi end lys med en lille frekvens (rødt lys). For at kunne beregne den energi som en foton kan overføre til en elektron, brugte han Planck's energipakke ($h\nu$). Herved nåede han frem til, at en foton højst kan overføre hele sin energi $h\nu$ til en elektron, men for at få frigivet elektronen fra metallets overflade kræves der energi, og dette arbejde kalder vi løsrivelsesarbejdet (W_a), må for at vi kan fastholde energibevarelsen sammenholdes med den kinetiske energi, som elektronen får, når den løsrivne elektron fjerner sig fra overfladen (W_{kin}):

heraf fås

$$\nu \cdot h = W_{kin} + W_a$$

($h =$ Planck's konstant).

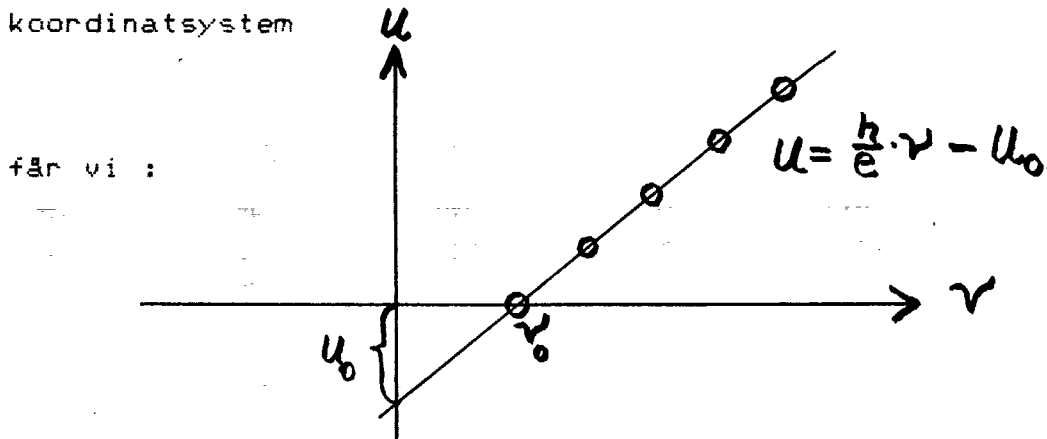
1.7

$$W_{kin} = h\nu - W_a$$

i et elektrisk felt vil tab i W_{kin} betyde, at den potentielle energi øges tilsvarende, og da $W_{pot} = Uxe$ hvor ($U =$ spændingsforskell og e er elementarladningen)

får vi : $U_e = h\nu - U_0 \cdot e$ ($U_0 = U_0 \cdot e$) (se fig.) 1.8

ved at optegne denne funktion i et koordinatsystem



hvor $\frac{h}{e}$ er linjens hældningskoefficient og heraf kan h beregnes.

1.6.2 Planck's konstant påvist.

Denne teori/eksperiment viser sig at holde for en nærmereeftervisning, og dermed er vist at Planck's energi-konstant også kaldet et virkningkvantum, er en universel konstant, som dækker de atomare tilstande (den er jo fastlagt ud fra elektromagnetiske bølger).

1.6.3 lysets dualitet.

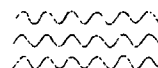
Hermed er samtidig vist, at den klassiske fysik ikke dækker de atomare energitilstande.

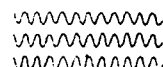
Vi har samtidig fået en dobbeltmodel for lys :

fotoner kaldes
også et
lyskvant.


Fig 1.14


Bølgemodel


Rødt lys =
længere bølger


Violet lys =
kortere bølger

Partikelmodel


Fotoner
af rødt lys


Fotoner af
violet lys

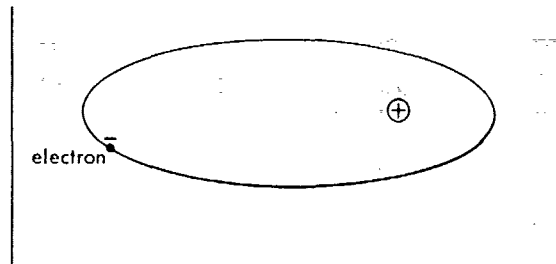
Og hermed har både Huygens og Newton ret i Deres teorier men vi vil senere se, at de 2 tilstande ikke kan optræde samtidig.

Der bliver nu arbejdet videre på løsningen af de atomare problemer incluciv Einstein's løsning men først i 1911 kommer den næste "store" opdagelse. Alt stof var indtil da blevet betragtet som en sammenhængende masse med positive og negative ladninger.

1.7 Rutherford's planetmodel.

Men i sommeren 1911 udføres en række eksperimenter i Manchester under Rutherford's ledelse. Eksperimenterne bygger på at bombardere nogle tynde metalfolier med et radioaktivt stof der har 2 positive ladninger (kaldes idag alfa-stråler), for at iagttage hvordan atomernes elektroner påvirkes af disse positive "fremmedlegemer". Som forventet går de stærkt positivt ladede legemer med den store hastighed (og hermed energi) lige gennem folierne uden hindring i de fleste tilfælde.

Men en dag opdager de, at nogle af de stærkt positivt ladede alfa-partikler kastes tilbage, hvilket jo er forbløffende (det svarer til at en geværkugle kastes tilbage af et stykke avispapir), og dette kræver mange intensive eksperimenter for at få fastlagt årsagen. Sidst på efteråret kan Rutherford fremsætte sin revolutionerende atommodel :



planetmodellen :

fig 1.15

The Rutherford model of the hydrogen atom. On this scale both the electron and the nucleus are so very small that in fact you could not see them at all, even though the linear magnification is 10^9 times.

hvor al den positive ladning og atomets masse er samlet på et meget lille område (kernen), og hvor elektronerne svæver i baner omkring denne ligesom planeterne omkring solen.

1.7.1 Elektron - spiralisering ind i kernen ?

Men denne model viser sig ikke at holde, for hvis elektronerne bevæger sig i baner omkring kernen, må de ændre hastighed undervejs dvs. accelerere og herved vil de ifølge Maxwell afgive energi i form af udsendelse af elektromagnetiske bølger (Hertz), og når de taber energi vil de blive tiltrukket stærkere af kernens positive ladning og tilsidst opsluges i kernen :

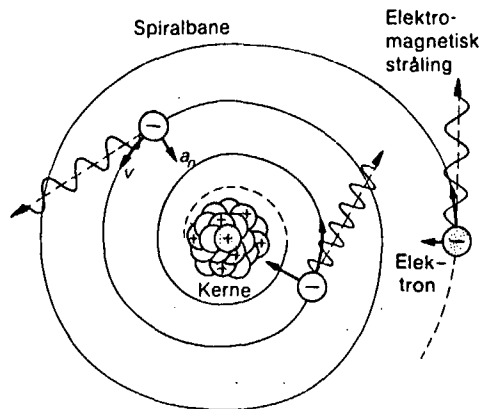


Fig 1.16

Elektronen vil, ifølge Maxwells teori, udsende stråling under omløbet, hvorfor den falder ind mod kernen i en spiralformet bane.

Dette viser eksperimenterne ikke er tilfældet, idet de udsender lys med faste intervaller, som vi kan iagttage det i spektrallinierne.

Løsningen på dette problem får vi i 1913 ved hjælp af en dansk fysiker NIELS BOHR.

2 BOHR - SOMMERFELDS KVANTETEORI.

2.1 Bohrs atomteori.

Det næste store skridt i kvanteteoriens udvikling efter Planck's introduktion af energikvanter og Einstein's teori for lyskvanter, blev foretaget af den danske fysiker Niels Bohr.

Bohr arbejdede oprindeligt med metallernes elektronteori (disputats 1911 : "Studier over metallernes elektronteori"). For at videreføre studierne inden for dette område rejste han til Cambridge, men J.J.Thomson, der var leder af Cavendish-laboratoriet, viste kun ringe interesse for den unge Bohrs arbejder (desuden var der store problemer med publicering af Bohr's disputats på engelsk). Under opholdet i Cambridge blev Bohr stærkt interesseret i Rutherford's studier af atomets opbygning, hvorfor Bohr besluttede at fortsætte sine undersøgelser af metallernes elektronstruktur hos Rutherford i Manchester. Her blev Bohr efterhånden involveret i arbejdet omkring atomets struktur. Dette arbejde mandede ud i Bohrs berømte atommodel, der blev præsenteret i 1913 (fig 2.1).

2.1.1 Bohrs postulater.

Bohr byggede videre på Rutherford's planetariske atommodel (se kap 1.), idet han kompletterede den med følgende postulater :

1. Kvantebetingelsen. Et atom kan eksistere i en serie stationære tilstande, hvor elektronen kredser omkring kernen uden at emitte elektromagnetisk stråling. I enhver af disse tilstande besidder atomet en veldefineret energimængde

THE
LONDON, EDINBURGH, AND DUBLIN
PHILOSOPHICAL MAGAZINE
AND
JOURNAL OF SCIENCE.

[SIXTH SERIES.]

JULY 1913.

I. *On the Constitution of Atoms and Molecules.*
By N. BOHR, *Dr. phil. Copenhagen* *.

Introduction.

IN order to explain the results of experiments on scattering of α rays by matter Prof. Rutherford† has given a theory of the structure of atoms. According to this theory, the atoms consist of a positively charged nucleus surrounded by a system of electrons kept together by attractive forces from the nucleus; the total negative charge of the electrons is equal to the positive charge of the nucleus. Further, the nucleus is assumed to be the seat of the essential part of the mass of the atom, and to have linear dimensions exceedingly small compared with the linear dimensions of the whole atom. The number of electrons in an atom is deduced to be approximately equal to half the atomic weight. Great interest is to be attributed to this atom-model; for, as Rutherford has shown, the assumption of the existence of nuclei, as those in question, seems to be necessary in order to account for the results of the experiments on large angle scattering of the α rays‡.

In an attempt to explain some of the properties of matter on the basis of this atom-model we meet, however, with difficulties of a serious nature arising from the apparent

* Communicated by Prof. E. Rutherford, F.R.S.

† E. Rutherford, *Phil. Mag.* xxi. p. 669 (1911).

‡ See also Geiger and Marsden, *Phil. Mag.* April 1913.

($E_1, E_2, E_3 \dots\dots\dots$).

2. Frekvensbetingelsen. Når et atom ændrer energi fra E_1 til E_2 emitteres eller absorberes elektromagnetisk stråling med frekvensen ν bestemt ved $h\nu = E_1 - E_2$, hvor h er Planck's konstant.

Bohrs første postulat indebærer en accept af den planetariske atommodel og er desuden et forsøg på at omgå modellens iboende instabilitet, da elektronen (ifølge den klassiske elektrodynamik) ville emitte elektromagnetisk stråling og spiralisere ind mod kernen (se fig 2.2). Postulatet indfører desuden energiens kvantisering og angiver dermed, at elektronen kun kan antage bestemte værdier.

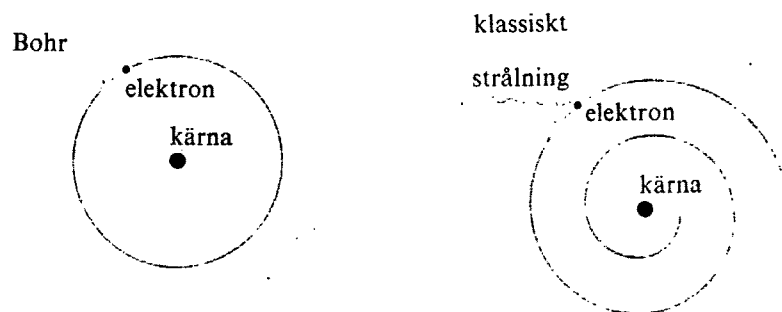


Fig. 2.2. Illustration af Bohrs første postulat.

Det andet postulat (fig. 2.3) leder sammen med princippet om energiens kvantisering til diskrete linier i atomernes emissionsspektrum.

2.1.2 Atommodellen.

Bohr betragtede et en-elektronsystem (fig 2.4) bestående af en kerne (med ladning Ze), hvorom der kredser en elektron med massen m_e og ladningen $-e$. Atomkernen anta-

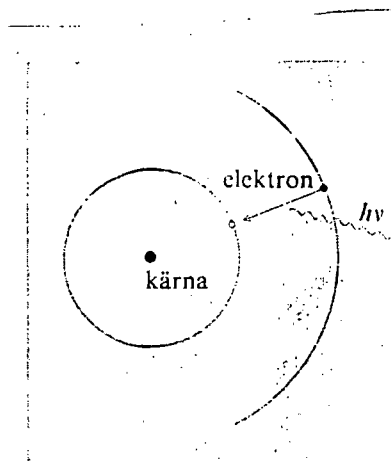


Fig. 2.3. Illustration af Bohrs andet postulat.

ges at være meget tung i forhold til elektronen og kan derfor betragtes som fastholdt i rummet.

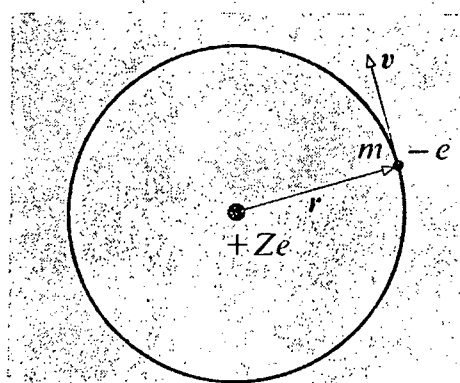


Fig. 2.4. Bohrs model for et en-elektronsystem.

Den elektromagnetiske tiltrækning mellem elektron og kerne antages at levere den til cirkelbevægelsen nødvendige centripedalkraft. Ved hjælp af Coulombs lov samt Newtons 2. lov fås :

$$\frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0 r} = \frac{m_e v^2}{r} \Rightarrow m_e v^2 = \frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \quad (2.1)$$

Elektronens kinetiske energi E_{kin} kan herefter beregnes

af :

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \left(\frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} \right) \quad (2.2)$$

Sædvanligvis sættes elektronens potentielle energi E_{pot} lig med nul, når denne befinder sig i uendelig afstand fra kernen. Fra elektrostatikken vides, at potentialet Φ omkring en punktformet ladning (Ze) er givet ved :

$$\Phi = \frac{Z e}{4 \pi \epsilon_0 r} \quad (2.3)$$

Heraf kan elektronens potentielle energi beregnes :

$$E_{pot} = -e \Phi = - \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} \quad (2.4)$$

Betegnes elektronens totale energi med E fås :

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} \right) - \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} = - \frac{Z e^2}{8 \pi \epsilon_0 r} \quad (2.5)$$

Dette udtryk for elektronens totale energi er en kontinuert funktion af radius, hvorimod Bohrs kvantebetingelse forudsætter en serie diskrete energier. Ud fra empiriske formler for atomspektre opstillede Bohr kvantebetingelsen for de stationære tilstande. Senere viste Bohr, at denne betingelse er ensbetydende med kravet om en kvantisering af elektronens impulsmoment. For de mulige elektronbaner gælder, at integralet af impulsmomentet over et omløb er et multiplum af Planck's konstant. Dette er ensbetydende med :

$$\int_0^{2\pi} L d\varphi = n h \Rightarrow L = \frac{n h}{2\pi} \quad \text{hvor } n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.6)$$

Ud fra definitionen på impulsmoment kan dets kvadrat udtrykkes som :

$$L^2 = m_e^2 v^2 r^2 \quad (2.7)$$

der ved hjælp af (2.1) og (2.6) kan omskrives til :

$$\left(\frac{nh}{2\pi}\right)^2 = \frac{Ze^2m_e r}{4\pi\epsilon_0} \quad (2.7)$$

Radius for de tilladte elektronbaner er derfor :

$$r = \frac{\epsilon_0 h^2}{Ze^2 m_e \pi} n^2 = \frac{a_0}{Z} n^2 \quad (2.8)$$

hvor konstanten

$$a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{e^2 m_e \pi} = 5,2917 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

kaldes Bohr-radius og svarer til brintatomets ($Z=1$) radius i grundtilstanden ($n=1$).

Brintatomets individuelle energiniveauer kan bestemmes af formlen :

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} \quad (2.9)$$

Rigtigheden af ovennævnte energiformel kan kontrolleres ved brug af frekvensbetingelsen :

$$\nu = \frac{1}{h} (E_{n_1} - E_{n_2}) \quad (2.10)$$

Divideres med lysets hastighed c_0 fås bølgetallet :

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (2.11)$$

hvor :

$$R = \frac{m_e Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c_0} = 10973731 \text{ m}^{-1}$$

er af samme størrelsesorden som Rydbergs konstant (se kapitel 1). Det bemærkes at udtrykket (2.11) er i præcis overensstemmelse med Rydbergs formel for brintatomets spektrum. Overensstemmelsen var af stor betydning for

accepten af Bohr's atomteori. De spektroskopiske termværdier kan derfor betragtes som et udtryk for atomets energiniveauer.

2.1.3 Brintspektret.

Andvendes Bohrs energiudtryk (2.9) på brintatomet fås et energispektrum svarende til (figur 2.5). Det laveste energiniveau ($n=1$), der kaldes grundtilstanden, er brintatomets normale tilstand. Over grundtilstanden ligger den første exciterede tilstand ($n=2$). Såfremt atomet - ved tilførsel af energi - overgår til denne tilstand, vil det hurtigt efter falde tilbage til grundtilstanden under emission af et strålingskvantum (jvf. Bohrs frekvensbetingelse). Bohr's atommodel er kun gyldig for en-elektronsystemer, men ved at anvende energiformlerne på brintlignende systemer (dvs. enkeltioniseret helium He^+ samt dobbeltioniseret lithium Li^{++}) opnås resultater der er i overensstemmelse med de eksperimentelle data.

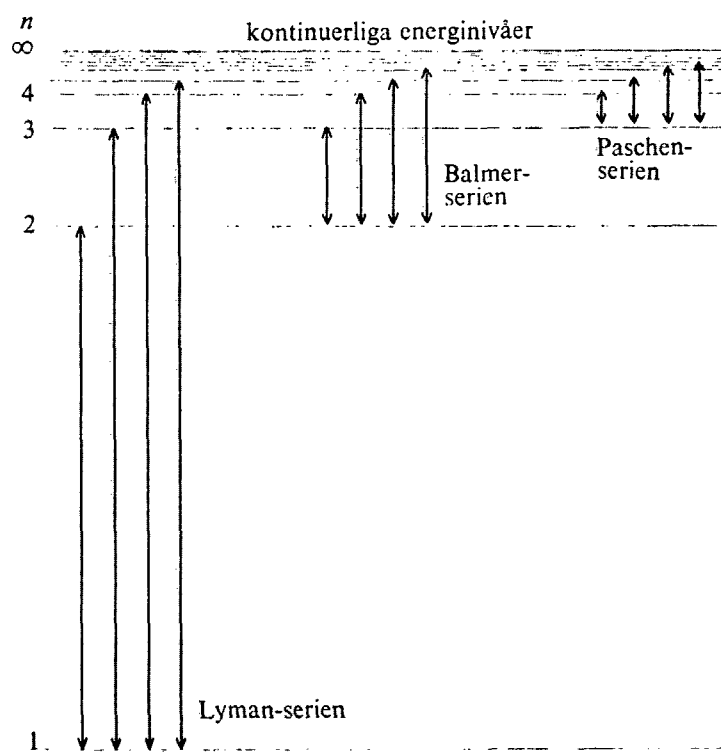


Fig. 2.5. Brintatomets energiniveauer.

2.1.4 Franck-Hertz' forsøg.

Året efter, at Bohr havde publiceret sin atomteori, forsøgte tyskerne J.Franck og G.Hertz eksperimentelt at påvise excitationerne. Franck og Hertz anvendte et kato-destrålerør fyldt med kviksølvdamp (fig 2.6). Katoden emitterer elektroner, som opsamles af anoden. Foran anoden findes et gitter, hvis potential er højere end anodens, således at elektroner, der har mistet det meste af deres kinetiske energi (på grund af kollisioner med kviksølvatomerne), ikke kan nå frem til anoden.

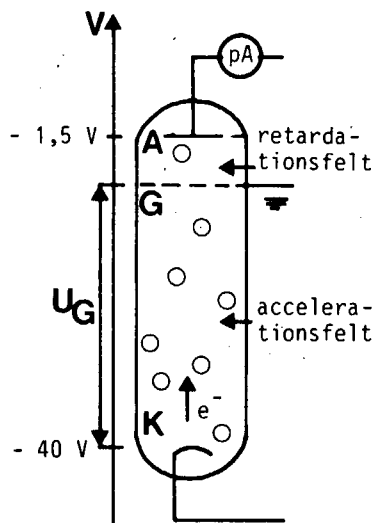


Fig 2.6. Franck-Hertz's forsøg. G = gitter, A = anoden, K = katode, U_G = gitterspænding.

Ved succesiv spændingsforøgelse observeres fluktationer i anodestrømmen (fig 2.7). Samtidig med de individuelle fald i strømstyrke lyser kviksølvdampen med en karakteristisk blå farve. Det første minimum svarer til elektroner, som har mistet al deres kinetiske energi, efter at de har kollideret med kviksølvatomer, som herved ek-

citeres. Det næste minimum svarer til elektroner, som har været udsat for to kollisioner, hvorved de har mistet al deres energi, og så fremdeles.

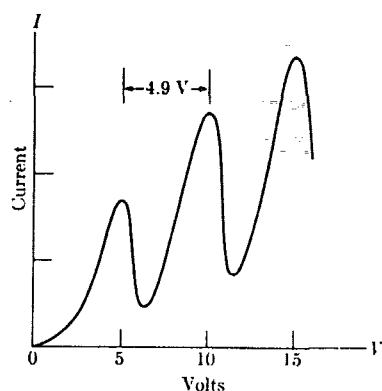
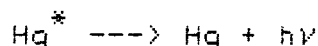


Fig. 2.7. Anodestrømmens variation som funktion af gitterspændingen. Når elektronerne har tilstrækkelig energi til at ionisere kviksølvatomerne afleverer de hel deres energi, og resultatet er et dyk i anodestrømmen.

De exciterede kviksølvatomer vender tilbage til deres grundtilstand ved emission af en foton :



Denne lysudsendelse er forklaringen på den blå lysende kviksølv damp. Fra spektroskopien har man erfaret, at exciterede kviksølvatomer emitterer stråling af en frekvens, som svarer til energien 4.86 eV. Franck - Hertz-forsøget var et slående bevis for eksistensen af stationære tilstande og var herigennem af stor betydning for accepten af Bohrs atomteori.

2.1.5 Korrespondensprincippet.

Bohr definerede korrespondensprincippet under et Berlin - besøg i 1920. Dette princip er ikke udledt matematisk fra kvantemekanikken, men er snarere et på intuition baseret forsøg på at fjerne konflikterne mellem den "gamle" og den "nye" fysik.

Korrespondensprincippet fastslår, at kvantemekanikken og den klassiske fysik skal stemme overens i grænseområderne. Grænsen nås, når kvantetallene er "store" - eksempel-vis stor n -værdi i Bohr-atomet. Korrespondensprincippet kan anskueliggøres ved følgende eksempel. En elektron med massen m_e og farten v kredser omkring en atomkerne. Elektronens klassiske omløbsfrekvens er :

$$\nu_k = \frac{v}{2\pi r} \quad (2.12)$$

Substitueres heri ligning (8) fås :

$$\nu_k = \frac{e^4 m_e}{4\epsilon_0^2 h^3} \frac{1}{n^3} \quad (2.13)$$

Efter Maxwell's love vil elektronen emitteere elektromagnetisk stråling med netop denne frekvens. Anvendes i stedet Bohrs postulater udsendes kun stråling, når elektronen springer fra den stationære tilstand n til den lavere liggende tilstand $(n-1)$. Ifølge 2. postulat emitteres elektromagnetisk stråling med frekvensen :

$$\nu = \frac{e^4 m_e}{8\epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n-1)^2} \right) \quad (2.14)$$

der for $n \rightarrow \infty$ kan approksimeres ved :

$$\nu \approx \frac{e^4 m_e}{4\epsilon_0^2 h^3} \frac{1}{n^3} \quad (2.15)$$

Det fremgår således, at $\nu \rightarrow \nu_k$ når $n \rightarrow \infty$.

2.2 Sommerfelds Kvanteteori.

Bohrs atommodel var et vigtigt skridt i retning af en forståelse af atomets opbygning, men man erkendte snart, at modellen måtte modificeres for at være i overensstemmelse med en række eksperimentelle kendsgerninger.

Som nævnt i afsnit 1.3, undersøgte hollenderen Pieter Zeeman lysemissionen fra atomer, der befinder sig i et magnetfelt og opdagede, at de enkelte spektrallinier opspaltes i en serie af tætliggende linier. Johannes Stark opdagede i 1913 en tilsvarende opspaltning af brintatomets spektrallinier i et ekvært elektrisk felt (Stark-effekten). Bohrs atommodel gav ikke mulighed for at forklare disse effekter.

2.2.1 Sommerfelds elliptiske atommodel.

Skønt skeptisk overfor atommodeller blev det den tyske fysiker Arnold Sommerfeld, der i 1915-16 videre udviklede atomteorien. Sommerfeld generaliserede Bohr's atommodel ved - i overensstemmelse med Keplers love - at antage elliptiske elektronbaner med kraftcentret (kernen) i det ene brændpunkt. I Sommerfelds teori tilføjes endnu en kvantebetingelse, idet ellipsens ekcentricitet antages at være kvantiseret. En elliptisk elektronbane kan karakteriseres ved et hovedkvantetal (n), der bestemmer storaksens længde, samt et banekvantetal (l), som bestemmer ellipsens form. For elektronbanens storakse (a_n) fandt Sommerfeld:

$$a_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{Z e^2 \pi m_e} n^2 \quad (2.16)$$

hvilket er ækvivalent med banediameteren i Bohrs atommodel.

Til hver storakse a_n hører en række mulige værdier for lilleaksen $b_{n,l}$:

$$b_{n,l} = a_n \frac{l+1}{n} \quad \text{hvor } l=0,1,2,3,\dots \quad (2.17)$$

Eksempler på Sommerfelds elektronbaner er vist på (fig. 2.8) :

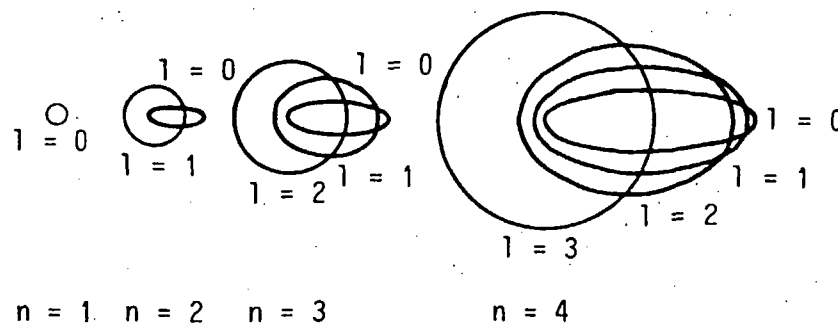


Fig. 2.8. Sommerfelds model for elektronbanerne i et brintatom.

Desuden hævdede Sommerfeld, at banequanttallene $l = 1, 2, 3, \dots$ svarer til spektraltermene s, p, d, ...

2.2.3 Impulsmoment og magnetisk kvantetal.

Elektronens impulsmoment fastlægges ligeledes af banequanttallet og dets længde kan udtrykkes som :

$$|\vec{L}| = (l(l+1))^{\frac{1}{2}} h/2\pi \quad (2.18)$$

Heraf følger, at det størst mulige impulsmoment opnås (med fastholdt energi) for $l = n - 1$, dvs. når elektronbanen er cirkulær.

Eksperimenter havde vist at impulsmomentvektoren kun kan indtage bestemte orienteringer i rummet (rumkvantisering). For at forklare dette fænomen indførte Sommerfeld og Debye i 1916 det magnetiske kvantetal m_l , idet impulsmomentets orientering i forhold til et ydre magnetfelts retning er kvantiseret således, at impulsmomentvektorens projektion på B-feltets retning kun kan antage diskrete værdier, der er multipla af Planck's konstant.

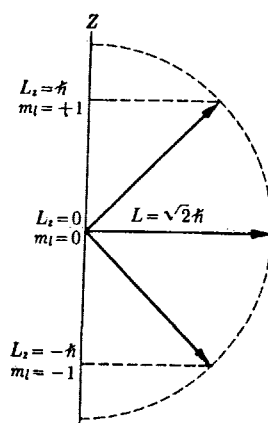


Fig. 2.9. Impulsmomentets mulige orienteringer svarende til $l = 2$.

Ved simple trigonometriske beregninger ses at :

$$\cos \varphi = m_l / (l(l+1))^{1/2} \quad (2.19)$$

Vælges z-aksen som polar-akse kan impulsmomentvektorens z-komponent L_z udtrykkes ved :

$$L_z = m_l \hbar \quad (2.20)$$

Det skal bemærkes, at det er umuligt samtidigt at angive L_x , L_y , L_z (se opg. 5.2.1), idet impulsmomentvektoren præcesserer omkring z-aksen (fig 2.10).

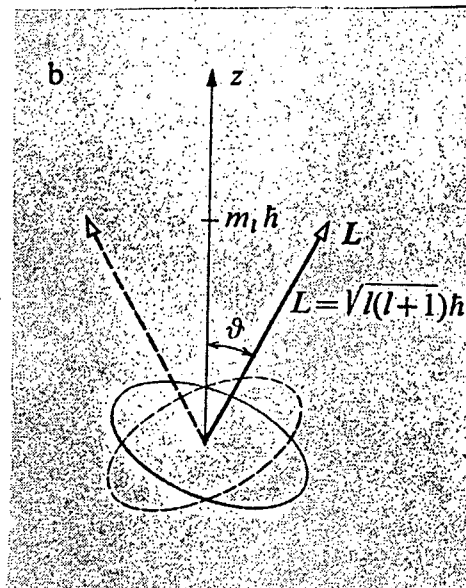


Fig. 2.10. Impulsmomentets præcessionsbevægelse omkring z-aksen.

2.2.4 Zeeman-effekten.

Elektronens banebevægelse er ækivalent med en lille elektrisk strøm (fig. 2.11) og dermed et magnetisk dipolmoment $\vec{\mu}$, som kan vises at være :

$$\vec{\mu} = - \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (2.21)$$

På grund af elektronens negative ladning er det magnetiske dipolmoment rettet modsat baneimpulsmomentet.

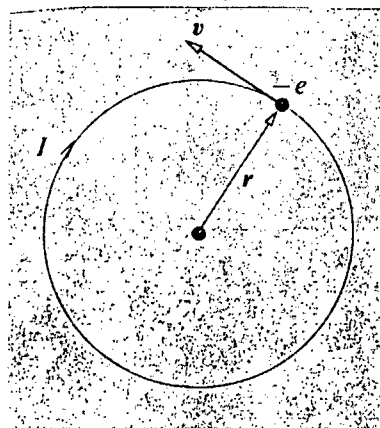


Fig. 2.11. Elektronens banebevægelse som ifølge den klassiske elektrodynamik giver en elektrisk strøm.

Den magnetiske energi E_m af en elektron, der kredser om en kerne kan klassisk udledes på grundlag af Ampere - Laplace's lov. Herved fås :

$$E_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (2.22)$$

Ved at lade B -feltet være orienteret parallelt med z -aksen kan (2.18) omskrives til :

$$E_m = -\mu_z B \quad (2.23)$$

Vi fandt i forrige afsnit, at baneimpulsmomentets enkelte komponenter kun kan antage værdier, som er multipla af Planck's konstant. Heraf følger, at det magnetiske dipolmoments komponenter kun kan antage værdierne :

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z = -m_l \mu_B \quad (2.24)$$

hvor $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ kaldes Bohrmagnetonen.
Substitution af (2.24) i (2.23) resulterer i :

$$E_m = \mu_B B m_l \quad (2.25)$$

For et atom anbragt i et eksternt magnetfelt bliver elektronens totale energi :

$$E_n = E_{n,l} + \mu_B B m_l \quad (2.26)$$

Resultatet er en opspaltning af energiniveauet $E_{n,l}$ i $(2l + 1)$ niveauer (fig 2.12), idet m_l som bekendt kun kan antage $(2l + 1)$ værdier. Energiopspaltningen er direkte proportional med magnetfeltets størrelse. Ovenstående er en forklaring på Zeeman-effekten.

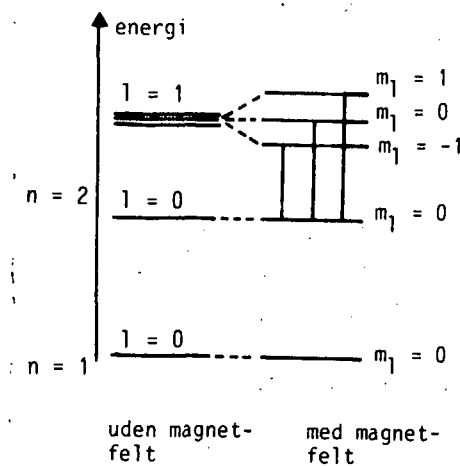


Fig. 2.12. Zeeman-effekten.

2.3 Kvanteteoriens krise.

I 1921-22 forsøgte Bohr at give en forklaring på grundstoffernes fysiske og kemiske egenskaber (dvs. det periodiske system). Hovedprincippet var, at en elektronskal med kvantetallene (n, l) er lukket, når den indeholder $2n^2$ (dvs. 2, 8, 18, 32,) elektroner.

Bohrs forklaring på det periodiske system kan betragtes som højdepunktet i den "gamle" kvanteteori. Kort tid efter blev fysikere i stigende grad bevidste om krisen i den Bohr-Sommerfeld'ske kvanteteori. Problemerne knyttede sig især til atomernes elektronkonfiguration, spektrernes finstruktur samt Stern-Gerlach's eksperiment.

2.3.1 Spektrenes finstruktur.

Omhyggelige studier af optiske spektre og spektrenes finstruktur afslørede, at mange linier, som ifølge den daværende atomteori burde være enkle, i virkeligheden bestod af to eller flere tætliggende linier (multipletter). Denne opspaltning kaldes spektrets

finstruktur. Eksempelvis består natriumspektrets gule linie af to komponenter med bølgelængderne 589.0 nm og 589.6 nm.

Sommerfeld havde i 1920 forsøgt at fortolke spektrenes finstruktur ved at introducere et "internt" kvantetal (j), som han tilskrev effekten af elektronens vekselvirkning med atomets øvrige atomer. Andre fysikere mente, at det "interne" kvantetal var et mål for atomets samlede impulsmoment.

2.3.2 Stern-Gerlach eksperimentet.

De to tyske fysikere Otto Stern og Walter Gerlach havde i 1921 vist, at atomare magneter er rumligt kvantiserede. De sendte et strålebundt af sølvatomer gennem et kraftigt inhomogent magnetfelt. Ifølge den klassiske fysik kan der forventes et udtværet strålebundt af sølvatomer, idet alle rumlige orienteringer er lige sandsynlige. Stern og Gerlach fandt derimod, at strålen opdeltes i to komponenter (se fig 2.13), hvilket var et bevis for rumkvantiseringen.

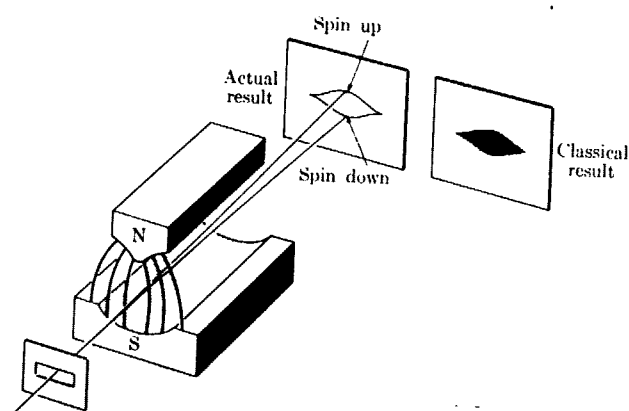


Fig. 2.13. Stern-Gerlachs eksperiment.

Resultatet var dog i modstrid med den på det tidspunkt kendte kvanteteori. Da l er et heltal bliver antallet af mulige m_l - værdier altid ulige. Således skulle strålen i Stern-Gerlachs eksperiment forventes opspaltet i et ulige antal komponenter. Et lige antal komponenter skulle analogt hermed svare til et halvtalligt impulsmomentkvantetal. Dette forhold var stærkt medvirkende til hypotesen om endnu et impulsmoment - elektronens spin.

2.4 Pauliprincippet.

På grundlag af røntgenstrålestudier forsøgte den engelske fysiker E.C.Stoner i 1924 at forklare atomernes elektronkonfigurationer ved at inddrage det "mystiske" kvantetal j .

Året efter antog østrigeren Wolfgang Pauli, at kvantetallene j og l begge er banequantetal for elektronen. Samtidig viste Pauli, at Stoners fordelingsregel blot er en konsekvens af følgende generelle princip :

I et atom kan der højst findes een elektron med et givet sæt kvantetal (n, l, j, m) .

Denne regel, der kaldes Pauli's udelukkelsesprincip, forklarede samtidig hvorfor tallene 2, 8, 18, 32 ... kompletterer elektronskallerne.

2.5 Spin.

I 1925 indførte hollænderne Samuel Goudsmit og George Uhlenbeck spinhypotesen. Man forestillede sig elektronens spin som en rotation omkring dens egen akse (fig

2.14). Det viste sig senere, at denne opfattelse var fejlagtig, og at spinbevægelsen ikke har nogen klassisk analogi.

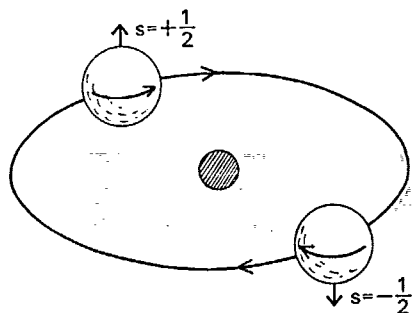


Fig. 2.14. Goudemits & Uhlenbecks opfattelse elektronens spin.

Spinnet er en vektor, hvis størrelse er :

$$|\vec{S}| = (s(s+1))^{1/2} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \quad (2.27)$$

I modsætning til baneimpulsmomentet har spinnet således altid samme størrelse. Elektronen har et spinkvantetal $s = 1/2$. Spinnets projektion på en fastlagt akse kan antage $(2s + 1)$ værdier (fig 2.15), nemlig $m_s \hbar$, hvor $m_s = -s, -s + 1, -s + 2, \dots, s, \dots, s - 2, s - 1, s$. For elektronen fås følgende m_s -kvantetal : $m_s = +1/2$, som betegnes spin-op ($m_s = 1/2$) og spin-ned ($m_s = -1/2$). Da elektronen er en ladet partikel resulterer dens spin i et magnetisk moment μ_s . Størrelsen af denne vektor er : Elektronen kan betragtes som en lille magnet, der bevæger sig i en bane omkring atomets kerne. Elektronens bevægelse resulterer i dannelsen af et magnetfelt \vec{B} , hvis retning er modsat baneimpulsmomentet \vec{L} . Spinnet indstiller sig enten parallelt eller anti-parallelt med impulsmomentet. Ved vektoraddition (fig 2.16) fås elek-

tronens totale impulsmoment \vec{J} : $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Heraf fremkommer en forklaring på det af Sommerfeld indførte kvantetal j , idet $j = l + s$.

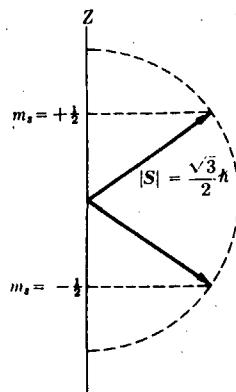


Fig. 2.15. Spin-impulsmomentets mulige orientering i forhold til atomets polarakse.

Et sølvatom indeholder kun en elektron i yderste skal. Da $l = 0$ ses, at elektronens totale impulsmoment er lig med spinnet, hvilket er ensbetydende med, at $j = s$. J kan derfor kun indstille sig i to retninger i forhold til et magnetfelt. Hermed er Stern-Gerlachs eksperiment forklaret.

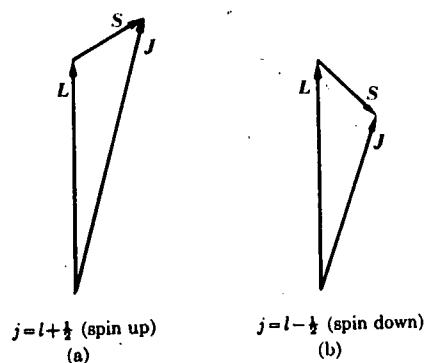


Fig 2.16. Vektoraddition af bane- og spinimpulsmoment.

2.6 Det periodiske system.

Paulis udelukkelses princip siger, at der kun kan være een elektron i hver kvantetilstand beskrevet ved kvantetallene n, l, m_l, m_s . For hver nl -tilstand kan m_l antage $(2l + 1)$ værdier, og for hver af disse kan m_s antage 2 værdier. Hver nl -tilstand kan således opfyldes med $2(2l + 1)$ elektroner uden at være i modstrid med udelukkelsesprincippet (fig. 2.17). Atomerne kan opbygges ved at fylde elektroner på de lavest liggende energiniveauer. Når een nl -tilstand er fyldt op, begynder opfyldningen af den næste nl -tilstand.

Impulsmoment, l	0	1	2	3	4
Symbol	s	p	d	f	g
Antal pladser	2	6	10	14	18

Fig. 2.17. Antal elektronpladser i en nl -tilstand; n er vilkårlig.

Niveauerne er samlet i grupper, der er adskilt af energigab. Hver gruppe udgør en skal og hvert nl -niveau udgør en underskal. De enkelte skaller betegnes med bogstaverne K, L, M, N,..... svarende til tilstande med henholdsvis $n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Fig 2.18 viser, at skallerne er fyldt op i atomer med $Z = 2, 8, 18, 36, 54, \text{ og } 86$, og disse atomer svarer netop til de inaktive gasarter, der alle udviser yderst ringe kemisk aktivitet på grund af de fyldte skaller. Atomets kemiske egenskaber bestemmes primært af antallet af elektroner i den

yderste skal, og herudfra er det muligt at opbygge grundstoffernes periodiske system.

Bemærk desuden periodiciteten af ioniseringsenergiene. Fig 2.19 viser elektronkonfigurationen i de 10 første grundstoffer. s-underskallerne har en blok, som kan optage 2 elektroner med modsat spin, mens p-underskallerne har 3 blokke ($m_l = +1, 0, -1$), der hver især kan optage 2 elektroner. Elektronkonfigurationen afslører en række interessante aspekter.

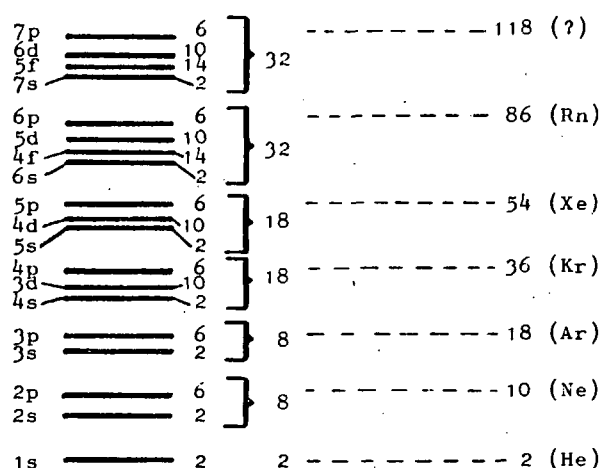


Fig. 2.18. Atomernes elektronskalstruktur.

Brint har en enkelt 1s-elektron og lithium en enkelt 2s-elektron relativt tæt på 2 p-niveauerne. På grund af 2s-elektronens større afstand fra kernen har den desuden en lavere ioniseringsenergi.

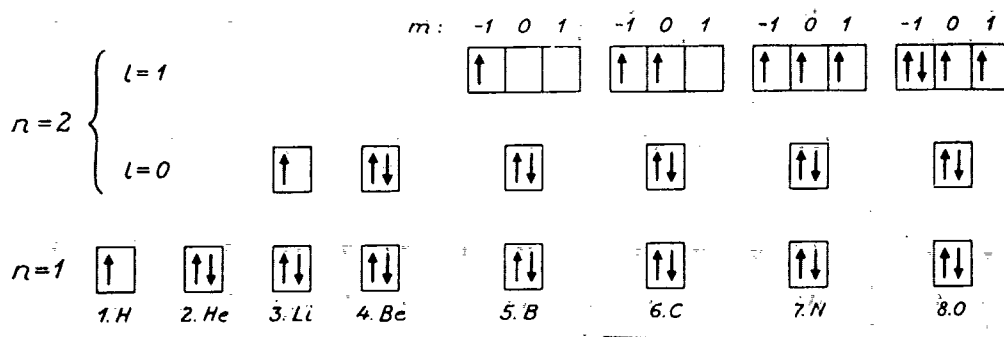


Fig. 2.19. Grundtilstandskonfigurationen for de første 10 atomer. Det ses hvordan elektronerne fylder niveauerne op.

Opgaver.

Opg. 2.1. Find brintatomets radius i grundtilstanden samt den første exciterede tilstand.

Opg. 2.2. Beregn ioniseringsenergien for et brintatom, der befinder sig i den anden exciterede tilstand.

Opg. 2.3. Et H-atom befinder sig i grundtilstanden. Beregn elektronens fart og impulsmoment ved hjælp af Bohrs teori.

Opg. 2.4. Bestem radius for den inderste bane, som elektronerne i dobbeltioniseret, beskriver.

Opg. 2.5. Bestem forskellen i bølgelængde mellem brint og deuterium (tung brint) i Lyman-serien.

Opg. 2.6. Elektronen i et brint-atom springer fra tilstanden med kvantetallet $n = 6$ til en slutttilstand med $n = 3$. Hvor mange forskellige spektrallinier fås?

Opg. 2.7. Bestem impulsmomentets størrelse for en s-elektron i grundtilstanden. Sammenlign med opg. 2.3.

Opg. 2.8. Beregn ved hjælp af Bohrs energiformel de tre laveste energiniveauer for H^+ og Li^{++} . Sammenlign disse niveauer med tilsvarende målte.

Opg. 2.9. Et brint-atom, der befinder sig i den første exciterede tilstand, påføres et eksternt magnetfelt. I hvor mange niveauer opspaltes energien? Hvor stor er forskellen i magnetisk energi mellem de enkelte niveauer, når feltet er $4T$?

Opg. 2.10. Hvad er baneimpulsmomentets størrelse for en elektron, hvis $l = 2$? Bestem de mulige vinkler mellem impulsmomentet og et magnetfelt parallelt med z-aksen.

Opg. 2.11. En elektron ændrer m_s -værdien fra $+1/2$ til $-1/2$. Hvor stor er ændringen i elektronens impulsmoment?

Opg. 2.12. Bestem de mulige værdier af J , når $l = 3$ og $s = 1/2$.

Opg. 2.13. Angiv de sandsynlige elektronkonfigurationer for ilt-, natrium- og kloratomerne.

3. MOD EN KONSISTENT KVANTETEORI.

I begyndelsen af 20'erne blev det mere og mere klart, at hvad man senere kaldte den gamle kvanteteori var utilstrækkelig til at beskrive atomets stadig mere komplekse spektralstruktur, og i forsøget på at løse flere af disse problemer fremstod teorien også stadig mere fragmentarisk og antog derfor en fortvivlende 'ad hoc' karakter.

Et typisk træk ved den gamle kvanteteori var dens statiske karakter. Bohr-Sommerfeld atomet var en atommodel, der med udgangspunkt i den klassiske mekanik byggede på en række postulater, og den var fuldstændig indholdsløs på dynamiske sammenhænge. Dette betød bl.a., at man ikke var i stand til at forklare forskellene i spektralliniernes intensiteter, hvilket åbenbart måtte fortolkes, at nogle overgange var mere sandsynlige end andre.

Det var især en konsekvens af disse ting, at der fra juli 1925 til juni 1926 udvikledes 2 af hinanden uafhængige mekaniske kvanteteorier, der sammen senere skulle udgøre fundamentet for den moderne kvantemekanik. De 2 teorier byggede på et vidt forskelligt matematisk grundlag, men også deres fysiske grundlag var væsensforskellige.

Det var Werner Heisenbergs matrixmekanik, og det var Erwin Schrødingers bølgemekanik.

Matrixmekanikken blev først og fremmest udviklet af de tyske Göttingen-fysikere Heisenberg, Jordan og Born, og indledtes med en artikel af Heisenberg i juli 25 i Zeitschrift für Physik. Den indeholdt en vanskelig abstrakt matematisk formalisme, der ikke straks blev accepteret

af mange fysikere - den blev ofte beskyldt for "unanschaulichkeit" - og Göttinge-fysikerne gjorde derfor meget for at hævde matrixmekanikkens troværdighed gennem en anvendelse af den ny mekanik på en række fysiske problemer. Dette var dog ikke overbevisende, for de valgte eksempler udgjorde mere eller mindre idealiserede billeder på fysiske systemer. Hvad der manglede, var en demonstration af, matrixmekanikkens formalisme også var i stand til at behandle fysiske systemer, som de faktisk forekommer i naturen.

Det blev derfor nødvendigt at anvende teorien på brintatomet, der som det simpleste fysiske system i naturen, ville udgøre en afgørende test for bedømmelsen af matrixmekanikkens troværdighed. Men Heisenberg kunne ikke løse problemet med brintatomet, og det blev derfor først løst i januar 26 i 2 artikler af henholdsvis Pauli og den engelske fysiker P. A. M. Dirac.

På dette tidspunkt blev den første af ialt 4 artikler med hovedtitlen "Quantisierung als Eigenwertproblem" publiceret i Annalen der Physik. Det var den tyske østrigske fysiker ved Zürich Universitet, Erwin Schrödinger, der her fremlagde sine ideer til en kvantemekanik, baseret på stoffets partikel-bølge dualitet. Til forskel fra Heisenbergs matrixmekanik, der videreførte det klassiske partikelbillede igennem ikke-kommuterende operatorer, som erstattede den klassiske mekaniks bevægelseskonstanter, så anvendte Schrödinger en langt mere anskuelig men alligevel fremmedartet bølgebeskrivelse af atomare partikelsystemer.

Schrödingers første artikel indeholdt også en behandling af brintatomet som test for teoriens troværdighed, og

den pådrog sig derfor stor opmærksomhed, især da Schrödinger i en artikel i marts 26 påviste en fuldstændig ækvivalens mellem Heisenbergs matrixmekanik og Schrödingers egen bølgemekanik - trods deres vidt forskellige grundlag.

De 2 kvanteteorier kom bemærkelsesværdigt nok også fra to vidt forskellige teoretiske skoler. Gøttingefysikerne, der udviklede matrixmekanikken, beskæftigede sig med atomteori, som den tog sig ud i den gamle kvanteteori, og den havde et nært forhold til Bohrs Institut for Teoretisk Fysik i København. Derimod tilhørte Schrödinger den Einsteinske skole, for hvem arbejdet omkring kvante-gas-statistikken var foretrukket. Bølgemekanikken udsprang altså ikke fra Bohr-Sommerfeld atomteorien, men var derimod en følge af arbejdet med gasteorien.

3.1. Stoffets partikel-bølge dualitet.

Grundlaget for Schrødingers bølgemekanik må direkte tillægges en fransk fysiker, Louis de Broglie, der i november 1924 forsvarede sin doktorafhandling, hvor han heri tillagde stoffet bølgeegenskaber, der var udtrykt ved de samme simple relationer, som Einstein havde fundet for beskrivelse af lyskvanter.

Louis de Broglie havde især været optaget af de fundamentale problemer omkring rum og tid og strukturen af stof og lys. Det var derfor ingen overraskelse, at de Broglie hentede sin inspiration fra Einstein. Ved kulminationen af de Broglie's arbejde i begyndelsen af 20'erne, var han således optaget af følgende spørgsmål: "Hvordan kan en portion energi opfattes, hvis ikke den associeres en bestemt frekvens?"

Det var resultaterne af Einsteins 2 betydningsfulde artikler fra 1905 om henholdsvis den specielle relativitetsteori og den fotoelektriske effekt, der tiltrak de Broglie opmærksomheden. Når masse er ækvivalent med stoffets indre energi igennem relationen

$$E = m_0 c^2$$

og strålingsenergi er karakteriseret ved dens frekvens

$$E = h\nu$$

så førte det til, at de Broglie antog, at masse måtte tilskrives en frekvens givet ved

$$m_0 c^2 = h\nu$$

3.1

Denne kombination, som de Broglie selv kaldte "une grande loi de la nature", var grundlaget for et for partiklen indre periodisk fænomen, som de Broglie beskrev ved en såkaldt fasebølge, associeret til den pågældende partikel.

Ved at tillægge stoffet bølgeegenskaber, antog de Broglie videre, at partiklen også kunne tilskrives en bestemt bølgelængde relateret til partiklens impuls. Inspireret af lysets bølge-partikel dualitet, lod han sig her lede af Comptons resultat, og anvendte direkte sammenhængen mellem fotonens bølgelængde og dens impuls

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{hvor} \quad p = |\bar{p}| \quad 3.2$$

Denne bølgelængde for materielle partikler er kendt som de Broglie-bølgelængden, og anvendes sammenhængen mellem bølgetal og bølgelængde

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

finder man partiklens impuls udtrykt ved bølgetalsvektoren

$$\bar{p} = \hbar \bar{k} \quad \text{hvor} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad 3.3$$

Disse relationer var i sig selv ikke nogen nyopdagelse, da Einstein's teori om lyskvanter allerede havde dem indeholdt. Men gyldighedsområdet, hvorpå de Broglie anvendte disse, var ny og uortodoks. De materielle partikler, hvorpå relationerne blev anvendt, gav en smuk analogi mellem stof og lys.

De Broglie forsøgte også at anvende sine ideer på brint-atomet, men det var uden nævneværdigt resultat, for til forskel fra Schrödinger blev de Broglie aldrig ført frem

til en bølgeligning. Derimod lykkedes det de Broglie at give en bølgefortolkning af Bohr's kvantebetingelse for atomets stationære tilstande, dvs.

$$|\bar{L}| = r p = n h \quad 3.4$$

Han antog, at elektronen kunne tillægges stående stofbølger med en bølgelængde $\lambda = h/p$, og elektronen derfor kunne beskrives ved et helt antal bølgelængder svarende til den n 'te tilstand

$$n \lambda = 2 \pi r_n$$

hvilket fører til

$$n h = |\bar{L}_n|$$

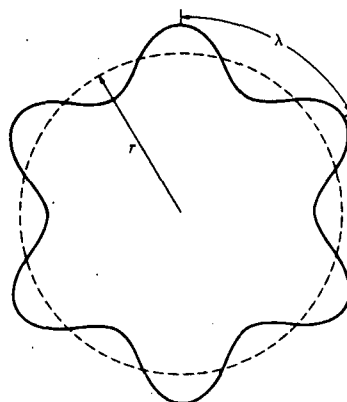


Fig. 3.1

Derfor blev Bohr's kvantebetingelse til en resonansbetingelse for de Broglie's fasebølge.

De Broglie's resultater blev publiceret i en række mindre franske artikler i 1922-23, men først gennem hans doktorafhandling i november 24, dukkede hans ideer også op i fysikerkredse udenfor Paris - og da udelukkende på foranledning af Einstein, der havde set de Broglie's ideer og i forbindelse med Bose-Einstein kvantestatistikken, refererede til disse, "fordi", skrev Einstein, "jeg tror, at de involverer mere end blot en analogi".

3.1.1 Dobbeltspalte-eksperimenter.

For nærmere at belyse partikel-bølge dualitetens konsekvenser eksempelvis for en elektron vil vi nu betragte en serie tankeeksperimenter sammenlignet med de tilsvarende klassiske modstykke.

Tankeeksperimenterne er de såkaldte dobbeltspalteeksperimenter, for hvilke der anvendes en nærmere defineret kilde, et dobbeltspaltesystem, hvor spalterne enkeltvis kan lukkes, samt en detektor.

Vi betragter først et klassisk eksperiment, hvor vi benytter en isotropisk partikelkilde, som vist på figuren herunder. Dette betyder, at det samme antal partikler pr. tidsenhed passerer gennem hver spalte.

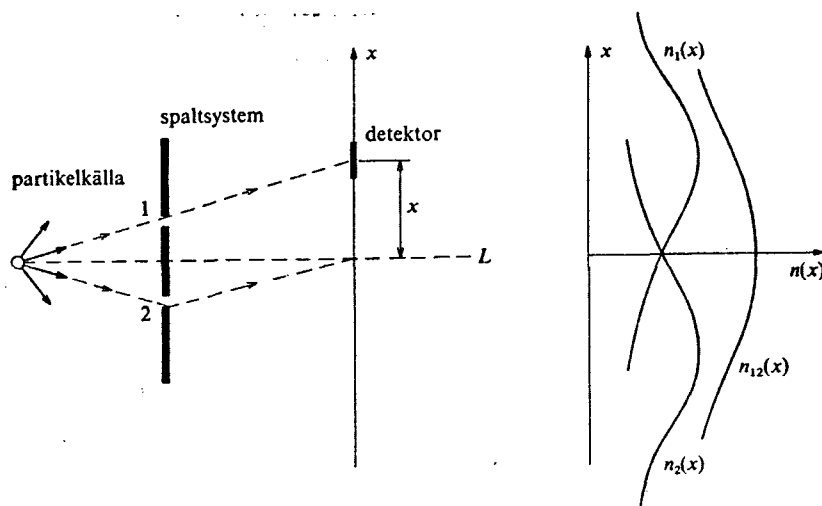


Fig. 3.2

Ett klassiskt försök med partiklar.

Måler vi nu intensitetsfordelingen langs x-aksen $n(x)$ med henholdsvis spalte 2 lukket i første forsøg og spalte 1 lukket i andet forsøg, finder vi en fordeling givet ved henholdsvis $n_1(x)$ og $n_2(x)$. Gentages nu forsøget med begge spalter åbne, vil vi ikke uventet finde, at intensiteten $n_{12}(x)$ vil være en sum af bidraget fra spalte 1 og spalte 2

$$n_{12}(x) = n_1(x) + n_2(x)$$

I et andet klassisk eksperiment vil vi nu erstatte partikelkilden med en bølgekilde, som vist på figuren herunder.

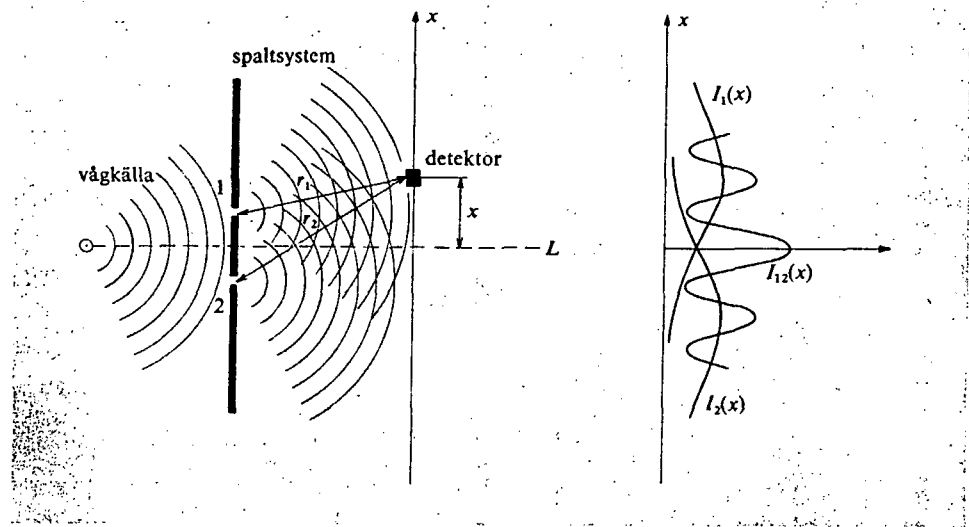


Fig. 3.3.

Ett klassiskt försök med vattenvågor.

Vi vil tilsvarende måle intensitetsfordelingen i de 3 førnævnte spaltesituationer.

Kvadratet på bølgenes amplitude er et udtryk intensitet, og man finder for spalte 1 åben

$$I_1(x) = |A_1(x)|^2$$

og tilsvarende for spalte 2 åben

$$I_2(x) = |A_2(x)|^2$$

Men er begge spalter åbne, finder man som følge af interferens mellem de 2 bølger at

$$I_{12}(x) = |A_1(x) + A_2(x)|^2$$

og interferens mønsteret dannes på grundlag af faseforskellen δ imellem bølgerne, når de detekteres.

I intervallet $\delta \in]-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$ er interferensen konstruktiv, og tilsvarende for $\delta \in]\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}[$ opnår man

destruktiv interferens. Endvidere finder man lokale maksimum og minimum for henholdsvis $\delta = 0$ og $\delta = \pi$

Vi vil nu gå over til et kvantefysisk eksperiment og anvende en elektronkilde. Betragtes elektroner som partikler, vil man forvente, at intensitetsfordelingen var ækvivalent med det klassiske partikeleksperiment. Man ville også kunne tale om elektronerne havde passeret spalte 1 eller spalte 2.

Som det fremgår af figuren herunder, er dette imidlertid ikke tilfældet, og resultatet

$$\tilde{n}_{12}(x) \neq \tilde{n}_1(x) + \tilde{n}_2(x)$$

er en konsekvens af, at vi i dette eksperiment må tilskrive elektronerne bølgenatur, der giver anledning til interferens.

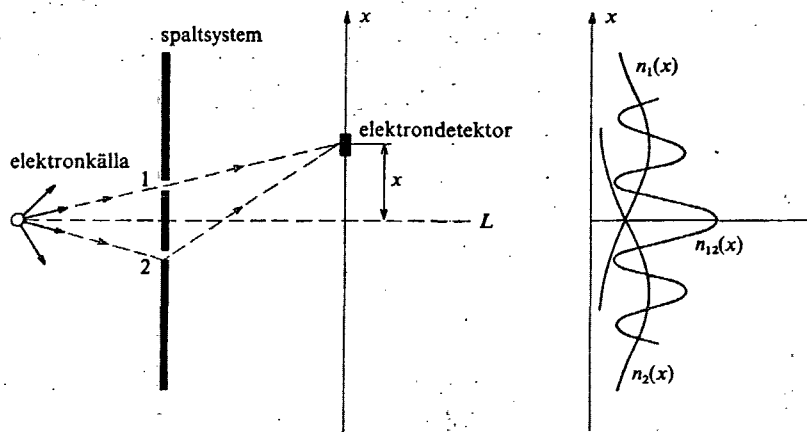


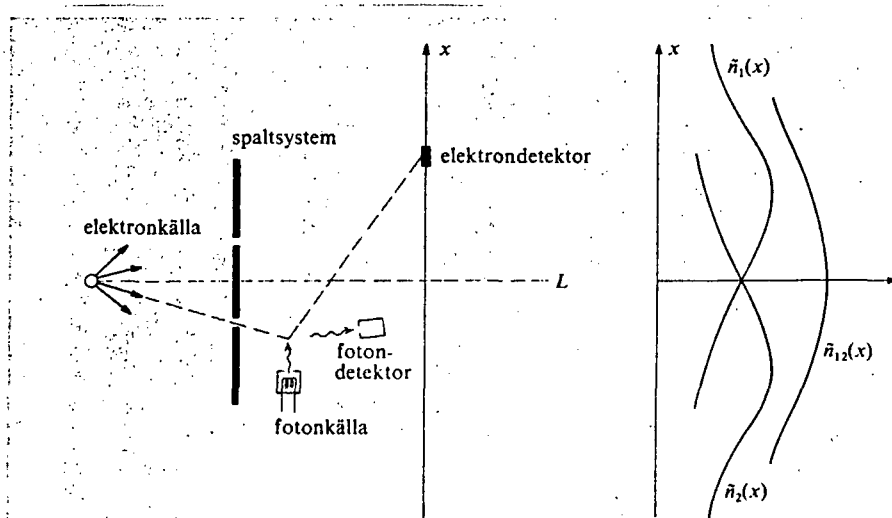
Fig. 3.4
Ett försök med elektroner.

For nærmere at undersøge elektronernes partikel-bølge natur kan vi nu gentage forsøget, blot nu at have suppleret opstillingen med en fotonkilde mellem spalt-systemet og detektoren, som vist på figuren herunder

Dette giver anledning til en Comptonspredning af fotonerne og ved impulsbevarelse vil man herved kunne finde hvilken spalte elektronen passerede igennem. Samtidig finder man, som vist på figuren, at interferenseffekten er gået tabt, og resultatet følger af, at elektronerne nu må tilskrives partikelegenskaber, hvor det gælder

$$n_{12}(x) = n_1(x) + n_2(x)$$

På den ene side må elektroner altså tillægges bølgeegenskaber, mens de i andre sammenhænge må tillægges partikelegenskaber. Dette er et afgørende træk ved den dualistiske beskrivelse, og som vi senere skal se, er netop denne beskrivelse et fundamentalt aspekt i fortolkningen af kvantemekanikken.



Ett försök med »märkta» elektroner.

Opgaver til kapitel 3.1.

- Stoffets partikel-bølge dualitet.

1. Bestem de Broglie-bølgelængden for en elektron, der:

a) har en kinetisk energi på 100eV,

b) bevæger sig med en hastighed på 1m/s,

når elektronens masse kan sættes til $9,1 \cdot 10^{-31}$ kg.

c) Bestem endvidere de Broglie-bølgelængden for en partikel med massen 1g, der bevæger sig med hastigheden 1m/s.

2. a) Hvad er kvanteenergien af en foton i området af det synlige lys, hvor $\lambda = 5000\text{\AA}$.

b) Hvor stor er bølgelængden af en elektron med samme kinetiske energi som fotonen i spørgsmål a).

c) Hvor stor er bølgelængden af en elektron med samme impuls som fotonen i spørgsmål a).

d) Hvad er elektronens kinetiske energi med en impuls givet ved c).

3. Antag at en elektronstrøm med de Broglie-bølgelængden 10^{-8} cm rammer et dobbeltspaltesystem, hvor afstanden imellem spalterne er 10^{-2} cm.

Bestem afstanden mellem det primære og det sekundære interferensmaksimum, når detektoren flyttes langs periferien af en cirkel med radius 10cm og centrum i spaltesystemets midtpunkt.

4. Find de realistiske dimensioner for spaltesystem og detektor i dobbeltspalteeksperimentet med elektroner, der har en energi på henholdsvis 1eV og 1keV.

3.2. Schrødingers bølgemekanik.

I forevejen var fransk videnskab ikke særlig velanskrevet i de større fysiske miljøer, men Einsteins autoritet skabte en tilstrækkelig interesse for de Broglie's ideer. I Zürich blev denne interesse til kimen for Schrødingers bølgemekanik.

Schrödinger, der på dette tidspunkt var meget optaget af Bose-Einstein kvantestatistikken, blev på opfordring af kollegaen Peter Debye bedt om at gennemføre et kollektivum over de Broglie's teori, og forberedelsen til dette fik ham ansporet. Efter Schrødingers kollektivum bemærkede Debye, at det virkede ret barnligt at behandle tingene på den måde, for som student af Sommerfeld havde han lært, for at gribe en bølge rigtig an så måtte man have en bølgeligning. - Kun få uger efter ved et andet kollektivum startede Schrödinger: "Min kollega Debye foreslog, at man skulle have en bølgeligning. Vel, jeg har fundet en!"

Med dette var bølgemeknikken for alvor lagt i støbeskeen.

I overensstemmelse med de Broglie's teori, der egentlig var en ren relativistisk teori primært anvendt på frie partikler, så søgte Schrödinger med dette grundlag at skabe en relativistisk bølgemekanik, der sigtede mod partikler i bundne tilstande, og især lade brintatomet være den primære test for teoriens rigtighed.

Schrødingers arbejdede derfor ihærdigt på en relativistisk bølgemekanik i de sidste måneder i 1925, men han måtte i december 25 give op, da han ikke kunne få resultaterne til at stemme overens med spektrale observationer. Paradoksalt nok var Schrødingers relativistiske behandling korrekt nok, men den kunne ikke reproduksere

finstrukturen korrekt, og grunden til dette var, at Schrödinger ikke kunne gøre rede for det ukendte elektronspin.

Schrödinger vendte sig da mod en ikke-relativistisk behandling, og han opdagede derved, at de spektrale resultater teorien herved gav, var i overensstemmelse med de eksperimentelle forventninger. Dette foranledigede Schrödingers fire artikler "Quantisierung als Eigenwertproblem" i foråret 1926.

Bølgemekanikken, der indeholdt et reelt fysisk anskuellesbillede, og samtidig demonstrerede sin rigtighed ved sin behandling af brintatomet, blev derfor modtaget med stor interesse - også af Göttinge-fysikerne.

3.3. Bølger og bølgepakker.

I et afsnit i Schrödingers 2. artikel om "Quantisierung ..." tog han de Broglie's ideer op til overvejelse, idet de Broglie's formål havde været at skabe en ren dualistisk teori for partikler og bølger, med en fasebølge associeret til den frie partikel, så blev det her Schrödingers ambition at erstatte de materielle partikler med såkaldte bølgepakker, dvs. superponerede bølger indenfor et snævert bølgetalsinterval, og hvor Schrödinger fæstnede interesse ved bølgenes amplitude.

3.3.1. Bølger og fasehastighed.

Schrödinger anvendte sig af en plan, harmonisk sinusbølge, der var fremadskridende i rum og tid. I 1 dimension er en sådan bølge karakteriseret ved bølgetallet $k = 2\pi/\lambda$, og vinkelfrekvensen $\omega = 2\pi\nu$, og bølgebevægelsen kan da beskrives ved en bølgefunktion

$$\psi(x,t) = A \sin(kx - \omega t)$$

hvor A er bølgens amplitude og fasen er givet ved $\varphi = kx - \omega t$.

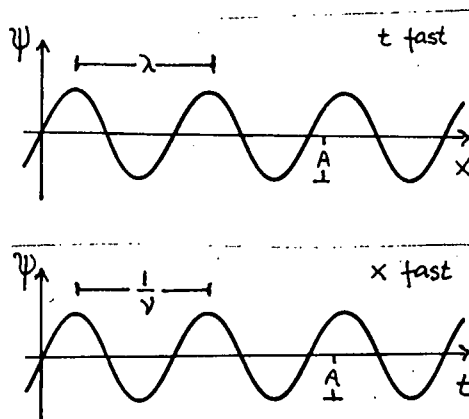


fig. 3.6

Man kan nu se, at fasehastigheden, der var et væsentligt element i de Broglie's teori, må kunne skrives som $v_f = \Delta x / \Delta t$

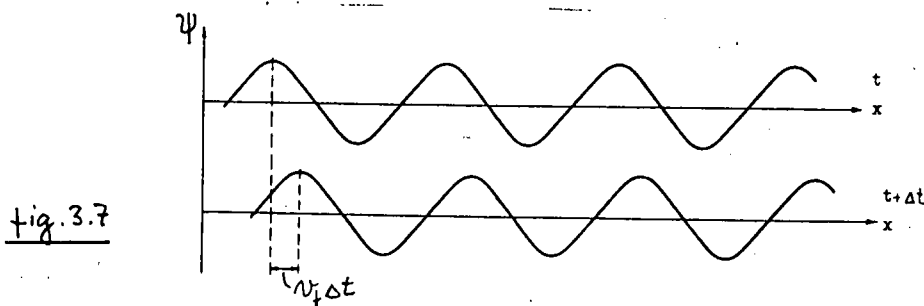


fig. 3.7

og anvendes at fasen er konstant for samme værdier af ψ , så finder vi

$$kx_0 - \omega t_0 = k(x_0 + \Delta x) - \omega(t_0 + \Delta t)$$

og heraf fås direkte fasehastigheden som funktion af k og ω

$$\Downarrow k \Delta x - \omega \Delta t = 0$$

$$v_f = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\omega}{k}$$

3.5

3.3.2 Bølgepakker og gruppehastighed.

Schrødingers tiltag var nu at superponere harmoniske bølger indenfor et snævert bølgetalsinteval, og derved danne en bølgefunktion, der kun har store amplituder i et lille område af rummet, netop der hvor bølgerne er i samme fase, mens de udslukker hinanden udenfor dette område. Ifølge de Broglie-relationen $p = \hbar k$ ville dette svare til at partiklens rumlige afgrænsning kunne identificeres som bølgepakkens udstrækning.

Vi vælger derfor at superponere bølger i et lille kontinuert bølgetalsinteval

$$k \in [k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k]$$

og den resulterende bølgefunktion, bølgepakken, bliver når vi vælger en fast tid t_0 eksempelvis $t_0 = 0$

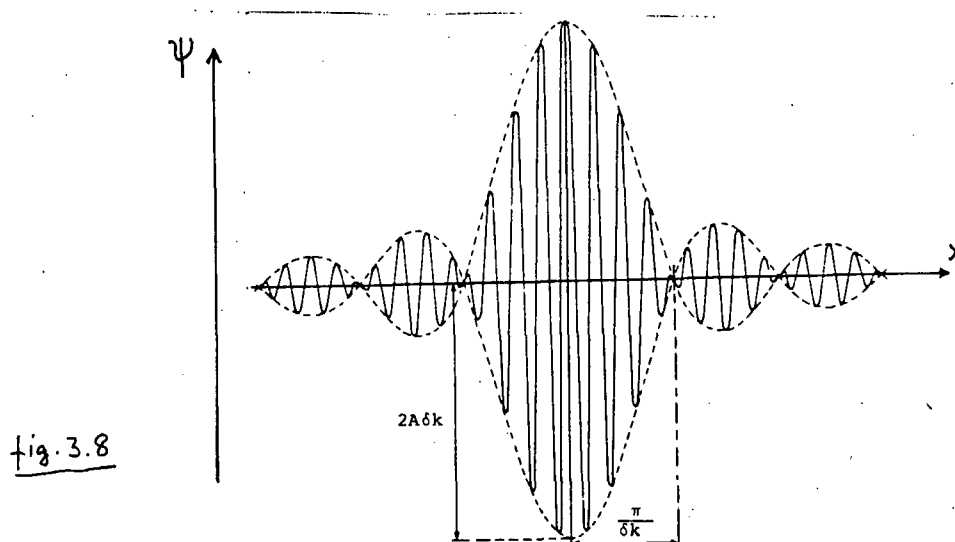
$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \sin(kx) dk \\ &= -A \left[\frac{\cos(kx)}{x} \right]_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \\ &= \frac{A}{x} [\cos(k_0 - \Delta k)x - \cos(k_0 + \Delta k)x] \\ &= \frac{A}{x} [\cos k_0 x \cos \Delta k x + \sin k_0 x \sin \Delta k x \\ &\quad - \cos k_0 x \cos \Delta k x + \sin k_0 x \sin \Delta k x] \\ &= \frac{A}{x} 2 \sin k_0 x \sin \Delta k x \end{aligned}$$

dvs.
$$\psi(x) = 2A \frac{\sin \Delta k x}{x} \sin k_0 x$$

3.6

Den fremstillede bølgepakke er antydnet på figuren herunder, og den viser en sinusbølge med en amplitude givet ved faktoren

$$\tilde{A} = 2A \frac{\sin \Delta k x}{x}$$



Det ses bl.a., at bølgefunktionen stort set forsvinder udenfor det område, hvis bredde er omvendt proportional med bredden $2\Delta k$ af det interval, hvorfra bølgetallene er valgt.

Dette betyder, at harmoniske bølger, som er i fase i bølgepakkens centrum, for at komme i modfase i afstanden Δx fra centeret må have en forskel i bølgetal Δk således at

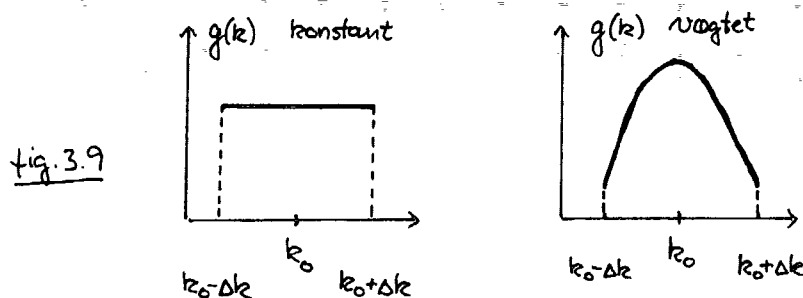
$$\Delta x \Delta k = \pi$$

og det vil sige, at bølgepakkens udstrækning ikke kan gøres mindre end af størrelsesordenen

$$\Delta x = \frac{1}{\Delta k}$$

3.7

Derimod kan bølgepakkens form ændres. Vi har her superponeret harmoniske bølger med en lige vægt i hele k -intervallet, men ved at indføre en vægtfunktion $g(k)$, f.eks. en gaussfunktion, kan k -værdierne nærmest k_0 blive vægtet højest, hvorved bølgepakkens form - men ikke dens udstrækning - ændres tilsvarende.



Det vil sige, at man i bølgebeskrivelsen af partikler må vælge et realistisk bølgetalsinterval og en tilsvarende vægtfunktion, der tilgodeser den ønskede beskrivelse.

Det var nu nærliggende for Schrødingere at se på bølgepakkens udbredelse i tiden, hvilket måtte beskrives med en gruppeløsheds, der kunne identificeres som partiklens hastighed.

Bølgepakkens udvikling i tiden er bestemt af vinkelfrekvensen ω af de harmoniske bølger, som indgår i bølgepakken, idet ω samtidig er en funktion af k . Derfor vil bølgepakkens til tiden t kunne skrives

$$\Psi(x,t) = A \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \sin(kx - \omega(k)t) dk$$

Vi udnytter nu, at bølgepakken kun omfatter bølgetal k meget tæt ved k_0 , således at også ω kun vil afvige lidt fra $\omega(k_0)$, og vil derfor anvende en første-ordens potensrække af $\omega(k)$

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \frac{d\omega}{dk} \quad 3.8$$

som indsættes i $\Psi(x,t)$

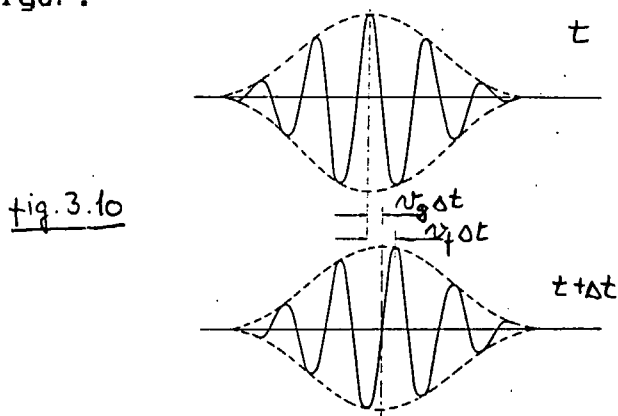
$$\begin{aligned}
 \Psi(x,t) &= A \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \sin(kx - \omega(k)t - (k-k_0)\frac{d\omega}{dk}t) dk \\
 &= A \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \sin(k_0x - \omega(k_0)t + (k-k_0)\frac{d\omega}{dk}t) dk \\
 &= A \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \sin(k_0x - \omega(k_0)t) \cos((k-k_0)(x - t\frac{d\omega}{dk})) dk \\
 &\quad + A \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \cos(k_0x - \omega(k_0)t) \sin((k-k_0)(x - t\frac{d\omega}{dk})) dk \\
 &= A \sin(k_0x - \omega(k_0)t) \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \cos((k-k_0)(x - t\frac{d\omega}{dk})) dk \\
 &\quad + A \cos(k_0x - \omega(k_0)t) \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \sin((k-k_0)(x - t\frac{d\omega}{dk})) dk
 \end{aligned}$$

dvs. $\Psi(x,t) = A \sin(k_0x - \omega(k_0)t) F_1(x - t\frac{d\omega}{dk}) \quad 3.9$
 $+ A \cos(k_0x - \omega(k_0)t) F_2(x - t\frac{d\omega}{dk})$

Integralerne er her åbenbart en funktion F af $(x - t\frac{d\omega}{dk})$ således at bølgepakken skrider frem med hastigheden

$$v_g = \frac{x}{t} = \frac{d\omega}{dk} \quad 3.10$$

hvor v_g er bølgepakkens gruppehastighed. Dette er vist på følgende figur.



Faseforskellen er ofte forskellig fra gruppehastigheden, således at bølgetoppene forskydes indenfor gruppen og nye toppe vokser op mens andre forsvinder.

Det må imidlertid bemærkes, at approximationen 3,8 kun er god i begrænset tid, for når tiden er vokset tilstrækkeligt, vil også højere ordens led i potensrækken være signifikante. Over lange tider vil bølgepakken derfor kunne ændre form og tværes ud.

3.3.3 Komplex, eksponentiel bølgefunktion.

I stedet for at beskrive bølger med en sinus- eller en cosinusfunktion kan vi naturligvis også beskrive bølger ved enhver linarkombination af sinus og cosinus.

I det følgende vil det være bekvemt at beskrive bølger ved en særlig linarkombination, nemlig den komplex, eksponentielle bølgefunktion

$$\exp i\varphi = \cos\varphi + i\sin\varphi$$

hvor "i" er det komplekse tal $\sqrt{-1}$

Uden at gå nærmere ind i teorien om komplekse tal, vil vi blot nævne et par væsentlige træk ved de komplekse tal, som vi vil benytte os af i det følgende.

Dels ses det umiddelbart at tallet "i" kvadreret giver $i^2 = -1$.

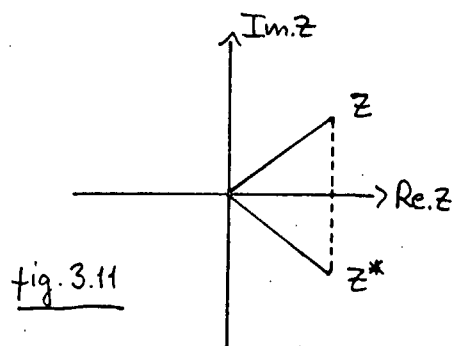
Et kompleks tal kan skrives på formen

$$z = a + ib$$

og tallet a kaldes realdelen af z , mens tallet b kaldes imaginærdelen af z . Ved kompleks regning med fysiske størrelser er det realdelen, der angiver den fysiske observerbare størrelse.

Man definerer tallets komplekskonjugerede som

$$z^* = a - ib$$



Absolutkvadratet af et kompleks tal findes derfor at være

$$z z^* = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2$$

Vi indsætter nu fasen for en plan, harmonisk bølgebevægelse $\phi = kx - \omega t$ i den komplekse, eksponentielle bølgefunktion

$$\psi(x, t) = \exp i(kx - \omega t)$$

og med differentiation med hensyn til x og t findes

$$\frac{d}{dx} \psi = ik \exp i(kx - \omega t) = ik \psi$$

$$\frac{d}{dt} \psi = -i\omega \exp i(kx - \omega t) = -i\omega \psi$$

dvs. ligegyldigt hvor meget vi differentierer eller integrerer denne bølgefunktion, vil dette resultat altid kunne udtrykkes med bølgefunktionen selv.

Endvidere kan man finde ved almindelig eksponentiel regning, at

$$\begin{aligned}
 \psi(x,t) &= \exp i(kx - \omega t) \\
 &= \exp(i kx) \exp(-i \omega t) \\
 &= \psi_1(x) \psi_2(t)
 \end{aligned}$$

altså kan en bølgefunktion på denne form sepereres i rum og tid.

Bølgefunktionen komplekskonjugerede findes til

$$\psi^*(x,t) = \exp -i(kx - \omega t)$$

og absolutkvadratet bliver derfor

$$\begin{aligned}
 |\psi|^2 &= \psi \psi^* \\
 &= \exp i(kx - \omega t) \exp -i(kx - \omega t) \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

Det er disse egenskaber ved den komplekse eksponentialfunktion, der gør det bekvemt at anvende den som bølgefunktion.

Opgaver i kapitel 3.3.

- Bølger og bølgepakker.

1. Hastigheden af havbølger kan vises at være $\sqrt{g\lambda/(2\pi)}$, hvor g er tyngdeaccelerationen og λ er bølgelængden.

Beregn heraf gruppehastigheden for havbølger.

2. Fasehastigheden for en given bølgebevægelse er $v_f = \sqrt{gk}$.

Bestem den tilhørende dispersionslov, og beregn bølgebevægelsens gruppehastighed.

3. En plan bølge på formen

$$\psi(r,t) = A \exp i(3r - \omega t)$$

har givet følgende dispersionslov

$$\omega(k) = 3 \cdot 10^2 / k^2$$

Beregn:

- a) Bølgelængden.
- b) Vinkelfrekvensen.
- c) Fasehastigheden.

4. For 2 bølger, der er på formen

$$\psi_1(x,t) = A \exp i(kx - \omega t)$$

$$\psi_2(x,t) = A \exp i((k + \Delta k)x - (\omega + \Delta \omega)t)$$

ønskes eftervist ved superposition af de 2 bølger, at

$$v_g = \Delta \omega / \Delta k$$

3.4 Stofbølger og Schrödingerligningen.

Selve bølgeligningen, altså den differentiaalligning, der skulle styre stofbølgebevægelsen, fandt Schrödinger frem til igennem anvendelse af en analogi mellem den klassiske mekanik og den geometriske optik, som sir William Hamilton næsten 100 år forinden havde forsøgt sig til at skabe en forenet teori imellem Newton's partikel dynamik og Huygens bølge teori.

1926.

Nº 6.

ANNALEN DER PHYSIK. VIERTE FOLGE. BAND 79.

1. *Quantisierung als Eigenwertproblem;* *von E. Schrödinger.*

(Zweite Mitteilung.)¹⁾

§ 1. Die Hamiltonsche Analogie zwischen Mechanik und Optik.

Bevor wir daran gehen, das Eigenwertproblem der Quantentheorie für weitere spezielle Systeme zu behandeln, wollen wir den *allgemeinen* Zusammenhang näher beleuchten, welcher zwischen der Hamiltonschen partiellen Differentialgleichung (H. P.) eines mechanischen Problems und der „zugehörigen“ *Wellengleichung*, d. i. im Falle des Keplerproblems der Gleichung (5) der ersten Mitteilung, besteht. Wir hatten diesen Zusammenhang vorläufig nur kurz seiner äußeren analytischen Struktur nach beschrieben durch die an sich unverständliche Transformation (2) und den ebenso unverständlichen Übergang von der *Nullsetzung* eines Ausdrucks zu der Forderung, daß das *Raumintegral* des nämlichen Ausdruckes *stationär* sein soll.²⁾

Der *innere* Zusammenhang der Hamiltonschen Theorie mit dem Vorgang der Wellenausbreitung ist nichts weniger als neu. Er war Hamilton selbst nicht nur wohlbekannt, sondern bildete für ihn den Ausgangspunkt seiner Theorie der Mechanik, die aus seiner *Optik inhomogener Medien* hervorgewachsen ist.³⁾ Das Hamiltonsche Variationsprinzip kann

1) Siehe diese Annalen 79. S. 361. 1926. Es ist zum Verständnis *nicht* unbedingt nötig, die erste Mitteilung *vor* der zweiten zu lesen.

2) Dieser Rechenvorgang wird in der vorliegenden Mitteilung *nicht* weiter verfolgt. Er sollte nur zur vorläufigen raschen Orientierung über den äußerlichen Zusammenhang zwischen der Wellengleichung und der H. P. dienen. ψ steht nicht wirklich zur Wirkungsfunktion einer bestimmten Bewegung in der von der Gleichung (2) der ersten Mitteilung behaupteten Beziehung. — Hingegen ist der Zusammenhang der Wellengleichung und der Variationsaufgabe selbstverständlich höchst real: der Integrand des stationären Integrals ist die Lagrange-Funktion für den Wellenvorgang.

3) Vgl. z. B. E. T. Whittaker, *Analytische Dynamik* (Deutsche Ausgabe bei Springer 1924). Kap. 11. S. 306 ff.

fig. 3.12

3.4.1 Lysbølgers dispersionslov.

Men lad os forinden se lidt på de elektromagnetiske bølger og den tilhørende bølgeligning for derigennem at ledes til en bølgeligning for stofbølgerne.

Compton-effekten havde bl.a. vist, at lys var kvantiseret med hensyn til energi og impuls :

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad 3.11$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad 3.12$$

og lys derfor kunne tilskrives såvel partikel- som bølgenatur.

For elektromagnetiske bølger er frekvens og bølgelængde relateret :

$$v\lambda = c$$

og der gælder derfor følgende sammenhæng mellem E og p eller ω og k :

$$E = cp$$

$$\omega = ck$$

hvilket er en sammenhæng, der kaldes dispersionsloven for lysbølger.

Man bemærker heraf, at såvel fase- som gruppehastighed for elektromagnetiske bølger er ækvivalent med lyshastigheden :

$$v_f = \frac{\omega}{k} = c \quad 3.13$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = c \quad 3.14$$

Dette indebærer, at en elektromagnetisk bølgepakke forplanter sig med lysets hastighed, samt at den bevarer sin form, idet dispersionsloven eksakt kan skrives på formen :

$$\omega(k) = \omega_0 + c(k - k_0) \quad , \text{ hvor } \omega_0 = ck_0$$

For en plan elektromagnetisk bølge, eksempelvis på formen :

$$\psi(x,t) = A \exp i(kx - \omega t)$$

bliver bølgeligningen da udtrykt ved følgende differentiaalligning :

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x,t) = \frac{1}{c^2} \frac{d^2}{dt^2} \psi(x,t) \quad 3.15$$

3.4.2 Stofbølgers dispersionslov.

For stofbølger gælder ifølge de Broglies teori de samme basisligninger (3.11-12) for energiens og impulsens kvantisering, og endvidere må der gælde, for at stofbølgebeskrivelsen skal indbefatte den klassiske mekanik (jvf. kap. 3.3), at bølgepakkens gruppehastighed er identisk med partiklens hastighed, dvs. :

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$$

Ved integration findes direkte stofbølgernes dispersionslov :

$$\int d\omega = \int \frac{\hbar k}{m} dk$$

$$\text{dvs.} \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} + \omega_0$$

hvor ω_0 er en konstant, der henfører til det på partiklen virkende potentiale.

Det vil nu være bekvemt at betragte en fri partikel, hvorfor vi kan sætte $\omega_0 = 0$, og vi finder :

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad 3.16$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad 3.17$$

Havde vi fundet dispersionsloven for en relativistisk partikel, ville vi direkte kunne se, at :

$$v_f > c \quad \text{og} \quad v_g < c$$

hvilket understreger fasebølgens formelle karakter.

3.4.3 Bølgeligningen for en fri partikel.

Vi antager nu at stofbølgerne er på samme form som lysbølgerne, i overensstemmelse med de Broglie's teori :

$$\Psi(x,t) = A \exp i (kx - \omega(k)t)$$

hvor (k) nu er givet ved 3.16, og vi kan da forsøge at gætte os til formen på bølgeligningen.

Hvis vi lader os lede af den elektromagnetiske bølgelignings udseende (3.15), bemærker vi at :

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x,t) = -k^2 \Psi(x,t) \quad 3.18$$

hvorfor den tidsafledede bølgefunktion skal søges at give samme potens af k . Dette ses at være tilfældet for

$$\frac{d}{dt} \Psi(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m} k^2 \Psi(x,t) \quad 3.19$$

Eliminerer vi k^2 i 3.18 og 3.19, og subtraheres disse, finder vi følgende bølgeligning, der er Schrödingerligningen for en fri partikel :

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x,t) = i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(x,t) \quad 3.20$$

3.4.4 Operatører for energi og impuls.

Vi vil nu indføre et nyt matematisk begreb - operatører - som gør det muligt at følge den videre behandling.

Hvis vi tager udgangspunkt i 3.18

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = -k^2 \psi$$

kan vi definere $-\frac{d^2}{dx^2}$ som operatoren for k^2 , dvs. vi kan benytte os af følgende transformation :

$$k^2 \rightsquigarrow -\frac{d^2}{dx^2} \quad 3.21$$

Anvender vi denne transformation på 3.20 fås :

$$\frac{(\hbar k)^2}{2m} \psi = i\hbar \frac{d}{dt} \psi$$

og fra 3.17 identificerer vi $\frac{(\hbar k)^2}{2m} = E$, hvilket må betyde

$$E \psi = i\hbar \frac{d}{dt} \psi \quad 3.22$$

Vi ser heraf, at energi-operatoren er

$$E \rightsquigarrow i\hbar \frac{d}{dt} \quad 3.23$$

og tilsvarende vil vi postulere, at der eksisterer en operator for impuls, givet ved transformationen :

$$P_x \rightsquigarrow i\hbar \frac{d}{dx} \quad 3.24$$

3.4.5 Schrödingerligningen.

Vi har i det foregående betragtet en fri partikel og dermed set bort fra et ydre potentiale, men er der tale om partikler, der bevæger sig under påvirkning af en ydre, konservativ kraft, må vi til 3.17 tilføje den potentielle energi $\Phi(x) \neq 0$

$$E = \frac{p^2}{2m} + \Phi(x) \quad 3.25$$

og under anvendelse af $p = \hbar k$ og operatorudtrykket 3.21 finder vi :

$$E \sim -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \Phi(x) \quad 3.26$$

hvilket er energioperatoren for en bunden partikel. Vi kan nu anvende denne operator på 3.22 og finder :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \Phi(x)\psi = i\hbar \frac{d}{dt} \psi \quad 3.27$$

Hermed har vi fundet frem til Schrödinger's bølgeligning for en bunden partikel eller blot Schrödingerligningen.

Dette er den grundlæggende differentialligning i den kvantemekaniske beskrivelse. For en partikel med massen m , som befinder sig i et vilkårligt konservativt kraftfelt med potentiel energi $\Phi(x)$, må der tilordnes en bølgefunktion $\psi(x,t)$, som er løsning til Schrödingerligningen. Specielt for $\Phi(x) = 0$ ses, at Schrödingerligningen overgår til Schrödinger's bølge

ligning for en fri partikel 3.20 .

3.4.6. Schrödingerligningen for stationære tilstande.

Vi vil nu hovedsageligt interessere os for stationære tilstande, dvs. tilstande hvor energien ikke afhænger af tiden. Og vi vil gøre den antagelse, at bølgefunktionen i Schrödingerligningen er separabel i rum og tid, dvs. er på formen :

$$\Psi(x,t) = u(x)v(t)$$

Denne separationsansats indsættes i Schrödingerligningen 3.27, og det bemærkes at differentiationerne kun virker på henholdsvis $u(x)$ og $v(t)$, samt at $\Phi(x)$ kun afhænger af x . Vi finder derfor :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} v(t) \frac{d^2}{dx^2} u(x) + v(t) \Phi(x) u(x) = i\hbar u(x) \frac{d}{dt} v(t)$$

og ved division med $u(x)v(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{u(x)} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + \Phi(x) = i\hbar \frac{1}{v(t)} \frac{d}{dt} v(t)$$

Vi kan også skrive dette som 2 funktioner F og G afhængig af hver sin variabel x og t .

$$F(x) = G(t)$$

Denne ligning kan kun være opfyldt, hvis begge sider af lighedstegnet er lig med en konstant ϵ . Vi ser dette ved f.eks. at holde t fast og variere x . Dvs. vi finder følgende 2 differentialligninger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + \Phi(x) u(x) = \epsilon u(x) \quad 3.28$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} v(t) = \epsilon v(t) \quad 3.29$$

skriver vi 3.29 på formen :

$$\frac{d}{dt} \psi(t) = -i \frac{E}{\hbar} \psi(t)$$

ser vi straks, at den har løsningen :

$$\psi(t) = A \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) \quad 3.30$$

Vi kan nu identificere konstanten E som partiklens totale energi E , idet vi anvender relationen $E = \hbar \omega$. Dette kunne vi imidlertid have set ved at sammenligne 3.23 med 3.29.

Derimod vil løsningen til differentiaalligningen 3.28 afhænge af det givne potentiale $\Phi(x)$, og vi kan derfor skrive bølgefunktionen for den stationære tilstand på formen :

$$\Psi(x, t) = A u(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

Det bemærkes, at bølgefunktionen $\Psi(x, t)$ varierer harmonisk i tiden med en vinkelfrekvens $\omega = E/\hbar$, og at funktionen $u(x)$ kan opfattes som en i rummet varierende amplitude.

For den stationære tilstand er den tidslige variation ikke forbundet med nogen ændring af systemets fysiske tilstand, der er fuldstændig karakteriseret af funktionen $u(x)$. Derfor betegnes $u(x)$ ofte som den stationære bølgefunktion, idet man så udelader faktoren $\exp(-i \frac{E}{\hbar} t)$.

En undersøgelse af et fysisk systems stationære tilstand i et givet potential $\Phi(x)$ må derfor baseres på løsningen af :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \Phi(x)\right) u(x) = E u(x) \quad 3.31$$

hvilket er den tidsuafhængige Schrödingerligning.

Anvendes en af Schrödinger indført notation for energioperatoren 3.23, hvilket benævnes Hamilton-operatoren :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \Phi(x) \quad 3.32$$

så bliver den tidsuafhængige Schrödingerligning på en særlig simpel form :

$$\hat{H}u(x) = Eu(x) \quad 3.33$$

og denne form kaldes en egenværdiligning.

Egenværdiligningen 3.33 har den egenskab, at Hamilton-operatoren og dermed energioperatoren ved at virke på $u(x)$, blot giver funktionen $u(x)$ selv, multipliceret med konstanten E , hvorfor man ved løsning af egenværdiligningen 3.33 finder energispektret for systemet med potentiel energi $\Phi(x)$.

Det vil sige, at man for et givet potentiale $\Phi(x)$ og en passende bestemmelse af den stationære bølgefunktion $u(x)$ - gennem en analyse af dens randbetingelser - nu er i stand til at bestemme energispektret for bundne partikler i en række forskellige potentialer.

Det bør dog nævnes, at løsningen af Schrödingerligningen i mange tilfælde er forbundet med overordentlig store vanskeligheder, og man tit er nødt til at benytte sig af selv grove approximationer for overhovedet at få numeriske resultater.

Vi vil i kap. 5.1 og 5.2 se et par eksempler på løsningen af 3.33 dels for et stykvis konstant potentiale,

der vil give en metodisk træning i løsning af stationære problemer, og dels for et Coulombpotentiale, der som model for brintatomet, vil anskueliggøre en mere praktisk anvendelse af kvantemekanikken, samt som Schrødingers mål at teste teoriens troværdighed.

Schrødingers vej til bølgeligningen var af en noget anden orden end den her skitserede, og som nævnt i indledningen af dette kap. byggede den på den Hamiltonske analogi mellem mekanik og optik.

Schrødingers fik i hans 1. og 2. artikel om "Quantisierung als Eigenwertproblem" fremstillet den tidsuafhængige Schrødingersligning gennem den Hamiltonske analogi, idet han på dette tidspunkt primært var interesseret i de stationære tilstande og især i brintspektret.

Brintatomet blev fremstillet allerede i den første artikel, og Schrødingers fandt her energiens og impulsmomentets kvantisering i fuldstændig overensstemmelse med de af Bohr og Sommerfeld fundne resultater.

Men først i Schrødingers 4. artikel om "Quantisierung ..." i juni 1926 præsenterede Schrødingers sin tidsuafhængige bølgeligning på baggrund af separationsantagelsen. I denne artikel indførte Schrødingers også operatører for energi og impuls, som en følge af hans ækvivalensartikel til Heisenbergs matrixmekanik.

Opgaver til kapitel 3.4.

- Stofbølger og Schrødingergligningen.

1. Eftersis, at for en plan, harmonisk bølge på formen

$$\psi(x, t) = A \exp i(kx - \omega t)$$

kan bølgegligningen for et elektromagnetisk felt skrives

$$(d^2/dx^2)\psi(x, t) = 1/c^2 (d^2/dt^2)\psi(x, t)$$

hvor dispersionsloven er givet ved $\omega = ck$.

2. Vis, ved anvendelse af de Broglie-relationen $p = \hbar k$ og operatorudtrykket $k^2 \rightarrow -(d^2/dx^2)$, at

$$p_x \rightarrow -i\hbar(d/dx)$$

3. For en bølgepakke

$$\psi(x, t) = A \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \exp i(kx - \omega(k)t) dk$$

med dispersionsloven for en fri stofbølge

$$\omega(k) = \hbar k^2 / (2m)$$

ønskes vist, at bølgepakkens form kun kan betragtes som uændret i en tid, der er lille i forhold til

$$2ma^2 / \hbar^2$$

hvor a angiver størrelsesordenen af bølgepakkens udstrækning.

Find den kritiske tid i tilfældet, hvor:

a) $m = 10^{-3} \text{ kg}$ og $a = 10^{-4} \text{ m}$

b) $m = 10^{-30} \text{ kg}$ og $a = 10^{-15} \text{ m}$

4. KVANTEMEKANIKKENS AFRUNDING.

I starten var Schrödinger tilbøjelig til at give bølgefunktionen ψ en reel fysisk bølgebetydning, selvom det var meget lidt, han kunne sige om denne feltskalar. Sidst i Schrödingers 4. artikel om "Quantisierung ..." lod han $\psi\psi^*$ repræsentere en vægtfunktion i rummet og erstattede derved den eksakte punktbeskrivelse i klassisk mekanik. Elektronen kunne da i rummet beskrives ved en ladningsfordeling

$$\rho = e\psi\psi^*$$

Schrödingerligningen, der var baseret på en velfunderet matematisk analyse, åbnede vidtstrakte muligheder til løsning af mangfoldige kvantemekaniske problemer - men havde Schrödingers bølgefunktion nogen som helst fysisk realitet?

4.1 Borns sandsynlighedsfortolkning.

I 2 artikler med titlen "Quantenmechanik der Stossvorgänge" i Zeitschrift für Physik i juni og juli 1926 gav den tyske Göttinge-fysiker Max Born en holdbar fysisk fortolkning af bølgefunktionen ψ . Born så de Broglie- eller Schrödinger-bølgen som et ledende felt (ledebølge) for elektronen.

Feltet selv var årsagsbestemt, men størrelsen af feltet (bølgeamplituden) bestemte sandsynligheden for elektronovergang i atomets stationære tilstande, og specielt retningssandsynligheden for at finde elektronen i elektrondiffraktion.

Born fandt, at $\psi\psi^*dV$ var sandsynligheden for at finde elektronen i volumelementet dV . Born selv udtrykte i sin 2. artikel, at partikelbevægelsen retter sig efter

sandsynlighedens love, men sandsynligheden udbreder sig i overensstemmelse med lovene om kausale sammenhæng.

For Born var sandsynligheden, når den var relateret til bølgefunktionen, ikke blot en matematisk fiktion, men noget forbundet med fysisk realitet, fordi den udviklede sig i tiden og udbredte sig i rummet i overensstemmelse med Schrødingers ligning. Denne fysiske realitet adskilte sig derimod fra almindelig fysisk reelle størrelser i et fundamentalt aspekt: Sandsynlighed kan ikke overføre energi eller impuls. I klassisk fysik, både Newtons mekanik og Maxwells elektrodynamik, forbindes fysiske reelle størrelser kun med det, der kan overføre energi eller impuls. I Born's fortolkning af bølgefunktionen antog sandsynlighed da, hvad han kaldte en "intermedier realitet".

Dette gav ofte anledning til at anvende det mere dækkende begreb tilstandsfunktion i stedet for bølgefunktion, der umiddelbart forbindes med en fysisk realitet.

Vi kan nu udtrykke Born's fortolkning af bølgefunktionen

$$P(x,t)dV = \psi\psi^*dV$$

ved at sige, at sandsynligheden for at finde partiklen et eller andet sted i rummet må være 1, og der må derfor gælde

$$\int P(x,t)dV = \int |\psi|^2 dV = 1 \quad 4.1$$

Ser vi specielt på den stationære bølgefunktion

$$\psi(x,t) = A u(x) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t)$$

bemærker vi, som det måtte forventes, at sandsynligheden for stationære tilstande at finde partiklen i volumeelementet dV kun afhænger af den stationære amplitudefunktion $u(x)$ på nær en konstant A

$$|\Psi|^2 = A^2 |u(x)|^2$$

4.2

hvor A fastlægges under kravet om

$$\int P(x,t) dV = A^2 \int |u(x)|^2 dV = 1$$

Om denne sandsynlighedsfortolkning, der gav kvantemekanikken dens statistiske karakter, bemærkede Born i august 26: "Vi fralægger krafterne deres klassiske pligt at direkte determinere partikelbevægelsen, og tillægger dem istedet at determinere tilstandssandsynligheden". Derved måtte man i kvantemekanikken give afkald på den klassiske fysiks strenge determinisme.

4.2 Ubestemthedsrelationerne.

Indtil henimod slutningen af 1926 blev sandsynlighedsfortolkningen generaliseret, og der blev etableret en fuldstændig transformationsteori mellem især matrix- og bølgemeknikken. Denne forenede kvantemekanik blev til på baggrund af specielt Born, Jordan, Pauli og Dirac's indsats.

Fundamentet byggede på Schrødingers bølgebeskrivelse, men havde også et væsentligt indhold af elementer fra Heisenberg's operatoranvendelse. Heisenberg havde i sin matrixbeskrivelse anvendt sig af såkaldte kommutationsrelationer imellem operatorer, dvs. at der eksempelvis mellem en partikel position x og dens impuls $-i\hbar \frac{d}{dx}$ gjaldt følgende relation

$$\begin{aligned} [x\hat{p}_x - \hat{p}_x x]u(x) &= -i\hbar \left[x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right] u(x) \\ &= -i\hbar \left[x \frac{du}{dx} - x \frac{du}{dx} - u \right] \\ &= i\hbar u(x) \end{aligned}$$

hvilket også skrives

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar \quad , \quad \text{hvor} \quad [x, \hat{p}_x] = [x\hat{p}_x - \hat{p}_x x] \quad 4.3$$

Man kan tilsvarende nemt overbevise sig om, at der gælder den tilsvarende relation mellem den totale energi af en partikel til et bestemt tidspunkt

$$[\hat{E}, t] = i\hbar \quad 4.4.$$

I et brev til Pauli i oktober 26 skrev Heisenberg, at det på baggrund af kommutationsrelationerne var helt meningsløst at tale om partiklens position svarende til en bestemt hastighed - men at det ville være meningsfuldt, hvis man ikke tog position og hastighed så bogstaveligt.

Det var sandsynligvis på baggrund af dette, at Pauli henkastede: "Vi kan se verden med et p-øje eller med et q-øje, men hvis vi prøver at gøre begge dele, bliver vi skeløjet".

Omkring februar 27 var Heisenberg i stand til at afklare sit eget syn og i et langt brev til Pauli gav Heisenberg et groft indhold af, hvad han kaldte ubestemthedsrelationerne. "Dette markerer afslutningen på kvanteteorien", bemærkede Pauli.

I marts 27 publicerede Heisenberg derfor hans ideer i en artikel under titlen "Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik" i Zeitschrift für Physik, i hvilken han gav en analyse af de fundamentale begreber som position, hastighed, bane og energi af en partikel. Han fandt, at der imellem 2 ikke-kommuterende fysiske størrelser i kvantemekanikken var grundlag for en absolut mindste usikkerhed, givet ved ubestemthedsrelationerne

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad 4.5$$

og

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{2}$$

4.6

og Heisenberg udtrykte, at desto mere præcis positionen er bestemt, desto mindre præcis er impulsen kendt, og omvendt.

Vi har allerede i kapitlet om bølgepakker set konsekvensen af ubestemthedsrelationerne, da vi så, at en bølgepakkes udstrækning ikke kunne gøres mindre end det omvendt proportionale bølgetalsinterval

$$\Delta x \Delta k \geq 1$$

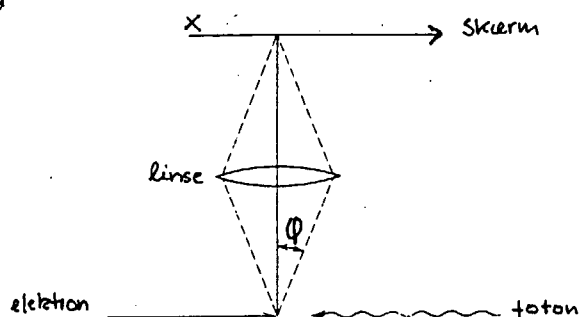
og vi kan heraf se, at ubestemthedsrelationerne må tillægges en konsekvens af kvantemekanikkens formalisme.

Hvis der havde været eksperimenter, der tillod en mere præcis bestemmelse af 2 såkaldte konjugerede størrelser så ville kvantemekanikken i sig selv være meningsløs. Det drejer sig altså ikke om en usikkerhed, der skyldes tekniske begrænsninger, men derimod en af naturen givet og uomgængelig begrænsning i vor viden om fysiske systemer.

4.2.1. Heisenberg's gammastrålemikroskop.

I et tankeeksperiment givet af Heisenberg og restitueret af Bohr, sender man en elektronstrøm med en veldefineret impuls p_x ind under et lysmikroskop i den positive x-aksens retning

fig. 4.1



Elektronerne belyses af en lampe, således at det spredte lys fra en elektron kan samles af linsen og danne et billede på skærmen. Ud fra billedets placering kan man nu umiddelbart bestemme elektronens x-koordinat til en vis tid.

Dette giver dog anledning til at billedet vil aftegne sig som en udtværet plet, som en følge af lysets bølgenatur, og en dermed ubestemthed i x-koordinaten på

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin 2\varphi}$$

hvor φ kaldes mikroskopets halve aperturvinkel, og λ er bølgelængden af det anvendte lys.

Det fremgår, at Δx kan gøres vilkårligt lille ved at gøre λ tilpas lille og tilsvarende $\sin 2\varphi$ større. Dette kan, som vi nu skal se, kun ske på bekostning af en tilsvarende større ubestemthed i elektronens impuls i x-aksens retning.

Til bestemmelse af x-koordinaten må anvendes mindst 1 foton, som spredes af elektronen og kastes ind i mikroskopet. Fotonen, som har en impuls $p_f = \frac{h}{\lambda}$ overfører noget af sin impuls til elektronen, og dette kan beregnes ved impulsbevarelse. Efter denne kollision er imidlertid fotonimpulsens x-komponent ubestemt ved

$$\Delta p_f = \frac{h}{\lambda} 2 \sin \varphi$$

da fotonen blot vides at have forladt elektronen i en eller retning indenfor aperturvinklen.

Derfor må elektronen tillægges en tilsvarende ubestemthed i den efter kollisionen beregnede impuls

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda} 2 \sin \varphi$$

For små værdier af φ er $2 \sin \varphi = \sin 2\varphi$, og dette betyder sammenlagt en ubestemthed i elektronens position og impuls på

$$\Delta x \Delta p_x = h$$

i overensstemmelse med ubestemthedsrelationerne.

Man kan nemt overbevise sig om, at man ville få tilsvarende resultat, hvis man istedet for lys anvendte materielle partikler til registrering, f.eks. et elektronmikroskop, da elektroner er, som vi tidligere har set, beskrevet ved de Broglie-bølgelængden $\lambda = \frac{h}{p}$

4.2.2. Dobbeltspalteeksperimentet.

For nærmere at kunne bestemme om elektronen i dobbeltspalteeksperimentet (se side) passerer den ene eller den anden spalte, må vi maksimalt tillade en ubestemthed i x ved spaltesystemet på $\Delta x < \frac{a}{2}$, hvor a er afstanden mellem spalterne.

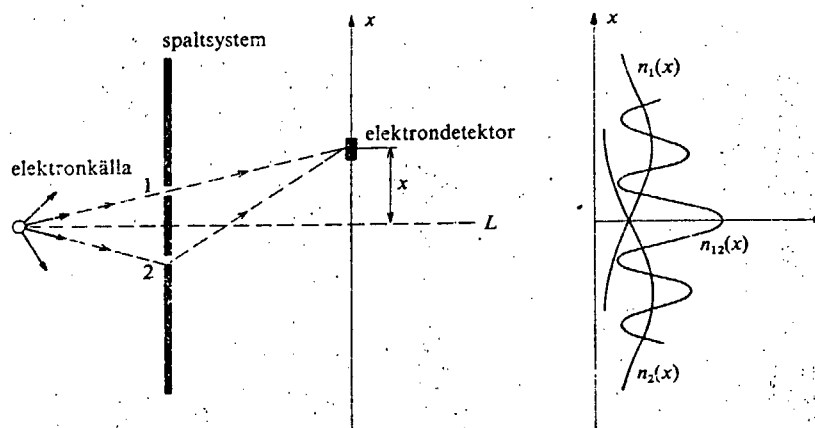


Fig. 4.2

Betingelsen for konstruktiv interferens er $\sin \theta = n \frac{\lambda}{a}$, hvor λ er elektronens de Broglie-bølgelængde, og det vil sige at 2 på hinanden følgende intensitetsmaksimum på skærmen kan udtrykkes ved

$$d \sin \theta_{n+1} - d \sin \theta_n = d \frac{\lambda}{a}$$

Ubestemtheden i x fører ifølge ubestemthedsrelationen $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ til en ubestemthed i p_x givet ved

$$\Delta p_x > \frac{\hbar}{a}$$

hvorfor man finder

$$\frac{\Delta p_x}{p} > \frac{1}{2\pi a} \frac{h}{p} = \frac{\lambda}{2\pi a}$$

En sådan ubestemthed fører til en ubestemthed i x ved skærmen for elektronen af størrelsesordenen

$$\Delta x > \frac{\lambda d}{\pi a}$$

hvilket imidlertid er større end afstanden mellem intensitetsmaksimaerne, og dette forklarer hvorfor interferenseffekten udebliver, når vi samtidig med positionsmåling ønsker at måle elektronens impuls.

4.2.3. Brintatomet.

Vi skal nu se ved anvendelse af ubestemthedsrelationerne at det er meningsløst at tale om elektronens bane i et atom.

I Bohrmodellen er elektronens radius og impuls for brintatomet givet ved

$$r_n = \frac{(n\hbar)^2}{e^2 m_e} \quad \text{og} \quad p_n = \frac{e^2 m_e}{n\hbar}$$

Ser vi specielt på brintatomet i grundtilstanden, må vi, for at tale om en elektronbane, forlange at ubestemtheden i impulskomponenterne er små i forhold til elektronens impuls, dvs

$$\Delta p_x \ll p = \frac{e^2 m_e}{\hbar}$$

Vi antager nu, at elektronens positionbestemmelse er behæftet med en mindste ubestemthed af størrelsesordenen bandediameteren

$$\Delta x \geq 2a_0 = \frac{2\hbar^2}{e^2 m_e}$$

så giver en anvendelse af ubestemthedsrelationen

$$\Delta p_x \geq \frac{e^2 m_e}{\hbar}$$

hvilket vil sige at ubestemtheden i impulsen er mindst lige så stor som elektronens egen impuls, og dermed er det meningsløst at tale om en elektronbane.

4.3. Middelværdi og spredning.

På baggrund af sandsynlighedsfortolkningen og ubestemthedsrelationerne har vi set, at begreber som position, impuls, energi og bane ikke kan opretholdes i klassisk forstand.

Det vil derimod være nødvendigt at tale om middelværdier af disse størrelser, og vi vil nu uden yderligere forklaring definere middelværdier af partiklers position, impuls og totale energi ved operatoranvendelse

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dV \quad 4.7$$

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^* \hat{p}_x \psi dV = -i\hbar \int \psi^* \frac{d}{dx} \psi dV \quad 4.8$$

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dV = i\hbar \int \psi^* \frac{d}{dt} \psi dV \quad 4.9$$

og generelt for middelværdien af en vilkårlig størrelse gælder der

$$\langle q \rangle = \int \psi^* \hat{q} \psi dV \quad 4.10$$

Specielt for partikler i stationære tilstande kan middelværdierne i 1 dimension udtrykkes

$$\langle q \rangle = \int u^*(x) \hat{q} u(x) dV$$

Vi kan nu definere spredningen af en fysisk størrelse, og dermed dens ubestemthed

$$\Delta q = \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2} \quad 4.11$$

hvilket vil sige, at ønsker man eksempelvis at bestemme impulsspredningen på en given bølgefunktion, så må man finde middelværdierne på p_x og p_x^2 ved at de tilsvarende operatører virke på bølgefunktionen i det absolutkvadrerede integrale

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \int \psi^* \frac{d}{dx} \psi dV$$

og

$$\langle p_x^2 \rangle = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{d^2}{dx^2} \psi dV$$

4.3.1. En fri partikels impulsspredning.

Vælger vi nu en bølgepakke, der skal repræsentere en fri partikel til et fast tidspunkt, kan vi passende benytte en, der er på næsten tilsvarende form, som vi så i kapitel 3.3 (jfr. 3.6)

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp(ikx)$$

hvor a relaterer til bølgepakkens udstrækning.

Vi vil nu være interesseret i at finde middelværdien af impulsen p_x og middelværdien på kvadratet på impulsen p_x^2 , for derved at finde impulsspredningen

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$

Først finder vi $\langle p_x \rangle$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (\exp(-ikx) \frac{\sin(\frac{x}{a})}{x} \frac{d}{dx} (\exp(ikx) \frac{\sin(\frac{x}{a})}{x})) dx$$

$$= \hbar k \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\frac{x}{a})}{x^2} dx - i\hbar \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\frac{x}{a})\cos(\frac{x}{a})}{x^2} dx + i\hbar \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\frac{x}{a})}{x^3} dx$$

Man kan finde, at de 2 sidste led er identisk 0, hvorfor vi tilbage får

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \hbar k \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\frac{x}{a})}{x^2} dx \\ &= \hbar k \frac{a}{\pi} 2 \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(\frac{x}{a})}{x^2} dx \end{aligned}$$

hvor integralet opslag kan findes at være $\frac{\pi}{2a}$, og resultatet bliver derfor

$$\langle p_x \rangle = \hbar k \quad 4.12$$

hvilket netop er i overensstemmelse med hvad vi skulle forvente for en fri partikel.

Herefter skal vi finde $\langle p_x^2 \rangle$

$$\langle p_x^2 \rangle = -\hbar^2 \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx) \frac{\sin(\frac{x}{a})}{x} \frac{d^2}{dx^2} \left(\exp(ikx) \frac{\sin(\frac{x}{a})}{x} \right) dx$$

Dette fører ud i nogle længere udregninger, og vi skal her blot angive resultatet, der en første-ordens approximation

$$\langle p_x^2 \rangle = \hbar^2 \left(k^2 + \frac{1}{a^2} \right) \quad 4.13$$

vi kan nu finde impulsspredningen Δp_x

$$\begin{aligned} \Delta p_x &= \sqrt{\hbar^2 \left(k^2 + \frac{1}{a^2} \right) - \hbar^2 k^2} \\ &= \frac{\hbar}{a} \quad 4.14 \end{aligned}$$

Anvender vi nu ubestemthedsrelationen $\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$

$$\Delta x \left(\frac{\hbar}{a} \right) = \frac{\hbar}{2}$$

identificerer vi $2a$ som bølgepakken udstrækning Δx .

Vi har hermed endnu engang sandsynliggjort, at ubestemt-hedsrelationerne er en konsekvens af den kvantemekaniske bølgebeskrivelse.

4.4. Ehrenfest's sætning.

Vi vil nu udnytte egenskaberne ved operatorerne til at føre frem til en korrespondens mellem kvanteformalismen og den klassiske mekanik.

Vi starter med at finde den tidsafledede af en vilkårlig operator, udtrykt ved dens kommutation med Hamiltonoperatoren

$$\frac{d}{dt} \langle q \rangle = \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{q} \psi dV = \int \left(\left(\frac{d}{dt} \psi \right)^* \hat{q} \psi + \psi^* \hat{q} \left(\frac{d}{dt} \psi \right) \right) dV$$

og anvendes at $\hat{H}\psi = i\hbar \frac{d}{dt} \psi$ og $(\hat{H}\psi)^* = -i\hbar \frac{d}{dt} \psi^*$

$$\frac{d}{dt} \langle q \rangle = \frac{-1}{i\hbar} \int \left((\hat{H}\psi)^* \hat{q} \psi - \psi^* \hat{q} (\hat{H}\psi) \right) dV$$

Vi udnytter nu en særlig egenskab ved Hamiltonoperatoren som vi her vil postulere

$$\int \psi^* (\hat{H}\psi) dV = \int (\hat{H}\psi)^* \psi dV$$

Dette betyder, at vi kan skrive

$$\frac{d}{dt} \langle q \rangle = \frac{-1}{i\hbar} \int \left(\psi^* \hat{H} \hat{q} \psi - \psi^* \hat{q} \hat{H} \psi \right) dV$$

hvilket vi også kan udtrykke

$$\frac{d}{dt} \langle q \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* (\hat{q} \hat{H} - \hat{H} \hat{q}) \psi dV \quad 4.15$$

Størrelsen $(\hat{q} \hat{H} - \hat{H} \hat{q})$ er netop kommutatoren af \hat{q} og \hat{H} , og vi kan bekvemt skrive dette

$$[\hat{q}, \hat{H}] = [\hat{q}\hat{H} - \hat{H}\hat{q}]$$

Vi ser derfor, at der eksempelvis for middelværdien af x gælder

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle x\hat{H} - \hat{H}x \rangle \quad 4.16$$

Skriver vi $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \Phi(x)$, ser vi, at for kommutatoren $(x\hat{H} - \hat{H}x)$ giver den potentielle energi intet bidrag, idet $x\Phi(x) - \Phi(x)x = 0$, og vi finder

$$\begin{aligned} [x\hat{H} - \hat{H}x]\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[x \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dx^2} x \right] \psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[x \frac{d^2\psi}{dx^2} - 2 \frac{d\psi}{dx} - x \frac{d^2\psi}{dx^2} \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{d}{dx} \psi \end{aligned}$$

Anvender vi nu, at $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ samt resultatet 4.16 finder vi

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle \quad 4.17$$

Fortsetter vi og finder den anden tidsafledede af x , giver dette

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}\langle x \rangle &= \frac{1}{m} \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar m} [\hat{p}_x, \hat{H}] \quad 4.18 \end{aligned}$$

Da $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ er ombyttelig med $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ i Hamiltonoperatoren, fås

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x \hat{H} - \hat{H} \hat{p}_x] \psi &= -i\hbar \left[\frac{d}{dx} \Phi(x) - \Phi(x) \frac{d}{dx} \right] \psi \\ &= -i\hbar \left[\frac{d}{dx} \Phi(x) \right] \psi \end{aligned}$$

som ved indsættelse i 4.18 giver

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \left\langle - \frac{d\Phi(x)}{dx} \right\rangle = \frac{1}{m} \langle F(x) \rangle \quad 4.19$$

hvor $F(x)$ er den på partiklen ydre kraft, som potentialet $\Phi(x)$ giver anledning til.

Vi ser af 4.17 og 4.19 det meget vigtige resultat, at den kvantemekaniske beskrivelse tillader en præcis formulering af korrespondensen mellem kvantemekanikken og den klassiske mekaniks bevægelsesligninger

$$p_x = m \frac{dx}{dt}$$

og

$$F_x = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

Disse resultater blev udledt i september 1927 af den tyske fysiker P. Ehrenfest, og de tilgodeså dermed Bohr's krav om korrespondens til den klassiske mekaniks resultater.

4.5. 30 års revolution.

Med Einstein's ord "det involverer mere end en analogi" var der nu skabt en bemærkelsesværdig teori, der, trods dens gæld til superpositionsprincippet i den klassiske teori, var bygget på et fundamentalt forskelligt grundlag end den klassiske mekanik. Man forstod nu, hvorfor den gamle kvanteteori ikke kunne hamle op med problemerne.

Tilbage stod nu det stærke ønske om at forene kvantemekanikken med relativitetsteorien. Dette lykkedes for Dirac i januar 28, og det betød en smuk afrunding på 30 års revolution i fysikken.

Det var en relativistisk elektronteori, der som overraskende resultat automatisk indregnede elektronens spin, uden at der var ændret i den generelle fysiske bølgebeskrivelse. Det blev på den måde klart, at elektronens spin var en relativistisk effekt.

Umiddelbart forinden var det imidlertid også lykkedes Pauli at kunne gøre rede for elektronens spin i den u-relativistiske kvantemekanik, simpelthen ved at erstatte Schrødingers bølgefunktion med et sæt af 2 bølgefunktioner, hvis absolutkvadrat bestemte sandsynligheden for at finde elektronen med spin-op eller spin-ned.

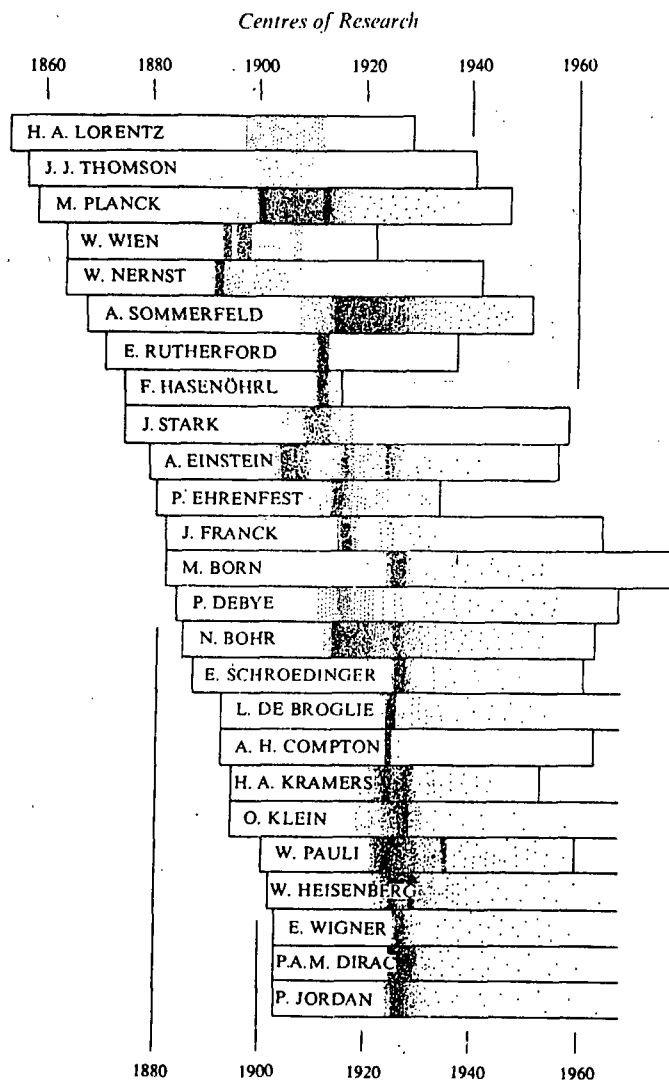


Fig. 4.3

4.6. Eksperimentel bekræftelse på stoffets bølge- natur.

Først i 1927 lykkedes det eksperimentelt at underbygge de Broglie's teori, at stoffet kunne tilskrives bølge- egenskaber i en dualistisk beskrivelse til stoffets par- tikelnatur.

Dette skete ved en række diffractionseksperimenter ud- ført dels i USA og dels i England, og hermed blev grund- laget for kvantemekanikkens partikel-bølgebeskrivelse fastslået som værende fysisk reelt.

4.6.1. Davisson & Germer's diffractionseksperimenter.

I USA havde C.J.Davisson fra 1919 arbejdet med spred- ning af elektroner fra metaller, og i hans første arti- kel fra 1921 om dette, erklærede han, at elektronspred- ning fra nikkell syntes som om nogle af de indkomne e- lektroner løsrev en eller flere elektroner i nikkellato- mets ydre skalstruktur (sekundær elektronemission) for herefter at reflekteres i simple, diskontinuerte baner med et betydeligt tab i energi.

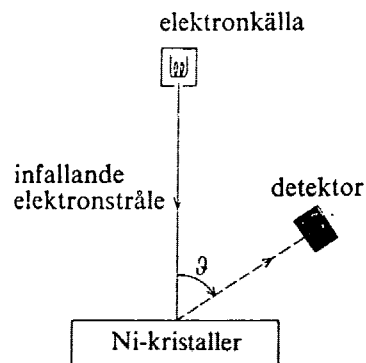


Fig. 4.4.

Davissons och Germers försöks-
uppställning.

Allerede på dette tidspunkt var den tyske eksperimentalfysiker Franck inde på, at de diskontinuerte baner kunne fortolkes som svarende til diffraktionsfænomener, og dette førte i Europa til en række eksperimenter med elektronspredning, der kunne sandsynliggøre de Broglie's ideer. Men dette synspunkt delte Davisson ikke.

Hvad der fik Davisson til at ændre sig og påbegynde en række betydningsfulde forsøg, skyldes et særligt uheld i hans laboratorie i april 25.

Dette skete ved, at der under et eksperiment med elektronspredning slap luft ind i kollisionskammeret, der ellers var under vacuum.

Til forsøgene var anvendt almindeligt nikkel, der er polykrystallinsk, og ved uheldet blev nikkelkrystallet oxideret. Krystallen blev derfor slebet, men først efter en længere opvarmning ved høj temperatur.

Uden at være det bekendt, var det polykrystallinske nikkel derfor omkrystalliseret til enkrystaller, så da Davisson og hans medarbejder Germer fortsatte deres forsøg med krystallen, viste det sig, som en følge af omkrystallisationen, at fordelingen i elektronspredningen var fuldstændig ændret.

Resultatet betød, at den diskontinuerte spredningsreflektion nu kunne forklares ved Bragg's diffraktionsformel

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad 4.20$$

idet Davisson og Germer bl.a. fandt, at med en elektronenergi på 54eV var der udpreget intensitetsmaksimum i elektronreflektionen ved en Bragg-vinkel på $\theta = 50^\circ$, og dette maksimum forsvandt, når elektronernes accelerationsspænding blev ændret betydeligt. Da gitterkonstan-

ten i nikkeldkrystallen er $d = 2,15 \text{ \AA}$ fandt man ved ind-sættelse i Bragg-betingelsen 4.20, at $n = 2$ og $\lambda = 1,65 \text{ \AA}$ hvilket næsten perfekt stemte overens med de Broglie-bølgelængden

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}}$$

$$= 1,67 \text{ \AA}$$

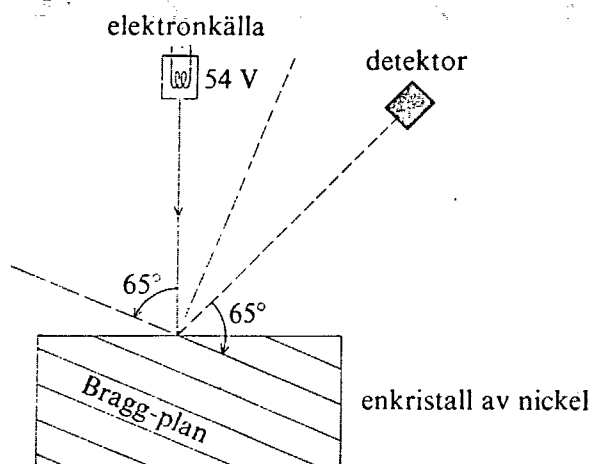


Fig. 4.5

Davisson beregnede nu de andre vinkler, hvor man skulle forvente intensitetsmaksimum, men eksperimenterne viste et skuffende resultat.

Først i januar 27, næsten 2 år senere, lykkedes det Davisson at fuldende en overensstemmelse mellem teori og eksperiment.

4.6.2. Thomson's katodestråle-eksperiment.

Det var bemærkelsesværdigt, at der på samme tidspunkt i England blev udført en række tilsvarende eksperimenter af G.P.Thomson.

Thomson anvendte katodestråler til at beskyde en tynd celloloidfilm, og ved transmission gennem filmen, fandt han et tilsvarende diffraktionsmønster på en fotografisk plade, som kunne forklare Bragg-betingelsen.

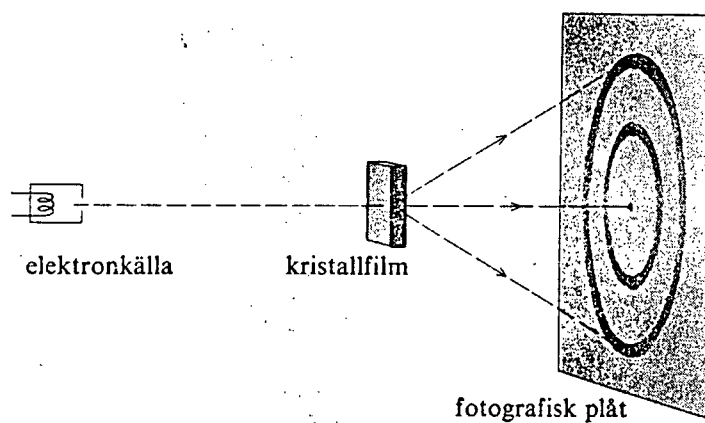


Fig. 4.6

Det kan her synes paradoksalt, at G.P.Thomson sammen med Davisson fik Nobelprisen for at have vist, at elektronen var en bølge, mens hans far, J.J.Thomson, knap 40 år tidligere havde fået Nobelprisen for at opdage, at elektronen var en partikel.

Men dette er præcist de Broglie-bølgens fysiske natur, der havde demonstreret stoffets partikel-bølge dualitet.

Opgaver til kapitel 4.

- Kvantemekanikkens afrunding.

1. Anvend ubestemthedsrelationen til at finde Δv_x for:

a) En elektron med massen $9,1 \cdot 10^{-31}$ kg og en ubestemt-
hed i positionen på $\Delta x = 2a_0$, hvor a_0 er bohrradien.

b) En partikel med massen 10^{-3} kg og en ubestemthed i
positionen på $\Delta x = 10^{-5}$ m.

2. Vis, at kommutationsrelationen

$$[\hat{E}, t] = i\hbar$$

gælder.

3. Find sandsynlighedsfordelingen $P(x, t)$ for en bølge-
pakke på formen

$$\psi(x, t) = \sqrt{a/\pi} \exp(ikx) (\sin(x/a))/x$$

4. En bølgefunktion er givet ved

$$\psi(x) = (\pi/a)^{-1/4} \exp(-ax^2/2)$$

Beregn Δx og Δp_x , og find om dette resultat er i
overensstemmelse med ubestemthedsrelationerne.

5 ANVENDT KVANTEMEKANIK.

Dirac's elektronteori gav grundlaget for den senere elementarpartikelfysik, men kvantemekanikken selv fandt anvendelse i en lang række fysiske discipliner, bl.a. molekylærfysik, faststoffysik, væsker og gasser, statistisk mekanik og ikke mindst atom og kernefysik. Kvantemekanikken viste en overraskende generalitet af dens metoder og resultater. Faktisk har ingen fysiks teori givet nøglen til forklaringer og beregninger af så forskelligartede fænomener, og alligevel nået så perfekt overensstemmelse med erfaringen, som kvantemekanikken har.

Vi vil i de følgende 2 kap. se på et par grundliggende anvendelser af kvantemekanikken på partikler i stationære tilstande. Det første eksempel har til formål at demonstrere nogle væsentlige kvantemekaniske effekter samt ikke mindst at give en indføring i den kvantemekaniske metode. Det andet eksempel er, som tidligere nævnt, en kvantemekanisk behandling af brintatomet, for derved at demonstrere en anvendelse på et reelt fysisk system.

En undersøgelse af en partikels stationære tilstand i et givet potential $\Phi(x)$ må baseres på en løsning af egenværdiligningen.

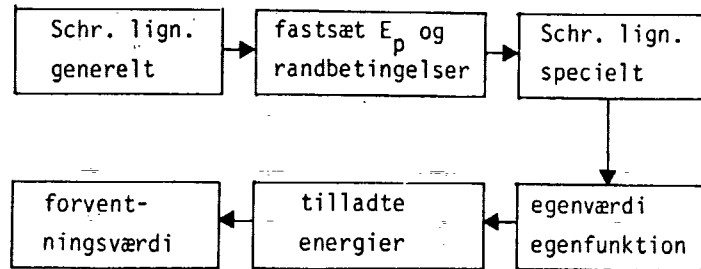
$$\hat{H}u(x) = E u(x)$$

hvor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \Phi(x)$$

Undersøgelsen gennemføres ved, at man fastlægger potentialet $\Phi(x)$ for det system, som man ønsker at beskrive, og på baggrund af dette fastlægges de såkaldte randbetingelser, der gælder for bølgefunktionen i potentialgrænserne. Herefter kan energispektret bestemmes gennem en anvendelse af Schrødingers ligning.

Fig. 5.1

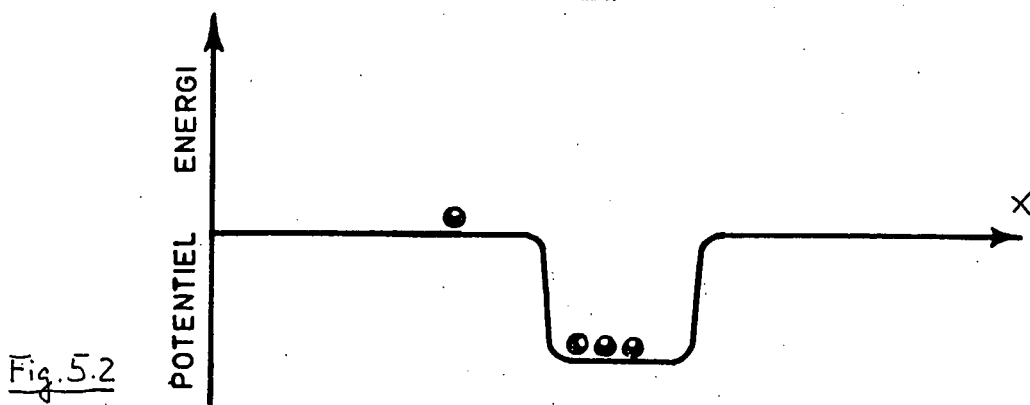


Det skal dog bemærkes, at det kun er et fåtal og ret simple potentialer, der lader sig direkte behandle numerisk. Ofte er man nødt til at gribe til selv grove approximationer for at kunne tilvejebringe løsninger til Schrödingerligningen. Men så må det også tilføjes, at mange approximationer alligevel giver ualmindelig tilfredsstillende resultater.

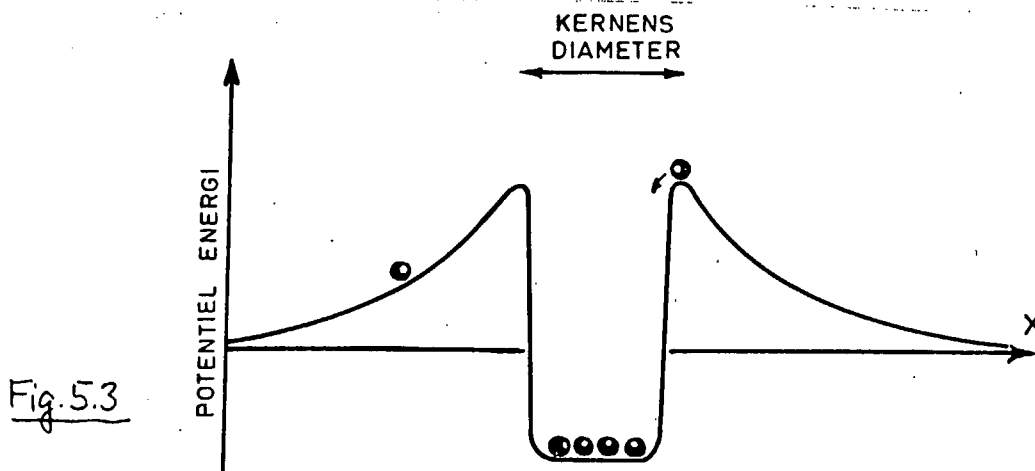
5.1 Partikel i en potentialbrønd.

I det følgende vil vi anvende Schrødingeligningen på et særligt simpelt potentiale, der eksempelvis kan relateres til en grov beskrivelse af nukleonerne i atomkernen.

Groft taget kan vi forestille os neutroner og protoner bundet af kernen i et begrænset system, hvor de stærke kernekrafter forhindrer nucleonerne i at undslippe kernen. Dette kan vi anskueliggøre i de følgende 2 figurer for henholdsvis neutronen og protonen :



En potentialbrønd for neutroner i en kerne.

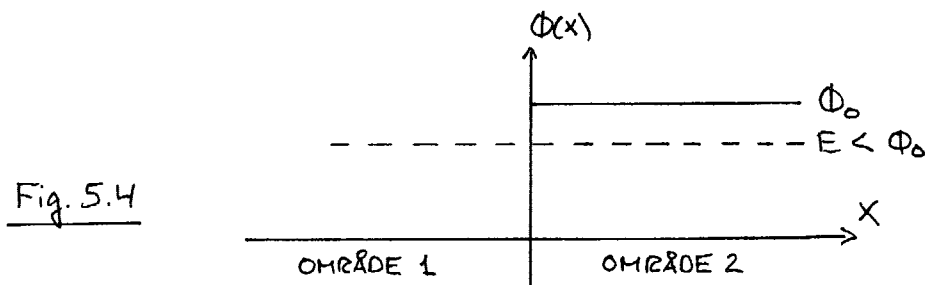


En potentialbrønd for protoner i en kerne (sml. fig. 5.2)

Klassisk vil vi forestille os, at partiklen, hvis den besidder en total energi, der er mindre end potentialspringet i brønden, vil være bundet til brønden. Har partiklen derimod større total energi end potentialspringet, så vil den kunne bevæge sig frit under hensyn til tiltrækning og frastødning fra potentialet. Vi vil her interessere os for de bundne tilstande, og det vil sige tilstande, hvor partiklens totale energi er mindre end dens potentielle energi.

5.1.1 Potentialspring.

Vi vil i første omgang analysere grænsebetingelserne for en bølgefunktion $u(x)$ i et potentialspring :



Men forinden må vi gøre os klart, at potentialet er stykvis kontinuert, og vi må derfor finde løsninger i hvert af de 2 områder hvor $u(x)$ er konstant, og derefter sammensætte dem således, at Schrødingergligningen er tilfredsstillet i hele rummet. Dette kan kun være opfyldt, hvis både $u(x)$ og $u'(x)$ er kontinuert i grænseovergangen (potentialspringet) mellem de 2 områder.

For det i fig. 5.4 viste potentialspring gælder :

$$x < 0 : \quad \Phi(x) = 0$$

$$x > 0 : \quad \Phi(x) = \Phi_0$$

og med den tidsuafhængige Schrødingergligning på formen :

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - \Phi(x)) u = 0$$

kan vi formulere en differentiaalligning gældende i hvert af områderne :

$$x < 0: u''(x) + k^2 u(x) = 0, \text{ hvor } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$x > 0: u''(x) - \beta^2 u(x) = 0, \text{ hvor } \beta = \sqrt{\frac{2m(\Phi_0 - E)}{\hbar^2}}$$

I tilfældet hvor $E < \Phi_0$ bliver løsningerne til disse 2 differentiaalligninger på formen :

$$x < 0: u_{\text{I}}(x) = A_{\text{I}} \sin(kx + \delta), \text{ hvor } \delta \text{ er fasekonst.}$$

$$x > 0: u_{\text{II}}(x) = A_{\text{II}} \exp(\pm \beta x)$$

Da $E < \Phi_0$ kan vi nemt overbevise os om, at det kun vil give en fysisk mening, såfremt bølgefunktionen er endelig for $x \rightarrow \infty$, så derfor må vi bortkaste den voksende eksponentialfunktion $\exp(+\beta x)$, og løsningen i område II bliver da :

$$x > 0: u_{\text{II}}(x) = A_{\text{II}} \exp(-\beta x)$$

Det kræves herefter jfr. den første kontinuitetsbetingelse, at :

$$x = 0: u_{\text{I}}(0) = u_{\text{II}}(0)$$

$$\text{dvs. : } A_{\text{I}} \sin \delta = A_{\text{II}}$$

og en anvendelse af den anden kontinuitetsbetingelse giver :

$$u'_{\text{I}}(x) = A_{\text{I}} k \cos(kx + \delta)$$

$$u'_{\text{II}}(x) = -A_{\text{II}} \beta \exp(-\beta x)$$

$$x = 0: u'_{\text{I}}(0) = u'_{\text{II}}(0)$$

$$\text{dvs. : } A_{\text{I}} k \cos \delta = -\beta A_{\text{II}}$$

Vi finder, at kvotienten af de 2 kontinuitetsbetingelser bliver :

$$\frac{1}{k} \frac{\sin \delta}{\cos \delta} = -\beta$$

$$\Downarrow$$

$$\operatorname{tg} \delta = -\frac{\beta}{k} \quad 5.1$$

og tilsvarende finder vi ved kvadrering og summation af de 2 kontinuitetsbetingelser :

$$\sin^2 \delta = \left(\frac{A_{II}}{A_I}\right)^2 \quad \text{og} \quad \cos^2 \delta = \left(-\frac{\beta}{k} \frac{A_{II}}{A_I}\right)^2$$

$$\Downarrow$$

$$1 = \left(\frac{A_{II}}{A_I}\right)^2 + \left(-\frac{\beta}{k} \frac{A_{II}}{A_I}\right)^2$$

$$\Downarrow$$

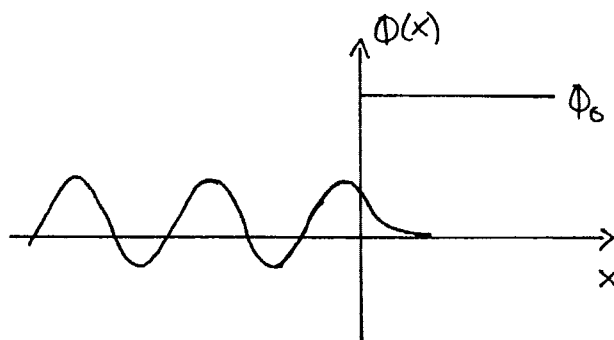
$$1 = \left(1 + \frac{\beta^2}{k^2}\right) \frac{A_{II}^2}{A_I^2}$$

$$\Downarrow$$

$$A_I = \sqrt{1 + \frac{\beta^2}{k^2}} A_{II} \quad 5.2$$

Vi kan anskueliggøre sammensætningen af bølgefunktionerne i de 2 områder med en i område I svingende sinusbølge, der i område II aftager eksponentielt :

Fig. 5.5



Og vi ser heraf en af de almindeligste kvantemekaniske effekter, nemlig at der, trods $E < \Phi_0$, eksisterer en endelig sandsynlighed for at partiklen befinder sig i det klassisk forbudte område, hvilket er inde i potentialbarieren. Dette resultat, der er en direkte følge af bølgebeskrivelsen, skal vi senere se andre eksempler på.

5.1.2 Potentialbrønd med uendelig høje vægge.

Vender vi tilbage til kernemodellen, fandt vi, at kun når partiklen var tilført så megen energi, $E > \Phi_0$, vil vi klassisk tillade partiklen at undslippe kernen. Men da dette kræver relativt store energier, vil vi gøre den yderligere approximation, at tilføre modellen uendelige høje potentialvægge.

Dette svarer i potentialspringet til, at vi i 5.1 lader $\frac{p}{\hbar} \rightarrow \infty$. Det betyder, at $\delta = 0$ og dermed at $A_{II} = 0$. Vi ser endvidere af 5.2 at $A_{II} = 0$ for en vilkårlig A_I , hvorfor bølgefunktionen helt må forsvinde i områderne II ved en uendelig høj potentialvæg - og vi mister derfor den effekt, vi lige har set i fig. 5.5.

For en sådan potentialbrønd med uendelig høje vægge og med bredden a , gælder da:

$$\Phi(x) = 0 \quad \text{for } x \in]-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}[$$

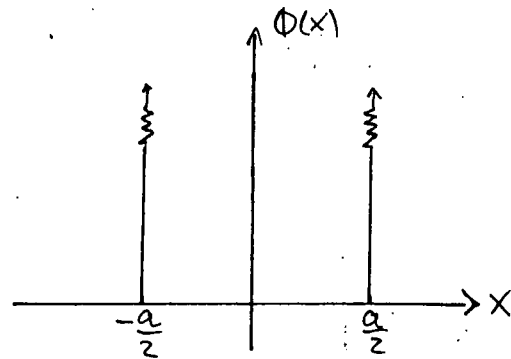


Fig. 5.6

og bølgefunktionen er da kun defineret i dette interval.

Løsningerne til differentiaalligningen:

$$u''(x) + k^2 u(x) = 0, \quad \text{hvor } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad 5.3$$

kan da vælges som en linearkombination af $\sin kx$ og $\cos kx$ hvorom det da må gælde :

$$u(x)=0 \quad \text{for } x = \pm \frac{a}{2}$$

Man ser herved, at differentialligningen kun giver acceptable løsninger, når $ka/2$ er et helt multiplum af $\pi/2$, dvs :

$$\begin{aligned} k_n \frac{a}{2} &= n \frac{\pi}{2}, \quad \text{hvor } n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\} \\ \uparrow \\ k_n &= n \frac{\pi}{a} \end{aligned} \quad 5.4$$

og bølgefunktionerne, der tilfredsstiller differential-
ligningen 5.3 bliver da :

$$u_n(x) = A_n \begin{cases} \cos k_n x & , \text{ for } n \text{ ulige} \\ \sin k_n x & , \text{ for } n \text{ lige} \end{cases}$$

Anvender vi 5.4 på $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, kan vi finde de tilhørende energier :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{8ma^2} n^2 \quad 5.5$$

hvilket repræsenterer et uendeligt sæt af diskrete energiniveauer. Dette siges at udgøre systemets energispektrum, og tallet n , der nummererer niveauerne og bølgefunktionerne, kaldes kvantetallet.

Det skal bemærkes, at $n=0$ er udeladt, da denne løsning $u(x)=0$ ikke giver nogen fysisk mening, og derfor er den laveste energitilstand, grundtilstanden, $E_1 > 0$. Denne vigtige observation, at bundne partikler antager diskrete energier, og at de ikke kan antage værdien $E=0$, er et væsentligt element i de kvantemekaniske resultater.

Vi ser her på fig. 5.7 energispektret for en potentialbrønd med uendelig høje potentialvægge. Endvidere er vist de tilsvarende bølgefunktioner samt kvadratet på bølgefunktionen, hvilket angiver sandsynligheden for at finde partiklen på det pågældende sted.

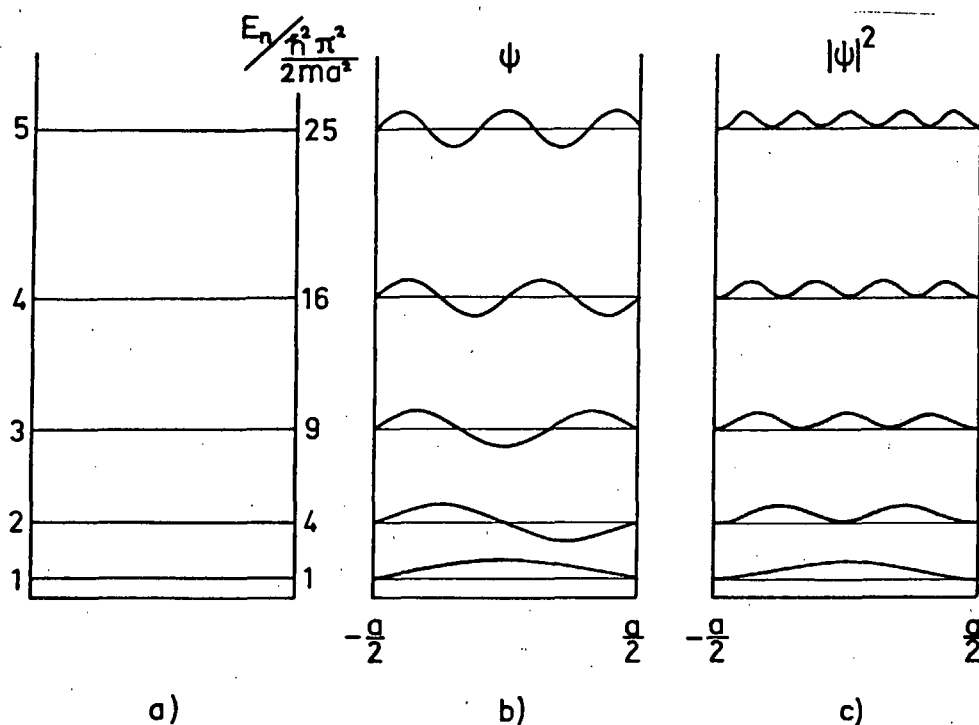


Fig. 5.7

- a) Energitilstande for en partikel i en potentialbrønd
 b) Tilsvarende bølgefunktioner
 c) Kvadratet på bølgefunktion, som angiver sandsynligheden for at finde partiklen på det pågældende sted.

Ved at finde energispektret for en kerne partikel, havde vi gjort den grove approximation at sætte potentialvæggene i brønden uendelig høje. Men noget besværligere regninger kan vise, at en potentialbrønd med endelig høje vægge vil give et energispektrum, der approximativt kan udtrykkes ved :

$$\begin{aligned} E_n &\approx \frac{h^2}{8ma^2} n^2, & \text{for } E_n \ll \Phi_0 \\ \text{og } E_n &\approx \frac{h^2}{8ma^2} (n-1)^2, & \text{for } \Phi_0 - E_n \ll \Phi_0 \end{aligned} \quad 5.6$$

mens energispektret for $E > \Phi_0$ er kontinuert.

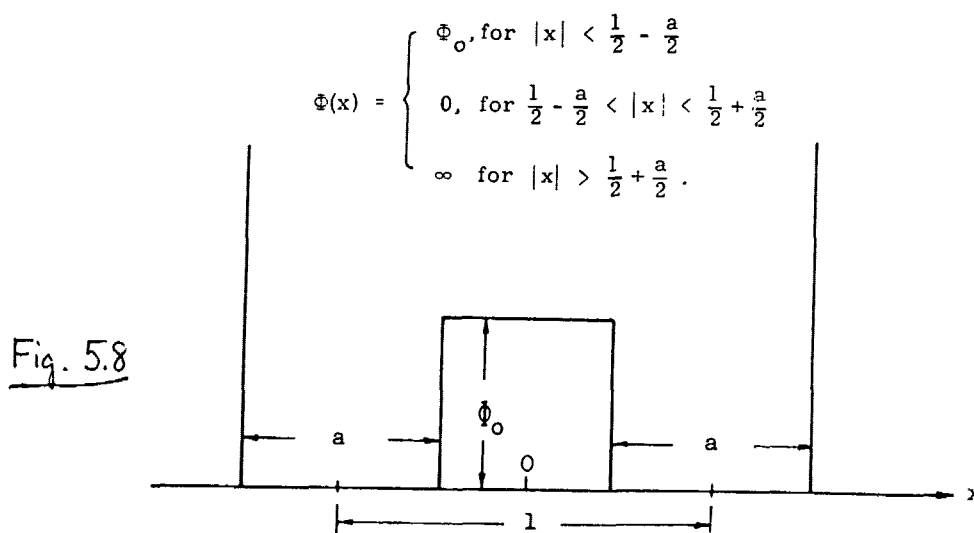
Samtidig opnås det interessante resultat, som allerede antydtes på fig. 5.5 ved potentialspringet, at bølgefunktionen ikke forsvinder eksakt ved potentialspringet, hvorfor der vil være en endelig sandsynlighed for at finde partiklen lidt udenfor det klassisk tilgængelige område.

5.1.3 Dobbeltbrønden.

Vi vil slutte dette kapitel af med at vise et par konkrete anvendelser, der bygger på den her nævnte potentialbrønd.

Vi har indtil nu beskrevet en meget grov model for en nucleon bundet i en kerne, men det kunne ligeså godt dække over beskrivelsen af en elektron, der var bundet i et frit atom.

Nu vil vi antage en model for en elektrons bevægelse i et diatomigt molekyle, og det er her nærliggende at beskrive dette ved en dobbeltbrønd.

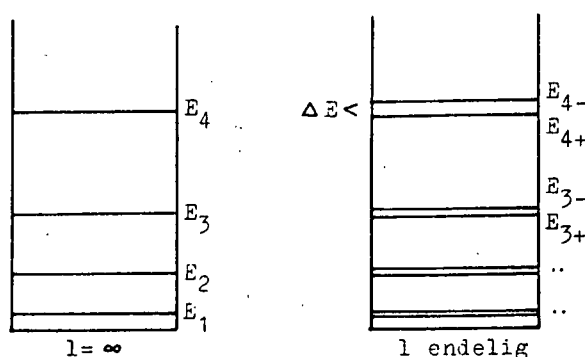


En af de kvantemekaniske effekter, man finder når $E < \Phi_0$, er den såkaldte tunneleffekt. Det er en følge af de 2 eksponentielt aftagende bølgefunktioner, der sammensættes i potentialbjerget imellem de 2 atomer, og derved dannes der en binding imellem de 2 atomer. Bindingen er den vi kender som den kovalente binding.

Man finder også, at for $l \rightarrow \infty$ vil elektronen ikke kunne trænge igennem potentialbjerget, og energispektret vil være ækvivalent med spektret for det frie atom - i overensstemmelse med, hvad man skulle forvente.

Samtidig viser det sig, at spektret er dobbelt udartet, dvs. at energien hørende til den enkelte brønd er spaltet ud i 2 tætliggende energier, som en følge af elektronens vekselvirkning imellem atomerne.

Fig. 5.9



Man kan finde, at energidifferensen i denne udartning er af størrelsesordenen :

$$\Delta E \approx 8 \frac{(\Phi_0 - E)E}{\Phi_0(l + \beta a)} \exp(-\beta(l - a)) \quad 5.7$$

hvor
$$\beta = \sqrt{\frac{2m(\Phi_0 - E)}{\hbar^2}}$$

og E er middelværdien i ΔE , dvs. eksakt svarende til energispektret i den enkelte brønd.

Man ser, at jo større l er, desto mindre er energidifferensen i udartningen, og når $l \rightarrow \infty$ så går

$\Delta E \rightarrow 0$ som ventet, svarende til at atomerne i molekylet fjernes fuldstændigt fra hinanden.

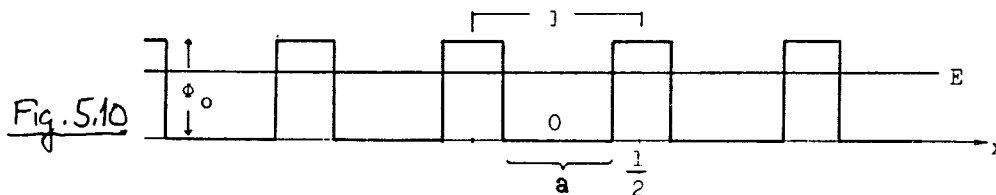
Elektronerne vil periodisk udveksles mellem atomerne, og udvekslingsfrekvensen er givet ved :

$$\nu = \frac{\Delta E}{h}$$

og man ser, at den er direkte mål for bindingsenergien mellem atomerne.

5.1.4 Kronig-Penney modellen.

Til sidst vil vi se på nogle effekter, der er karakteristiske for elektroner i et krystal, og vi vil derfor udvide brøndmodellen til at omfatte et uendeligt antal indbyrdes forbundne brønde.

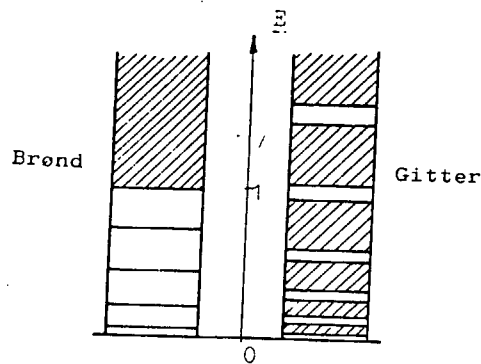


Dette er en model for atomerne i et uendeligt langt gitter, og den er blevet kaldt Kronig-Penney modellen efter 2 fysikere, der oprindeligt foreslog denne model.

Vi så i det foregående eksempel, at 2 indbyrdes forbundne brønde gav et dobbelt udartet energispektrum af tiliggende niveauer, og tilsvarende vil 3 indbyrdes forbundne brønde give et 3 gange udartet energispektrum ect.

Generaliserer vi dette resultat, vil et uendeligt antal indbyrdes forbundne brønde, give en kontinuert udartning, hvilket kaldes energibånd.

Fig. 5.11



Man bemærker, at energispektret for dette gitter består af bånd, hvori alle energier er tilladt, afvekslende med forbudte bånd. For $E < \Phi_0$ ligger de tilladte bånd ud for de diskrete niveauer i enkeltbrønden, og der gælder her tilsvarende, at med voksende afstand mellem brøndene i gitteret indsnævres energibåndene indtil de falder sammen med niveauerne i enkeltbrønden.

I området $E > \Phi_0$ ser vi den bemærkelsesværdige effekt, at der også her eksisterer forbudte bånd. Dette betyder bl.a. at elektromagnetisk stråling med energier i disse bånd vil total reflekteres af gitteret, trods det at strålingsenergiene er større end gitterpotentialt.

Det er denne effekt, der kommer til udtryk i f.eks. røntgendifraktionen, hvor den Braggs'ske betingelse skal være opfyldt:

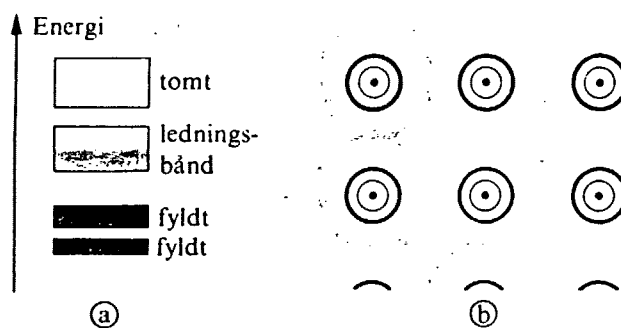
$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

I denne model ser man også det paradoksale resultat, at når $E < \Phi_0$ kan partikler i de tilladte energibånd, som følge af tunneleffekten, bevæge sig frit inde i krystallen. Dette forklarer metallernes ledningsevne.

Et gitter vil reelt have en endelig længde, bestående af eksempelvis N atomer, og dette betyder, at de tilladte energibånd ikke er kontinuert fordelt, men består derimod af N meget tætliggende energiniveauer. Ifølge Pauli-

princippet vil der være plads til $2N$ elektroner i hvert energibånd, og disse bånd vil fyldes op i overensstemmelse med Pauli-princippet og atomets elektronkonfiguration. I de fyldte energibånd vil elektronerne være bundet til atomerne, men evt. frie valenselektroner, der ikke fylder båndet op, vil kunne bevæge sig frit i krystallen. Hvis vi over krystallen påtrykker en spændingsforskel, vil elektronerne bevæge sig i en bestemt retning, og krystallen kan nu lede en strøm. Dette bånd kaldes derfor ledningsbåndet.

Fig. 5.12



Energibånd og elektronbaner i en Na-krystal. (a) Ledningsbåndet er ikke fyldt. (b) Ledningsbåndets elektroner bevæger sig rundt i krystallen. De øvrige elektroner er bundet til det enkelte atom.

Opgaver til kapitel 5.1.

- Partikel i en potentialbrønd.

1. a) En elektron bevæger sig i et molekyle med længden 10Å (ca. 5 atomers længde).

Hvad er dens minimumsenergi.

b) En neutron bevæger sig i en kerne med radius $1,7 \cdot 10^{-15}$ m (deuterium-kerne).

Hvad er dens minimumsenergi.

c) Hvor stor energi skal der tilføres for at excitere de i spørgsmål a) og b) partikler fra grundtilstanden til tilstanden $n = 2$.

d) I hvilket bølgelængdeområde ligger de fundne λ 'er i spørgsmål 3).

2. En elektron er indesluttet i et molekyle med længden 10Å. Hvad er sandsynligheden for at finde elektronen indenfor afstanden 4,9Å og 5,1Å i molekylet, når tilstanden har den laveste energi.

(Vink: Udregn $|\psi|^2$ for $x = 5,0\text{Å}$ og benyt, at $|\psi|^2 dx = |\psi|^2 \Delta x$).

3. Bølgefunktionen for en partikel i grundtilstanden i en potentialbrønd med uendelig høje vægge er givet ved

$$u(x) = \sqrt{2/a} \cos(x\pi/a)$$

hvor a er brøndens bredde.

Find Δx og Δp_x , samt ubestemthedsproduktet af disse.

5.2. Brintatomet.

Vi har i kapitel 2 behandlet Bohrs halvklassiske atommodel, og vi skal i det følgende give en elementær fremstilling af den modsvarende kvantemekaniske behandling.

I Bohrmodellen opfattes atomerne som sammensat af en positiv ladet atomkerne, omkring hvilken elektronerne kredser i planetbaner. Elektronerne fastholdes i deres baner af den elektromagnetiske kraft mellem kernen og elektronerne.

Denne elektromagnetiske vekselvirkning mellem kernen og elektronerne er karakteristisk ved dens relativt lange rækkevidde. Inde i atomkernen virker også de stærke kernekrafter, men deres rækkevidde er meget korte og påvirker derfor kun de nærmeste elektroner forsvindende lidt - og da kun inddirekte igennem kernens ladningsfordeling.

I den kvantemekaniske behandling af atomerne repræsenteres elektronerne af bølgefunktioner, med hvilke vi kan angive en sandsynlighedsfordeling som erstatning for Bohrs elektronbaner. Den elektromagnetiske vekselvirkning er kendt eftersom vi kun behøver at medregne de langtrækkende elektromagnetiske krafter.

Principielt frembyder atomernes struktur altså ingen problemer, og vi skal løse Schrödingerligningen med et kendt potentiale. I praksis kommer man imidlertid ind i svære matematiske problemer, og selvom man lader kernen repræsenteres af en punktladning, er det kun brintliggende atomer, dvs. enelektronatomer, der kan behandles eksakt. For atomer med flere end 1 elektron, kender man ingen eksakte metoder at løse Schrödingerligningen på, og man er derfor henvist til approximationsmetoder.

Dette gør brintlignende atomer til et undtagelsestilfælde, men at de alligevel spiller så stor en rolle, hænger sammen med, at de giver en vigtig forståelse af de mere komplicerede atomers struktur.

5.3. Schrödingerligningen for et coulombpotentiale.

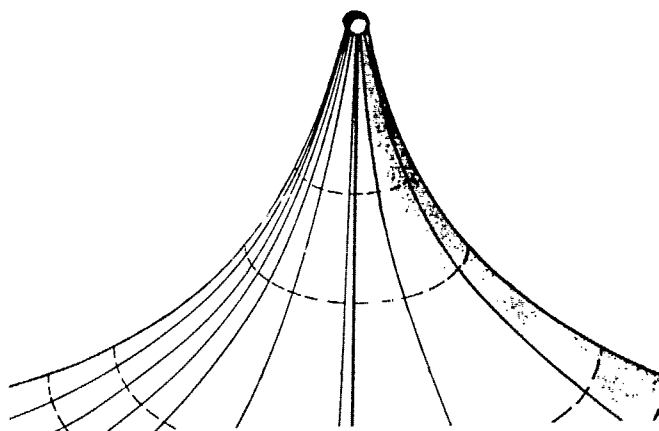
Vi vil nu se på den kvantemekaniske behandling af det simpleste atom - brintatomet - som er sammensat af 1 proton, der udgør atomkernen, og 1 elektron, der er bundet til kernen gennem den elektromagnetiske vekselvirkning.

Da protonens masse er ca. 1836 gange tungere end elektronen, kan vi uden betydelig afvigelse antage protonens masse uendelig tung og dermed fast i rummet. Dvs. at vi reducerer to-legemeproblemet til kun at omfatte en elektron i et elektromagnetisk potentialfelt.

Dette potentiale, som vi kender som coulombpotentialet, betyder at elektronen er påvirket af en kraft, der er omvendt proportional med kvadratet på afstanden til kernen, og derfor er givet ved en potentiel energi på

$$\Phi(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad \text{hvor } r = |\vec{r}| \quad 5.8$$

Fig. 5.13



Coulombpotentialet er, som det ses af ovenstående figur, et centralsymmetrisk felt, og det betyder at vi nu må

overgå til en behandling i 3 dimensioner, hvor det vil være bekvemt med en beskrivelse i polære koordinater. Vi går nu ud fra Hamiltonoperatoren i 1 dimension

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + \Phi(x)$$

og vi kan heraf nemt overbevise os om, at Hamiltonoperatoren, der er en energioperator og dermed en skalar størrelse, må i 3 dimensioner være på formen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \Phi(r) \quad 5.9$$

Differentialfaktoren i ligningen ovenover kaldes også for Laplace-operatoren, og den skrives ofte

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad 5.10$$

Vi skal nu søge en løsning til Schrödingerligningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \Phi(r) \right) u(\vec{r}) = E u(\vec{r}) \quad 5.11$$

men forinden vil vi transformere Laplaceoperatoren til polære koordinater.

Fra planen er den polære koordinattransformation velkendt

$$x = r \cos \varphi$$

$$y = r \sin \varphi$$

og modsat er

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$\tan \varphi = \frac{y}{x}$$

hvor

$$r \in [0; \infty[$$

$$\varphi \in [0; 2\pi]$$

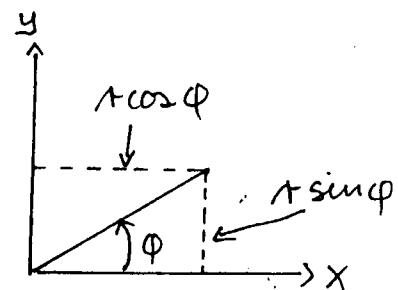


Fig. 5.14

Tilsvarende kan man se, at den polære koordinattransforma-
tion i rummet vil være givet ved

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

og modsat gælder der

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\cos \theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}$$

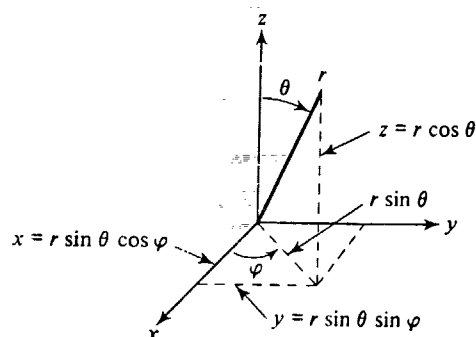


Fig. 5.15

hvor

$$r \in [0, \infty[$$

$$\theta \in [0, \pi]$$

$$\varphi \in [0, 2\pi]$$

Transformationen af Laplaceoperatoren fra cartesiske til
polære koordinater er en lang og triviell proces af
krydsdifferentiationer, der ender med 54 led. Ved reduk-
tion vil man dog få følgende relativt korte udtryk

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Det er her væsentligt at bemærke, at Laplaceoperatoren i
polære koordinater er separeret i et led, der kun afhæn-
ger af r , og et led, der på nær en faktor $\frac{1}{r^2}$, kun er
vinkelafhængig. Dette kan man udtrykke

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \hat{\Delta}(\theta, \varphi)$$

hvor omega-operatoren dækker over vinkelafhængigheden

$$\hat{S}^2(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad 5.12$$

Vi kan nu skrive Schrödingerligningen i polære koordinater

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \hat{S}^2(\theta, \varphi) \right) + \Phi(r) \right) u(r) = E u(r) \quad 5.13$$

5.3.1. Separation af bølgefunktionen.

Vi vil nu antage, at også bølgefunktionen er separabel i en radial- og en vinkeldel

$$u(r) = R(r) Y(\theta, \varphi)$$

og Schrödingerligningen 5.13 bliver derved på formen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \hat{S}^2 \right) + \Phi(r) \right) R(r) Y(\theta, \varphi) = E R(r) Y(\theta, \varphi)$$

Man bemærker, at \hat{S}^2 kun virker på $Y(\theta, \varphi)$ og tilsvarende for den radiale afhængighed.

Derved får man ved samtidig at dividere igennem med $R(r) Y(\theta, \varphi)$

$$-\frac{1}{R(r)} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (R(r)r)}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \hat{S}^2 Y(\theta, \varphi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \Phi(r) = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

Isolerer man nu vinkelafhængigheden

$$\frac{r}{R(r)} \frac{\partial^2 (R(r)r)}{\partial r^2} - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} (\Phi(r) - E) = -\frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \hat{S}^2 Y(\theta, \varphi)$$

ses det, at venstre side kun afhænger af r , samt højre side kun afhænger af θ og φ .

Ved f.eks. at holde r fast og variere θ og φ , ser man, at ligningen kun kan være opfyldt, hvis den er lig med en konstant λ .

Heraf kan separeres 2 ligninger, der henholdsvis er vinkelafhængig og radialafhængig.

$$\hat{\Omega} Y(\theta, \varphi) = -\lambda Y(\theta, \varphi) \quad 5.14$$

$$-\frac{\hbar^2}{2me} \left(\frac{1}{R(r)} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (R(r)r)}{\partial r^2} + \frac{\lambda}{r^2} \right) + \Phi(r) = E \quad 5.15$$

Disse 2 ligninger kaldes henholdsvis for vinkelligningen og radialligningen.

Man kan se, at vinkelligningen kan løses en gang for alle, når blot potentialet er et centralsymmetrisk felt. Derimod vil en løsning af radialligningen være afhængig af det specifikke potentiale, der for brintatomet er kendt som coulombpotentialet.

5.3.2. Vinkelligningen.

Man kan nu tilsvarende antage, at bølgefunktionens vinkeldel $Y(\theta, \varphi)$ kan separeres i en θ - og en φ -afhængig del

$$Y(\theta, \varphi) = f(\theta)g(\varphi)$$

Det vil sige man i vinkelligningen kan skrive

$$\left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) f(\theta)g(\varphi) = -\lambda f(\theta)g(\varphi)$$

og under hensyntagen til de respektive differentialoperatorer og funktioners afhængighed får man, ved samtidig at dividere igennem med $f(\theta)g(\varphi)$

$$\frac{1}{f(\theta)} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{1}{g(\varphi)} \frac{\partial^2 g(\varphi)}{\partial\varphi^2} = -\lambda$$

Hvis man igen isolerer de variable vinkler, finder man

$$\frac{\sin\theta}{f(\theta)} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta} \right) + \lambda \sin^2\theta = -\frac{1}{g(\varphi)} \frac{\partial^2 g(\varphi)}{\partial\varphi^2}$$

og med samme argumentation, der førte til radial- og vinkelseparationen, kan man nu se, at ligningen, for at være opfyldt, må være lig med en konstant ν , hvilket kan udtrykkes i følgende 2 ligninger

$$\frac{\partial^2 g(\varphi)}{\partial\varphi^2} = -\nu g(\varphi) \quad 5.16$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{\nu}{\sin^2\theta} \right) f(\theta) = 0 \quad 5.17$$

Det ses umiddelbart af den φ -afhængige differential-ligning, at den må have løsninger af typen

$$g(\varphi) = A \exp(\pm i\sqrt{\nu}\varphi)$$

Disse løsninger ændrer sig med en faktor $\exp(\pm i\sqrt{\nu}2\pi)$ når φ går fra 0 til 2π . For at bølgefunktionen kan afhænge entydigt af partiklens sted, må man derfor kræve, at $\sqrt{\nu}$ skal være lig med et helt tal, således at

$$\nu = m^2, \quad \text{hvor } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad 5.18$$

og man vil derfor kunne skrive løsningen som

$$g_m(\varphi) = A \exp(im\varphi) \quad 5.19$$

Går vi nu tilbage til den θ -afhængige differentiaalligning og anvender at $v = m^2$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) f(\theta) = 0$$

får man ved en passende omskrivning

$$\frac{1}{\sin \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial^2 f(\theta)}{\partial \theta^2} + \cos \theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) f(\theta) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial^2 f(\theta)}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) f(\theta) = 0 \quad 5.20$$

På dette udtryk kan man nu indføre følgende substitutioner

$$f(\theta) = P(\mu)$$

$$\text{hvor } \mu = \cos \theta \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \sin \theta = \sqrt{1 - \mu^2} \\ \cot \theta = \frac{\mu}{\sqrt{1 - \mu^2}} \end{cases}$$

med hvilke det gælder

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \theta} &= \frac{\partial P}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \theta} & \text{og} & \quad \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial P}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \theta} \right) \\ &= -\sqrt{1 - \mu^2} \frac{\partial P}{\partial \mu} & & \quad = \frac{\partial \mu}{\partial \theta} \frac{\partial^2 P}{\partial \mu^2} \frac{\partial \mu}{\partial \theta} + \frac{\partial P}{\partial \mu} \frac{\partial^2 \mu}{\partial \theta^2} \\ & & & \quad = (1 + \mu^2) \frac{\partial^2 P}{\partial \mu^2} - \mu \frac{\partial P}{\partial \mu} \end{aligned}$$

Dette kan man nu direkte indsætte i 5.20, og man finder

$$(1 - \mu^2) \frac{\partial^2 P(\mu)}{\partial \mu^2} - 2\mu \frac{\partial P(\mu)}{\partial \mu} + \left(\lambda - \frac{m^2}{(1 - \mu^2)} \right) P(\mu) = 0 \quad 5.21$$

Dette er en særlig type differentiaalligning, der har navnet Legendre's differentiaalligning, og det viser sig at ligningen kun har endelige løsninger, når

$$\lambda = l(l+1) \quad , \quad \text{hvor } l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad 5.22$$

Vi vil ikke gå dybere i løsningen af vinkelligningen, men blot angive, at den for en given værdi l kun har acceptable løsninger, der er på følgende form

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = N P_l^{|m|}(\cos \theta) \exp(im\varphi) \quad 5.23$$

hvor N er en normeringskonstant, og der for m gælder

$$m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

For en given værdi af l har bølgefunktionens vinkelafhængige del åbenbart $2l+1$ uafhængige, acceptable løsninger, svarende til at m gennemløber de hele tal fra $-l$ til l .

Funktionerne $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, som er givet ved ovenstående form, kaldes for kuglefunktioner, og herunder er angivet de simpleste kuglefunktioner for $l = 0, 1, 2$ og de tilhørende m -værdier.

Fig. 5.16

DE ENKLESTE KUGLE-FUNKTIONER $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$		
l	m	$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	+1	$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}$
	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$
2	-1	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$
	0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \times (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
	+1	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta \times e^{i\varphi}$
2	+2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi}$
	-2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{-2i\varphi}$

5.3.3. Impulsmoment og dets kvantisering.

Vi har nu set, at bølgefunktionens vinkelafhængige del hænger sammen med elektronernes bevægelse omkring kernen. I Bohrs atommodel har vi også set, at denne bevægelse intimt hænger sammen med elektronernes impulsmoment, og at impulsmomentet er kvantiseret.

Antager vi nu, at noget tilsvarende gælder i Schrødingerteorien, vil vi derfor anvende operatorbeskrivelsen på impulsmomentet.

Med udgangspunkt i den klassiske definition af impulsmoment

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$\Downarrow \left\{ \begin{array}{l} L_x = y p_z - z p_y \\ L_y = z p_x - x p_z \\ L_z = x p_y - y p_x \end{array} \right.$$

skal man nu erstatte impulskomponenterne med deres transformererede operatorer, idet det er indres at

$$\hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$$

Man finder herved de modsvarende operatorer af impulsmomentkomponenterne

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned}$$

Vi er egentlig interesseret i at have disse på polar koordinatform, og dette kan man finde at blive

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Ved at udregne kvadratet på impulsmomentoperatoren

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

vil man finde at

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

Dette ses netop, på nær en faktor $-\hbar^2$, at være Ω -operatoren 5.12, hvilket vil sige, at når man anvender vinkelligningen 5.14, så udgør $\hbar^2 l(l+1)$ egenverdierne for operatoren \hat{L}^2

$$\hat{\Omega} Y(\theta, \varphi) = -l(l+1) Y(\theta, \varphi)$$

\Downarrow

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y(\theta, \varphi)$$

5.24

Dette resultat understreger, at bølgefunktionens vinkelafhængige del er knyttet til elektronens impulsmoment, og det bemærkes, at kvantetallet l bestemmer impulsmomentets størrelse

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{L^2} = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

5.25

Dette resultat ses at være i fuldstændig overensstemmelse med Bohr-Sommerfeld atommodellen for bikvantetallet (se kap.2.2), for hvilken der anvendes følgende notation for kvantetallet l

l	0	1	2	3	4	. . .
	s	p	d	f	g	. . .

Vi skal nu se, at den tilsvarende overensstemmelse til Bohr-Sommerfeld modellen også gælder for kvantetallet m .

Man finder at kvadratet på z-komponentens impulsmomentoperator er

$$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

og indsættes dette i egenværdiligningen 5.16, får man

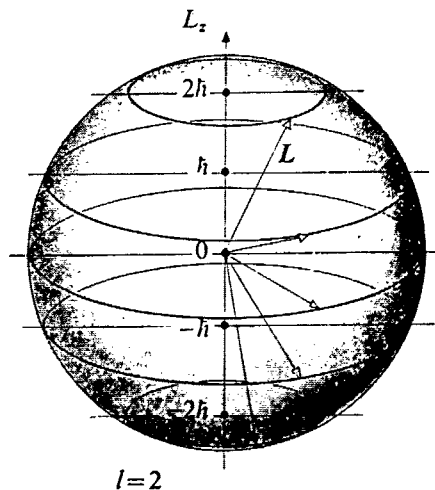
$$\hat{L}_z^2 g(\varphi) = (\hbar m)^2 g(\varphi)$$

hvor det ses, at $\hbar m$ udgør egenværdierne for operatoren \hat{L}_z . Det vil sige, at kvantetallet m bestemmer retningen af impulsmomentet

$$\hat{L}_z = m\hbar$$

5.26

Fig. 5.17



5.3.4. Radialligningen.

Vi vil nu vende tilbage til radialligningen 5.15, og se på løsninger til denne

$$-\frac{1}{R(r)} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (R(r)r)}{\partial r^2} + \frac{\lambda}{r^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} (\Phi(r) - E) = 0$$

Vi har i starten af dette kapitel bestemt $\Phi(r)$ som værende elektronens potentielle energi fra coulombpotentialt

$$\Phi(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

og vi kan nu fra det foregående identificere $\lambda = l(l+1)$ hvorfor radialligningen kan skrives

$$-\frac{1}{R(r)} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (R(r)r)}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

og ved passende omformning bliver ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (R(r)r)}{\partial r^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R(r) = E R(r)$$

Radialligningen skal nu løses for hver værdi af birkvantalitet $l = 0, 1, 2, \dots$, men vi vil forinden indføre følgende substitution

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

som indsat i radialligningen bliver

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \chi(r) = E \chi(r) \quad 5.27$$

Identificerer vi $\hbar^2 l(l+1)$ som kvadratet på det klassiske impulsmoment

$$L = m r^2 \omega$$

så finder vi at

$$\frac{L^2}{2mr^2} = \frac{1}{2}mr^2\omega^2$$

Dette, der et klassisk udtryk for radiallyigningsleddet $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2me^2 r^2}$, er det klassiske centrifugalpotential.

Man ved fra den klassiske mekanik, at et sådan potential har tendens til at tvinge elektronen ud i desto større baner, jo større impulsmomentet bliver. Tilsvarende må der her gælde, at elektronen vil tvinges ud i højere stationære baner, jo større l er.

Bestemmelsen af de mulige energiværdier er hermed formelt reduceret til at løse radiallyigningen for en partikel på r -aksen med den effektive potentielle energi

$$\Phi_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2me^2 r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

I figuren herunder er vist Φ_{eff} som funktion af r for s-, p- og d-tilstande. Det ses at kraftfeltet for $r \rightarrow 0$ er tiltrækkende for s-tilstande, mens det for p- og d-tilstande kun er tiltrækkende indtil et vis punkt $(\Phi_{\text{eff}})_{\text{min}}$, hvorefter kraftfeltet er frastødende.

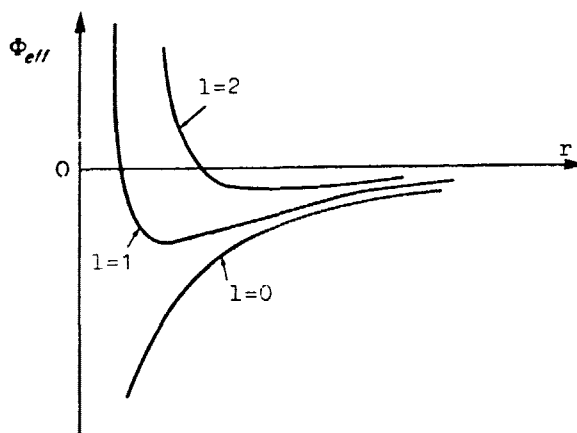


fig. 5.18

Man ser også, at $\Phi_{\text{eff}} \rightarrow 0$ for $r \rightarrow \infty$, og man kender

fra tidligere randværdiundersøgelser, at $E > \Phi(\infty)$ vil give et kontinuert energispektrum.

Når kraftfeltet er tiltrækkende, vil der derfor i intervallet $(\Phi_{\text{eff}})_{\text{min.}} < E < \Phi(\infty)$ være mulighed for bundne tilstande. Det er disse tilstande, vi i det følgende vil være interesseret i.

Figuren viser også, at de bundne tilstande må have en negativ totalenergi, og vi kan derfor i radiallygningen sætte $E = -|E|$

$$\frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2} + \left(-\frac{2m_e |E|}{\hbar^2} + \frac{2m_e e^2}{\hbar^2 4\pi\epsilon_0 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi(r) = 0 \quad 5.28$$

For at bølgefunktionen $\chi(r)$ skal give nogen mening, må man forlange at $\chi(r) \rightarrow 0$ for $r \rightarrow 0$ og $r \rightarrow \infty$.

Man kan finde, at

$$\lim_{r \rightarrow 0} \chi(r) \cong r^{l+1} \quad \text{og} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \chi(r) \cong \exp\left(-\frac{r}{\hbar} \sqrt{2m_e |E|}\right) \quad 5.29$$

er en acceptabel asymptotisk løsning.

Det vil nu være bekvemt at indføre den dimensionsløse variabel

$$\rho = \alpha r$$

hvor

$$\alpha = 2 \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e |E|}$$

For denne substitution finder man

$$\frac{\partial \chi}{\partial r} = \frac{\partial \chi}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial r} = \alpha \frac{\partial \chi}{\partial \rho}$$

samt

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha \frac{\partial \chi}{\partial \rho} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial r} \right) \left(\alpha \frac{\partial \chi}{\partial \rho} \right) = \alpha^2 \frac{\partial^2 \chi}{\partial \rho^2}$$

Dette indsættes nu i radialligningen 5.28

$$\frac{\partial^2 \chi(\rho)}{\partial \rho^2} + \left(-\frac{2m_e |E|}{\alpha^2 \hbar^2} + \frac{2m_e e^2}{\alpha^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0 r} - \frac{l(l+1)}{\alpha^2 r^2} \right) \chi(\rho) = 0$$

og anvendes $\alpha = \frac{2}{\hbar} \sqrt{m_e |E|}$ finder man

$$\frac{\partial^2 \chi(\rho)}{\partial \rho^2} + \left(-\frac{2m_e |E|}{4 \cdot 2m_e |E| \hbar^2} + \frac{2m_e e^2}{4 \cdot 2m_e |E| 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2\sqrt{2m_e |E|}}{\hbar \rho} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{4 \cdot 2m_e |E|} \cdot \frac{4 \cdot 2m_e |E|}{\hbar^2 \rho^2} \right) \chi(\rho) = 0$$

der reduceret bliver

$$\frac{\partial^2 \chi(\rho)}{\partial \rho^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \chi(\rho) = 0 \quad 5.30$$

hvor

$$n = \frac{m_e e^2}{\sqrt{2m_e |E|} \hbar 4\pi\epsilon_0}$$

Skriver man de asymptotiske løsninger 5.29 som funktion af ρ

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \chi(\rho) = \rho^{l+1} \quad \text{og} \quad \lim_{\rho \rightarrow \infty} \chi(\rho) = \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$$

vil vi nu antage bølgefunktionen $\chi(\rho)$ at være på formen

$$\chi(\rho) = \rho^{l+1} \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) L(\rho)$$

hvor $L(\rho)$ er en ukendt funktion.

Indsætter man denne bølgefunktion i radialligningen kan man finde, at følgende differentialligning gælder for den ukendte funktion

$$\rho L'' + (2(l+1) - \rho) L' + (n - l - 1) L = 0$$

Dette er endnu en særlig differentialligning - en såkaldt Laguerre differentialligning - og det viser sig,

at denne ligning kun har acceptable løsninger, når n er et helt tal, og der samtidig gælder

$$(n-l-1) \geq 0 \quad 5.31$$

hvor n således kun kan antage værdierne

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Anvender man dette på udtrykket for $n = \frac{m_e e^2}{\sqrt{2m_e |E|} \hbar 4\pi\epsilon_0}$, finder man energispektret for de bundne tilstande udtrykt ved

$$E_n = \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad \text{hvor } n = 1, 2, 3, \dots \quad 5.32$$

og man ser, at også energien i den kvantemekaniske beskrivelse fuldstændig overensstemmer med Bohrs atommodel for brintatomet (se kap 2.1).

Sammenlagt kan man nu sige, at den kvantemekaniske beskrivelse i dens resultater for kvantetallene (n, l, m) er helt ækvivalent med Bohr-Sommerfelds atommodel for brintatomet - trods deres vidt forskellige karakter i beskrivelsen, hvor Bohr-Sommerfelds atomteori bygger på en klassisk partikelbeskrivelse, og den kvantemekaniske teori anvender sig af en bølgebeskrivelse.

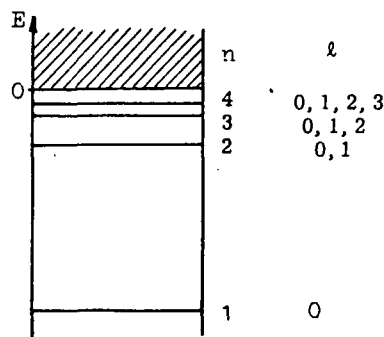


Fig. 5.19

Brintatomets diskrete spektrum ses at indeholde uendelig mange energiniveauer, af hvilke de laveste er an-

tydet på figuren ovenover. Samtidig vises det kontinuer-
te spektrum $E > 0$.

For en given værdi af l er n jfr. 5.31 begrænset ved

$$n \geq l+1$$

Det ses heraf, at det n 'te niveau i coulombfeltet svarer til tilstande med biquantetal $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ og da hver af disse har en udartningsgrad $2l+1$, bliver den samlede udartningsgrad for brintatomet med kvantetalene (n, l, m)

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{1}{2}n(1+2n-1) = n^2$$

Anvender vi nu definitionen på den dimensionsløse variabel $\rho = \frac{2r}{a_0} \sqrt{2m_e|E|}$ på energispektret 5.32, finder vi

$$\rho = \frac{2r}{a_0 n}$$

hvor

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

kan identificeres som Bohr-radien i brintatomet.

Bølgefunktionens radialdel, udtrykt ved ρ , vil være på formen

$$R_{n,l}(r) = N \rho^l \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) L(\rho) \quad 5.33$$

hvor N er en normeringskonstant, der må vælges således at sandsynligheden for at finde elektronen i hele rummet er 1

$$\int |u(r)|^2 dV = \int |R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 dV = 1 \quad 5.34$$

Vi vil ikke komme ind på bestemmelse af funktionen $L(\rho)$, men på næste side er angivet de simpleste radielle bøl-

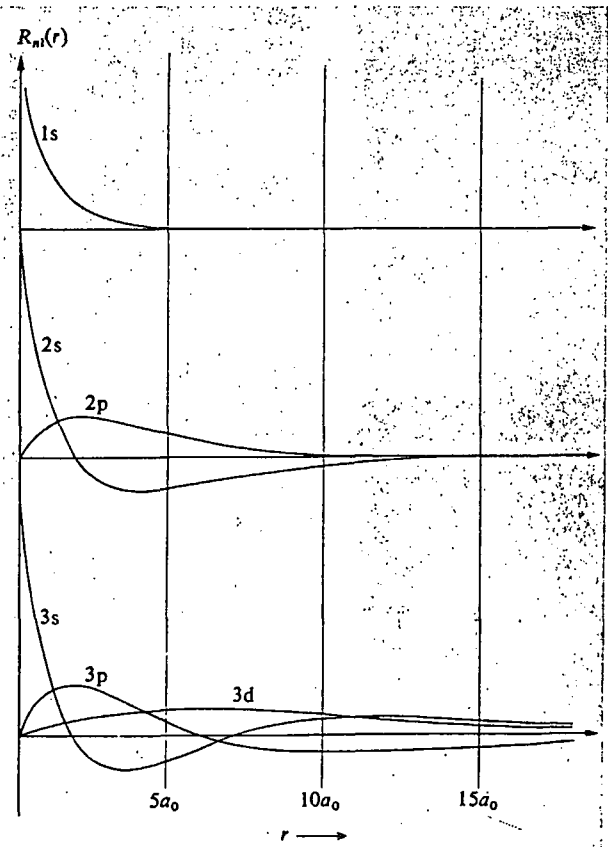
gefunktioner for $n = 1, 2, 3$ og de tilhørende l-
 kvantetal. Endvidere er disse radielle bølgefunktioner
 afbildet som funktion af r , i enheder af Bohrradier.

Fig. 5.20

Radiella vågfunktioner för vätelknande atomer		
n	l	$R_{nl}(r) \quad \rho = 2Zr/na_0$
1	0	$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\rho/2}$
2	0	$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2-\rho) e^{-\rho/2}$
2	1	$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2}$
3	0	$R_{30}(r) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6-6\rho+\rho^2) e^{-\rho/2}$
3	1	$R_{31}(r) = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho(4-\rho) e^{-\rho/2}$
3	2	$R_{32}(r) = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho^2 e^{-\rho/2}$

Några radiella vågfunktioner $R_{nl}(r)$.
 Bohrradien
 $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2 \approx 0,529 \cdot 10^{-10}$ m.

Fig. 5.21



5.3.5. Elektronfordelingen i brintatomet.

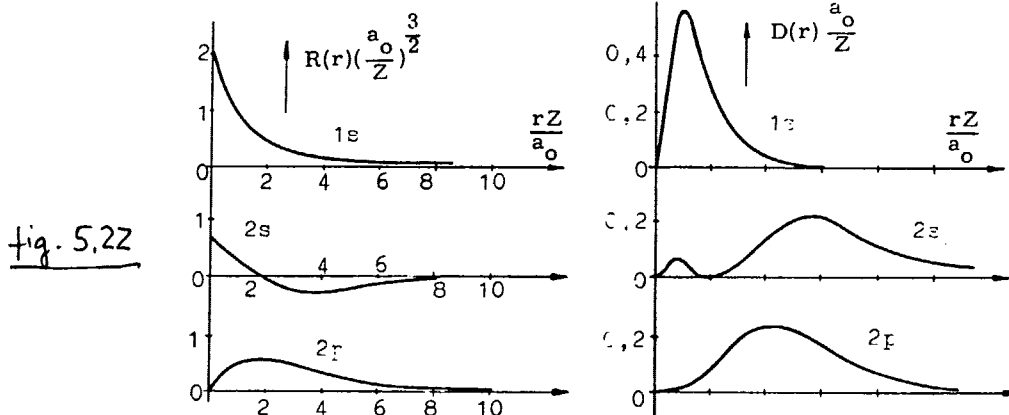
En undersøgelse af bølgefunktionens radialdel 5.33 viser for $r \rightarrow 0$, at for s-tilstande ($l=0$) er $R(r) \neq 0$, mens for alle andre tilstande er $R(r) \rightarrow 0$ for $r \rightarrow 0$. Det vil sige, at elektronen i tilstande $l \neq 0$ skyr nulpunktet i stigende grad for voksende værdier af l , og dette er netop i overensstemmelse med hvad man skulle forvente, jfr. diskussionen i afsnit 5.3.3. om impulsmomentets størrelse og centrifugalpotentialt.

Derimod for s-tilstande, hvor impulsmomentet er nul, kan man anskueliggøre elektronbanen, der klassisk er en cirkelbane, som her værende en ret linie gennem kraftcenteret. Men hertil må vi jfr. figur 5.16 erindre, at kuglefunktionen $Y(\theta, \varphi)$ er en konstant $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ for s-tilstande, og sandsynlighedstætheden $\int |R(r)Y(\theta, \varphi)|^2 dV$ er derfor kuglesymmetrisk fordelt, sådan at retningen af den lineære bane er helt ubestemt.

Man kan i figuren herunder se bølgefunktionen $R(r)$ afbildet for 3 tilstande - 1s, 2s og 2p - og endvidere er vist den radiale fordelingsfunktion for disse tilstande

$$D(r) = r^2 |R(r)|^2$$

Denne funktion er defineret således, at $D(r)dr$ angiver sandsynligheden for at finde elektronen i afstanden mellem r og $r+dr$.



Vi har allerede i ligning 5.34 nævnt, at $|u(r)|^2 dV$ er sandsynligheden for at finde elektronen i volumelementet dV . Udtrykker vi $dV = dx dy dz$ i polære koordinater finder man

$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

og det er netop denne transformation, der er årsag til formen af $D(r)$. Der gælder nemlig at

$$\int |R(r)|^2 dV = \int |R(r)|^2 r^2 dr$$

Hvis vi nu specielt ser på 1s-tilstanden i brintatomet, kan man finde, at $D(r)$ har maksimumsværdi for $r = a_0$, hvilket overensstemmer med baneradius i grundtilstanden i Bohrmodellen.

Tilsvarende kan vi nu finde middelværdien af r gennem

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r |R(r)|^2 dV = \int_0^{\infty} r^3 |R(r)|^2 dr$$

Benytter man at kvantetallene $(n, l) = (1, 0)$ for brintatomet i grundtilstanden, vil man ved hjælp af fig. 5.20 finde

$$R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

og indsættes dette i middelværdien for r , kommer man frem til at

$$\langle r \rangle = 4 \frac{1}{a_0^3} \int_0^{\infty} r^3 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr$$

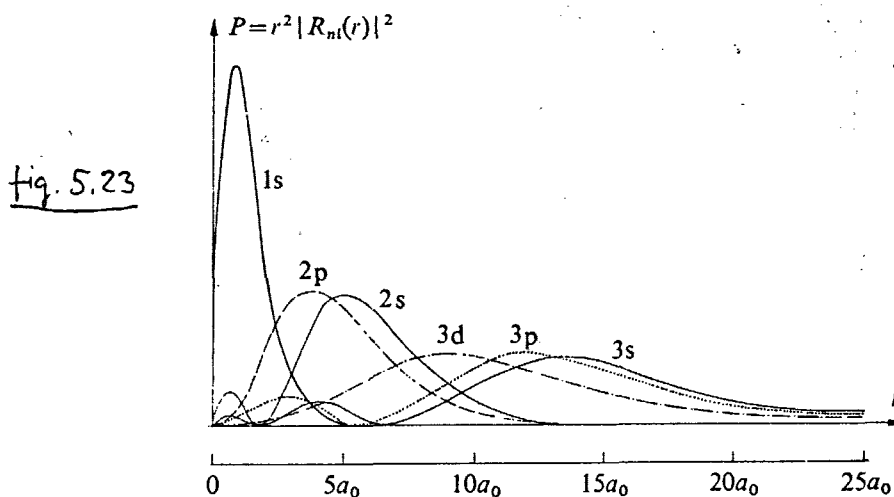
der ved opslag kan findes til

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2} a_0$$

Det vil sige at elektronens middelfastand fra kernen er $1,5a_0$.

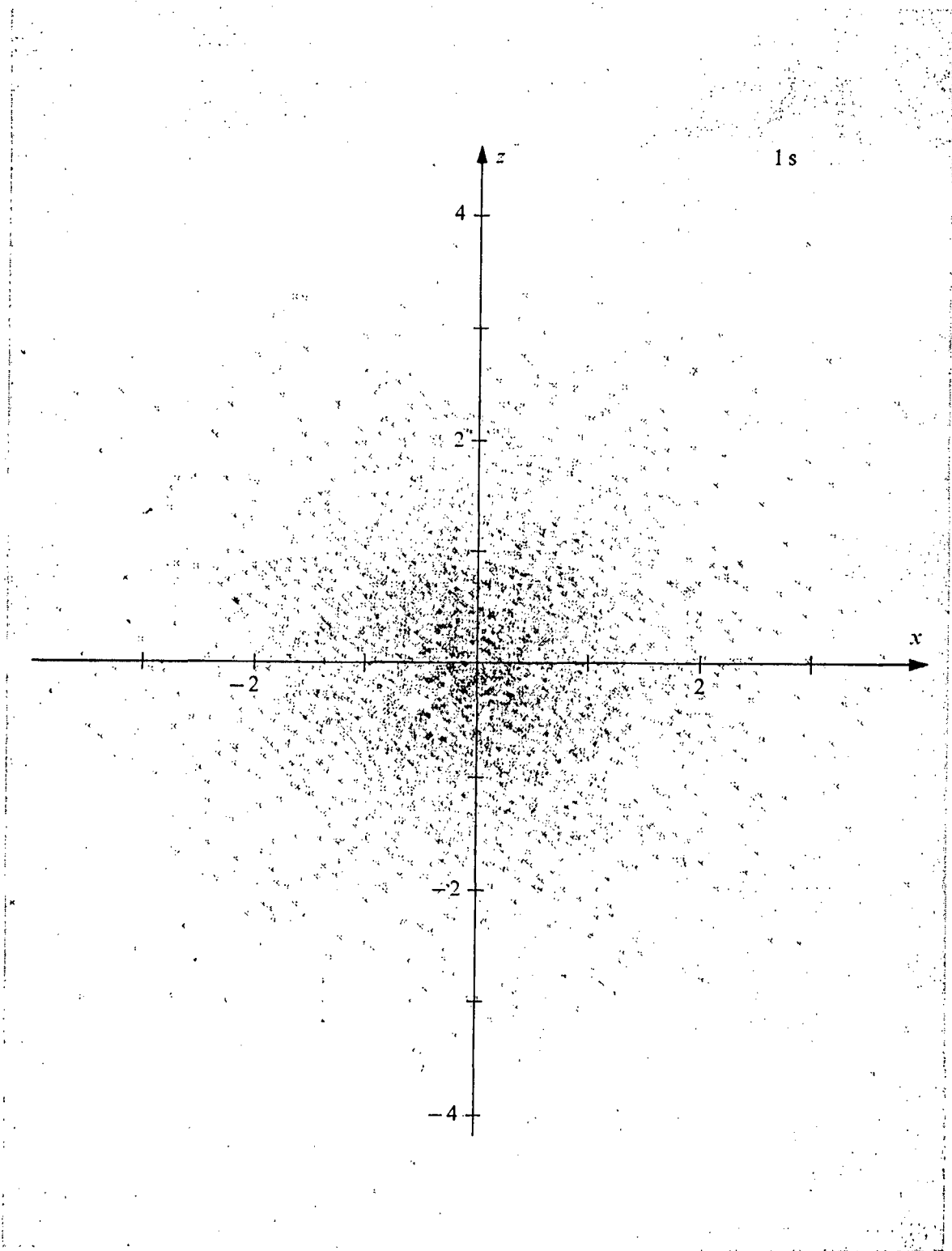
Mens afstanden hvor man med størst sandsynlighed kunne finde elektronen var a , kunne der her synes at være en uoverensstemmelse, især når energiværdierne eksakt stemmer overens mellem Bohrmodellen og den kvantemekaniske beskrivelse. Denne umiddelbare brist på overensstemmelse hænger sammen med, at energien er en funktion af $\frac{1}{r}$ snarere end r . Beregnes middelværdien for $\frac{1}{r}$, vil man finde $\frac{1}{a_0}$, som man skulle forvente.

På figuren herunder er vist en sammenlignende elektronfordeling $D(r)$ som funktion af r for tilstande indtil $n = 3$.



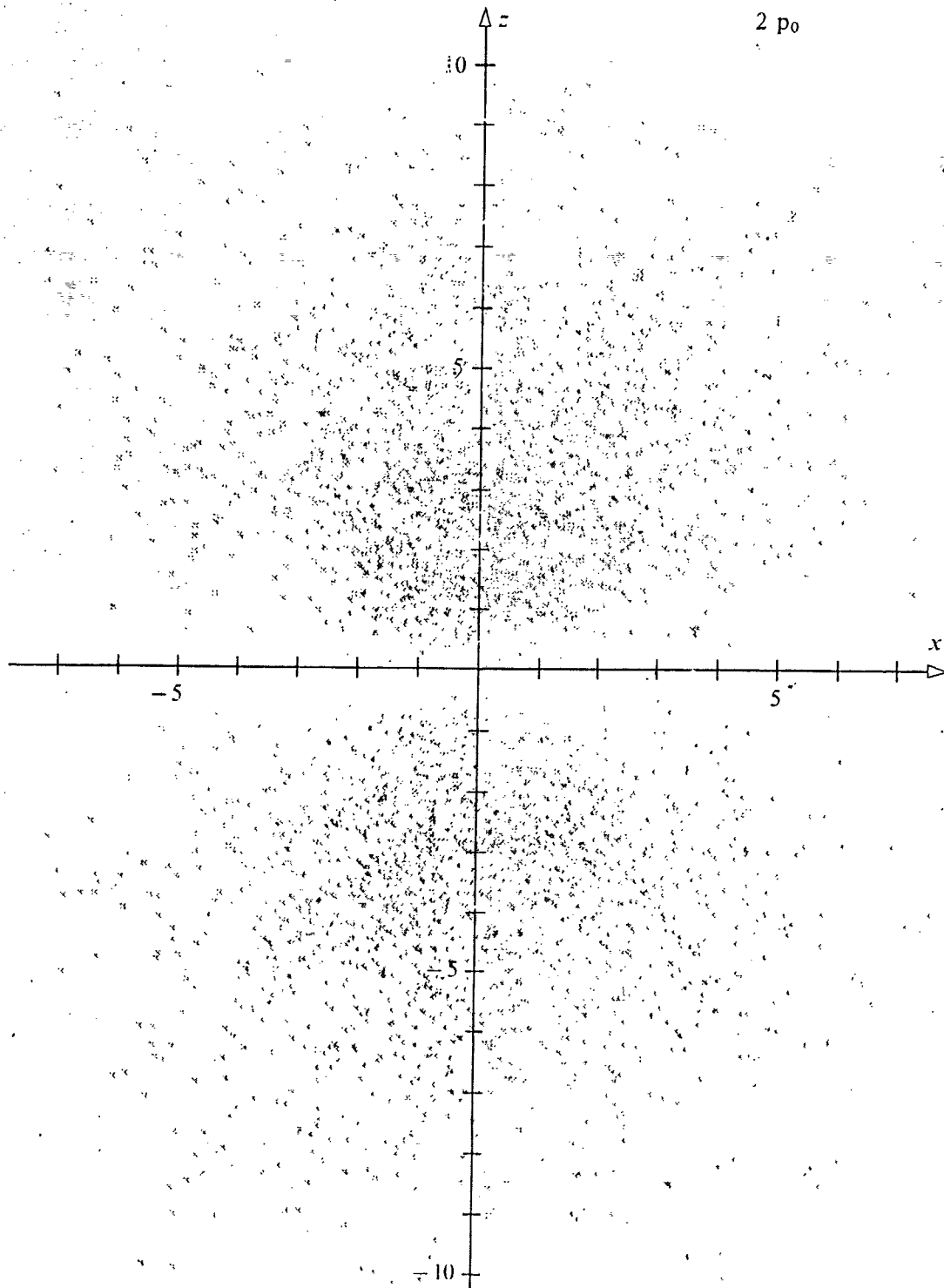
Tilsvarende er der på de næste 3 sider vist ved sværtning sandsynligheden for at finde elektronen som funktion af afstanden r , målt i Bohrradier og som funktion af vinklen (θ, ϕ) , for henholdsvis 1s-, 2p- og 3p-tilstanden.

Især for 1s-tilstanden er det vigtigt at bemærke, at man ikke betragter et snit igennem atomet, men derimod skal opfatte atomet som set på afstand.



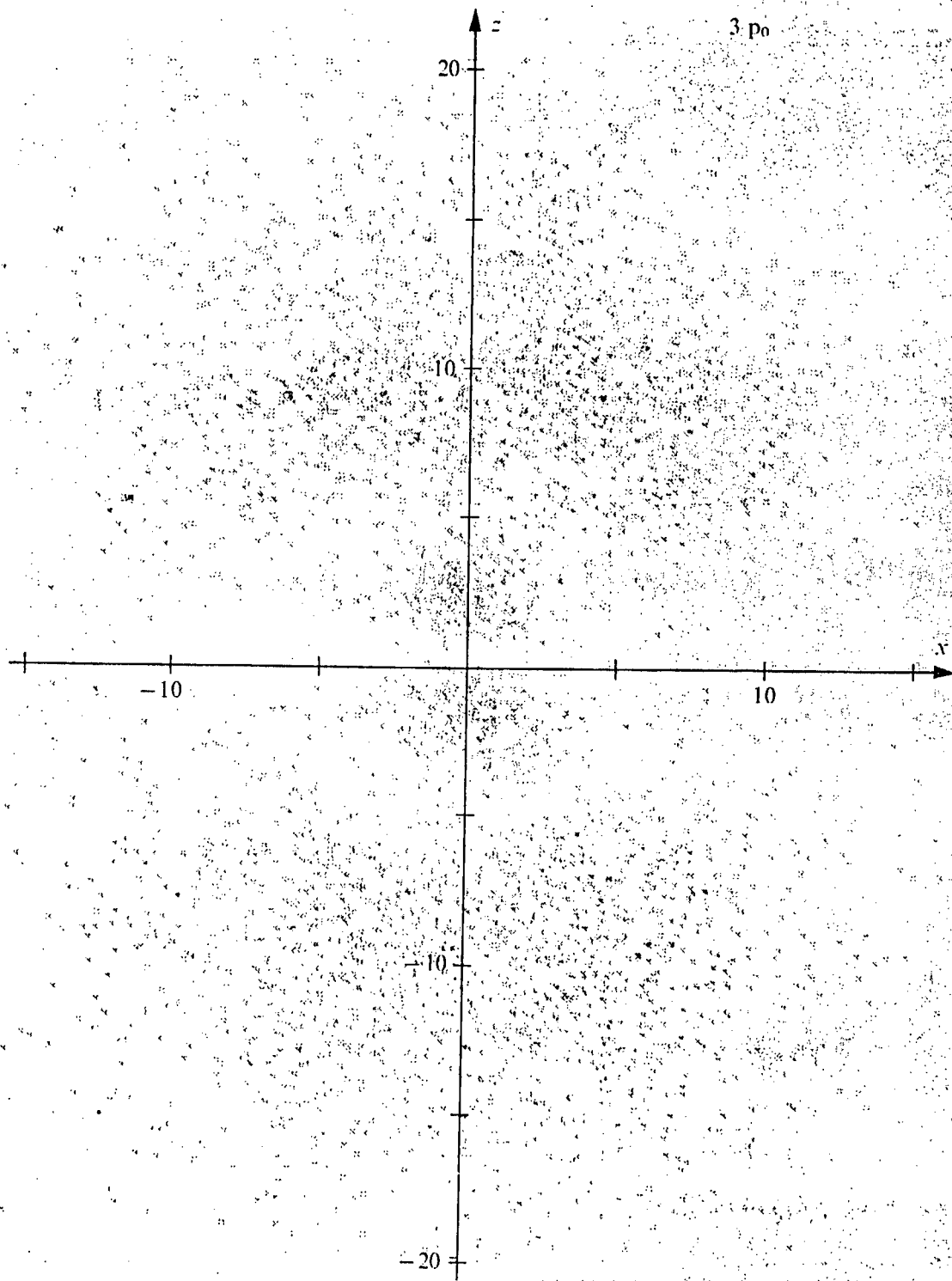
Elektronfördelningen i väteatomens grundtillstånd (1s). Längdenhet bohrradien a_0 .

Fig. 5.24



Elektronfördelningen i tillståndet $2p_0$ hos väteatomen.

Fig. 5.25



Elektronfördelningen i tillståndet $3p_0$ hos väteatomen.

Fig. 5.26

Opgaver til kapitel 5.2.

- Brintatomet.

1. Impulsmomentoperatorene \hat{L}_x og \hat{L}_z er givet ved

$$\hat{L}_x = -i\hbar(y(d/dz) - z(d/dy))$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar(x(d/dy) - y(d/dx))$$

a) Beregn kommutatoren $[\hat{L}_z, \hat{L}_x]$

b) Beregn kommutatoren $[\hat{H}, \hat{L}_z]$

(Vink: Anvend at $\hat{H} = i\hbar(d/dt)$)

2. Beregn sandsynligheden for, at en elektron i brintatomets grundtilstand skal befinde sig i en afstand fra kernen, der er større end a_0 .

3. Vis, at når elektronen i brintatomets grundtilstand befinder sig i afstanden $2a_0$ fra kernen, så er hele dets energi potentiel energi.

Dette indebærer ifølge den klassiske fysik, at elektronen ikke kan komme længere væk fra kernen.

Beregn nu sandsynligheden for, at elektronen i det kvantemekaniske tilfælde befinder sig i en afstand fra kernen, der er større end $2a_0$.

4. Find for brintatomet i grundtilstanden ubestemtheden i impulsens x-komponent Δp_x .

6. ERKENDELSESTEORETISKE PROBLEMER I

KVANTEMEKANIKKEN.

Da kvantemekanikken blev udviklet til dens konsistente form ved transformationsteorien, havde den allerede vundet en overvældende succes, hvad angik dens anvendelse på mangfoldige kvantitative problemer. Derimod skulle formalismens abstrakte karakter give anledning til en udbredt utilfredshed, der især måtte tilskrives en manglende indsigt i kvanteteoriens kvalitative fortolkning.

Det skulle her vise sig at være iagttagelsessituationen, der skulle gøres til genstand for en afklaring.

Et vigtigt skridt mod formuleringen af problemets karakter blev taget af Heisenberg i 1927 ved ubestemthedsrelationerne.

Ifølge disse var enhver måling af f.eks. elektronens position med anvendelse af et eller andet måleinstrument, forbundet med impulsudveksling mellem elektronen og instrumentet - som vi har set ved Heisenberg's γ -strålemikroskop - og denne vekselvirkning i iagttagelsessituationen bliver desto større jo nøjagtigere man ønsker positionsbestemmelsen foretaget.

Begrænsningen er, som vi tidligere har set det, en konsekvens af kommutationsrelationerne og dermed kvanteformalismen, men den afspejler også en direkte vekselvirkning mellem det iagttagne system og måleinstrumenterne.

Heisenberg havde gennem ubestemthedsrelationerne givet et væsentligt bidrag til kvantemekanikkens fysiske indhold, og i artiklen "Über den anschaulichen Inhalt ..." hvor ubestemthedsrelationerne første gang blev præsenteret for den større kreds af fysikere, udtrykte han konsekvensen af disse med følgende :

"I påstanden om, hvis vi eksakt kender fortiden kan vi forudsige fremtiden, er det ikke følgeslutning en, men præmissen som er falsk. Vi kan i princippet ikke kende fortiden i alle dens detaljer."

og Heisenberg konkluderede :

"I ånskuelsen af den intime forbindelse mellem kvanteteoriens statistiske karakter og indtrykket af al erkendelse, kan det synes, at der bag erkendelsens statistiske univers ligger en skjult reel verden styret af kausalitet. Sådanne spekulationer synes for os ubrugelige og meningsløse. For fysikken er nødt til at indskrænke sig til en formelbeskrivelse af relationerne mellem erkendelserne."

For Heisenberg hvilede kvantemekanikken således i sig selv, men gennem jævnlige diskussioner med Bohr, blev det Bohr klart, at dette kun var en begyndelse.



Fig. 6.1

6.1 Komplementaritetsprincippet.

Ved en fysiker kongres i Como/Italien i sep.27 gjorde Bohr sig til talsmand for begrebet komplementaritet - et begreb, der fik overordentlig stor betydning i den filosofiske diskussion af kvanteteorien.

Hele Bohr's erkendelsestanke blev herefter baseret på indholdet af dette begreb, for hvilken en præcis viden om en fysisk størrelse udelukker muligheden for en præcis viden om den komplementære fysiske størrelse - men at de fysiske størrelser kun tilsammen udgør en helhed.

Ved kongressen i Como begrundede Bohr nødvendigheden af komplementaritetsprincippet i følgende 5 sammenhængende egenskaber ved kvanteteorien.

- 1) Virkningskvantets udelelighed.
- 2) Elementar processernes diskontinuitet - eller individualitet.
- 3) Den ukontrollerbare vekselvirkning mellem objekt og måleinstrument.
- 4) Udelukkelse af på samme tid streng rum-/tids- og kausalbeskrivelse.
- 5) Opgivelse af den klassiske beskrivelsesmåde.

6.1.1 Bohr : Kvantepostulatet og atomteoriens seneste udvikling.

I det følgende fremstilles Bohr's forelæsning ved Como - kongressen, og heri redegør Bohr for kvanteteorien særegne stilling, hvilket fører til nødvendigheden af den komplementære beskrivelse.

Kvantepostulatet og Atomteoriens seneste Udvikling

1927

SELV om det er med stor glæde, at jeg følger den venlige indbydelse fra kongressens præsidium til at give en oversigt over kvanteteoriens nuværende tilstand for derved at åbne en almindelig diskussion om dette emne, der for tiden indtager så central en stilling i den fysiske videnskab, er det alligevel med en vis betænkelighed at jeg har påtaget mig dette hverv. Ikke alene er teoriens ærværdige ophavsmand selv til stede, men blandt tilhørerkredsen vil der være flere, som på grund af deres deltagelse i den seneste vidunderlige udvikling sikkert vil være mere fortrolige end jeg med visse sider af den højt udviklede matematiske formalisme. Ud fra simple betragtninger og uden at gå nærmere ind på enkeltheder af speciel matematisk karakter skal jeg imidlertid forsøge at gøre rede for en vis almindelig indstilling, som jeg tror er egnet til at belyse retningslinierne for teoriens udvikling fra dens allerførste begyndelse, og som jeg håber vil kunne hjælpe til at forsonde de tilsyneladende modstridende opfattelser, som forskellige fysikere har gjort sig til talsmænd for. Få emner turde være bedre egnet end kvanteteorien til at kendetegne fysikkens udvikling i det århundrede, der er gået siden den store mands død, hvis værk vi her er samlede for at mindes. Samtidig har vi netop på et område som dette, hvor vi vandrer ad nye stier og må stole på vor egen dømmekraft for at undgå de faldgruber, der omringer os på alle sider, måske mere anledning end nogensinde til ved ethvert skridt at påskønne det banebrydende arbejde, som de gamle mestre har udført, og som har skænket os vort værktøj.

KVANTEPOSTULAT OG KAUSALITET

Det ejendommelige for kvanteteorien er erkendelsen af en principiel begrænsning af de klassiske, fysiske begreber, når disse

anvendes på atomfænomener. Den derved opståede situation er af en særlig art, fordi vor tydning af erfaringsmaterialet væsentligt beror på anvendelsen af klassiske begreber. Til trods for de vanskeligheder, som dette forhold bereder en formulering af kvanteteoriens indhold, synes det dog, som vi skal se, at teoriens væsen kan bringes til udtryk ved hjælp af det såkaldte kvantepostulat, efter hvilket enhver atomproces udviser et træk af diskontinuitet eller snarere individualitet, som er de klassiske teorier fuldstændig fremmed og er karakteriseret ved det Planckske virkningskvantum.

Dette postulat kræver en resignation med hensyn til den kausale rum-tidsbeskrivelse af de atomare fænomener. Vor sædvanlige beskrivelse af naturfænomenerne har jo til sidste forudsætning, at de fænomener, det drejer sig om, kan iagttages uden at man væsentligt forstyrrer dem. Dette kommer også tydeligt frem ved formuleringen af relativitetsteorien, som har været så frugtbar for de klassiske teoriers afklaring. Som Einstein har fremhævet, beror enhver iagttagelse eller måling på et sammentræf af to uafhængige begivenheder i det samme rum-tidspunkt. Netop sådanne sammentræf berøres ikke af den forskel, som de forskellige iagttagelsers rum-tidsbeskrivelse iøvrigt kan fremvise. Nu betyder imidlertid kvantepostulatet, at enhver iagttagelse af de atomare fænomener medfører en endelig vekselvirkning med iagttagelsesmidlet, og at man derfor hverken kan tilskrive fænomenerne eller iagttagelsesmidlet en selvstændig fysisk realitet i sædvanlig forstand. Overhovedet indeholder begrebet iagttagelse en vilkårlighed, idet det væsentligt afhænger af, hvilke genstande man regner med til det iagttagne system. Til syvende og sidst kan enhver iagttagelse selvfølgelig føres tilbage til vore sansefornemmelser. Den omstændighed, at man ved tydning af iagttagelser altid må gøre brug af teoretiske forestillinger, fører imidlertid med sig, at det for hvert enkelt tilfælde bliver et spørgsmål om hensigtsmæssighed, på hvilket sted man indfører iagttagelsesbegrebet og dermed det med kvantepostulatet sammenhængende »irrationelle« træk i beskrivelsen.

Dette forhold indebærer vidtgående konsekvenser. På den ene side fordrer definitionen af et fysisk systems tilstand, som man sædvanlig opfatter det, udelukkelsen af alle ydre indvirkninger;

men så er også ifølge kvantepostulatet enhver mulighed for iagttagelse udelukket, og fremfor alt taber begreberne tid og rum deres umiddelbare betydning. Tillader vi på den anden side for at muliggøre iagttagelse eventuelle vekselvirkninger med dertil egnede ikke til systemet hørende målemidler, er ifølge sagens natur en entydig definition af systemets tilstand ikke mere mulig, og der kan ikke blive tale om kausalitet i sædvanlig forstand. Ifølge kvanteteoriens væsen må vi altså nøjes med at opfatte rum-tidsbeskrivelsen og kausalitetsfordringen, hvis forening karakteriserer de klassiske teorier og som symboliserer iagttagelses- og definitionsmulighedernes idealisation, som komplementære, men hinanden udelukkende træk i beskrivelsen af erfaringens indhold. Ligesom man i relativitetsteorien erkender, at hensigtsmæssigheden af den skarpe, af vore sanser krævede adskillelse mellem rum og tid kun beror derpå, at de sædvanligt forekommende relative hastigheder er små i forhold til lysets hastighed, kan kvanteteorien siges at have bragt den erkendelse, at formålstjenligheden af vor hele kausale rum-tidslige anskuelsesmåde kun beror på virkningskvantets lidenhed i forhold til de virkninger, der kommer i betragtning ved de sædvanlige sansefønelser. I virkeligheden stiller kvantepostulatet os ved beskrivelsen af de atomare fænomener over for den opgave at udvikle en »komplementaritetsteori«, hvis modsigelsesfrihed kun kan bedømmes ved at veje definitions- og iagttagelsesmulighederne mod hverandre.

Denne opfattelse gør sig allerede gældende ved det meget omdiskuterede spørgsmål om lysets og de materielle elementarpartiklers natur. Hvad lyset angår, bliver dets udbredelse i tid og rum som bekendt på tilfredsstillende måde beskrevet af den elektromagnetiske lysteori. I særdeleshed gengives såvel interferensfænomenerne i det tomme rum som stoffernes optiske egenskaber på undtagelsesfri måde ved det bølgeteoritiske superpositionsprincip. Ikke desto mindre finder bevarelsen af energi og bevægelsesmængde ved vekselvirkning mellem stråling og materie, sådan som det kommer frem i den fotoelektriske effekt og Compton-effekten, først sit rette udtryk ved den af Einstein udviklede lyskvanteforestilling. De tvivl om den strenge opretholdelse af superpositionsprincippet på den ene side og om den almindelige

gyldighed af energi- og impulsætningerne på den anden side, som denne tilsyneladende modstrid har givet anledning til, er som bekendt på overbevisende måde blevet afvist ved direkte forsøg. Dette forhold turde godtgøre uigennemförligheden af en kausal rum-tidsbeskrivelse af lysfænomenerne. For så vidt vi ønsker at forfølge lovene for lysvirkningernes udbredelse i rum og tid, er vi på grund af kvantepostulatet henvist til statistiske betragtninger. I modsætning dertil betyder opretholdelsen af kausalitetsfordringen ved de enkelte af virkningskvantet karakteriserede lysprocesser en resignation med hensyn til de rum-tidslige forhold. Naturligvis kan der aldrig være tale om en fuldstændig uafhængig anvendelse af rum-tidsbeskrivelsen og kausalitetsbegrebet. Langt snarere danner de to opfattelser af lysets natur to forskellige forsøg på en tilpasning af de eksperimentelle kendsgerninger til vor sædvanlige anskuelsesform, ved hvilken de klassiske begrebers begrænsning kommer til udtryk på komplementær måde.

Betragtningen af de materielle smådeles egenskaber fører til lignende slutninger. De elektriske elementardeles individualitet turde fremgå af de almindeligste erfaringer. For at forklare forskellige kendsgerninger, navnlig den for kort tid siden opdagede selektive refleksion af elektroner fra metalkrystaller, er man ikke desto mindre nødt til at gøre brug af det bølgeteoretiske superpositionsprincip i overensstemmelse med de først af L. de Broglie fremsatte tanker. Så længe vi holder os til de klassiske begreber, står vi altså på lignende måde som ved lyset foran et uundgåeligt dilemma, som dog netop kan betragtes som et træffende udtryk for analysen af erfaringsmaterialet. I virkeligheden drejer det sig her ikke om modsigelser, men om komplementære opfattelser af fænomenerne, som først tilsammen giver en naturlig almindeliggørelse af den klassiske beskrivelsesmåde. Ved diskussionen af disse spørgsmål må man ikke lade ude af betragtning, at det i overensstemmelse med den her hævdede opfattelse såvel ved stråling i det tomme rum som ved frie materielle partikler drejer sig om abstraktioner, da ifølge kvantepostulatet deres egenskaber kun er tilgængelige for definition og iagttagelse ved deres vekselvirkning med andre systemer. Ikke desto mindre danner disse abstraktioner, som vi skal se, et uundværdigt middel til at give

udtryk for erfaringens indhold i tilslutning til vore sædvanlige anskuelsesformer.

De vanskeligheder, som i kvanteteorien møder en kausal rumtidsbeskrivelse og som i lang tid har været genstand for diskussion, er i den senere tid ved udviklingen af de nye symbolske metoder trådt i forgrunden. Et vigtigt bidrag til spørgsmålet om disse metoders modsigelsesfrie anvendelse er for nylig givet af Heisenberg. Han har i denne forbindelse særlig fremhævet den ejendommelige, reciproke usikkerhed, som enhver måling af atomstørrelser indebærer. Inden vi går nærmere ind på hans betragtninger, vil det imidlertid være hensigtsmæssigt at vise, hvorledes det i denne usikkerhed fremtrædende komplementære træk af beskrivelsen synes uundgåeligt allerede ved analysen af de simpleste begreber, som ligger til grund for tydningen af erfaringerne.

VIRKNINGSKVANTUM OG KINEMATIK

Den principielle modsætning mellem virkningskvantet og de klassiske begreber kommer straks tydeligt frem ved de simple formler, som danner det fælles grundlag for lyskvanteteorien og bølge teorien for materien. Betegner vi Plancks konstant med h , så har vi som bekendt

$$E\tau = I\lambda = h, \quad (1)$$

hvor E og I betyder energi og impuls, τ og λ den tilordnede svingningstid og bølgelængde. I disse formler står de to nævnte opfattelser af lyset og materien skarpt over for hinanden. Medens energi og impuls tilhører partikelbegrebet og altså ifølge den klassiske opfattelse bør kunne tilordnes bestemte rum-tidskoordinater, henviser svingningstid og bølgelængde til et i rum og tid ubegrænset tog af plane rent harmoniske bølger. Først superpositionsprincippet muliggør en tilslutning til den sædvanlige beskrivelse. En begrænsning af bølgefelters udbredelse i tid og rum kan nemlig altid opfattes som en følge af interferens inden for en gruppe af harmoniske elementarbølger. Som vist af de Broglie, lader nu også translationshastigheden for de bølgerne tilordnede individer sig fremstille netop ved den såkaldte gruppe-

hastighed. Lad os som sædvanlig betegne en plan elementarbølge ved

$$A \cos 2\pi (t\nu - x\sigma_x - y\sigma_y - z\sigma_z + \delta),$$

hvor A og δ er konstanter, som bestemmer henholdsvis amplitude og fase. Størrelsen $\nu = 1/\tau$ er svingningstallet og $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ er bølgetallene i koordinaternes retning og kan opfattes som komponenter af bølgetallet $\sigma = 1/\lambda$ i forplantningsretningen. Medens ν/σ fremstiller bølge- eller fasehastigheden, er gruppehastigheden defineret ved $d\nu/d\sigma$. Ifølge relativitetsteorien har vi nu for en partikel med hastigheden V

$$I = \frac{E}{c^2} V \quad \text{og} \quad VdI = dE,$$

hvor c betegner lyshastigheden. Ifølge formel (1) er altså fasehastigheden lig med c^2/V og gruppehastigheden lig med V . På den ene side understreger den omstændighed, at den førstnævnte hastighed altid er større end lyshastigheden, direkte disse betragtningers symbolske karakter. På den anden side giver muligheden af at identificere partikelhastigheden med gruppehastigheden os anvisning på anvendelsesområdet for rum-tidsbilleder i kvanteteorien. Her åbenbarer tillige beskrivelsens komplementære karakter sig, idet anvendelsen af bølgegrupper nødvendigvis medfører en uskarphed i definitionen af svingningstid og bølgelængde og altså også i definitionen af de ved relation (1) tilordnede energi- og impulsstørrelser.

Strengt taget kræver fremstillingen af et begrænset bølgefelt en mangfoldighed af elementarbølger, der svarer til alle mulige størrelser for ν og $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. I gunstigste tilfælde vil imidlertid middelværdierne af forskellen mellem disse størrelser for to elementarbølger i gruppen have en størrelsesorden givet ved betingelsen

$$\Delta t \Delta \nu = \Delta x \Delta \sigma_x = \Delta y \Delta \sigma_y = \Delta z \Delta \sigma_z = 1,$$

hvor $\Delta t, \Delta x, \Delta y, \Delta z$ angiver bølgefeltets udbredelse i tiden og i rumkoordinaternes retninger. Disse relationer, der er velkendt fra de optiske instrumenters teori, især fra Rayleighs betragtninger over spektralapparaternes opløsningsevne, udtrykker be-

tingelsen for, at bølgetogene ved interferens kan udlette hverandre på bølgefeltets rum-tidslige grænseflader. Relationerne kan også betragtes som udtryk for, at gruppen som helhed ikke har nogen fase i samme forstand som de enkelte elementarbølger. Af formel (1) følger nu

$$\Delta t \Delta E = \Delta x \Delta I_x = \Delta y \Delta I_y = \Delta z \Delta I_z = h \quad (2)$$

for den størst mulige definitionsnøjagtighed af de bølgefeltet tilordnede individers energi og impuls. I almindelighed vil dog forholdene for tilordningen af en energi- og impuls værdi til et bølgefelt være endnu mindre gunstige. Selv om bølgegruppens beskaffenhed til at begynde med opfylder relationen (2), vil dens udstrækning i tidens løb undergå sådanne forandringer, at den bliver mindre og mindre egnet til at fremstille et individuums bevægelse. Netop i denne omstændighed ligger jo det paradoksale i spørgsmålet om lysets og de materielle smådeles natur. Iøvrigt hænger den ved formel (2) udtrykte begrænsning af de klassiske begreber nøje sammen med den indskrænkede gyldighed af den klassiske mekanik, som i materiens bølgeteori svarer til den geometriske optik, i hvilken bølgeudbredelsen anskueliggøres ved »stråler«. Kun i dette grænsetilfælde lader energi og impuls sig entydigt definere i tilslutning til rum-tidsbilleder. For en almindelig definition af disse begreber er vi direkte henvist til sætningerne om energiens og bevægelsesmængdens bevarelse, hvis rette formulering har været et grundproblem ved udviklingen af de symbolske metoder, vi senere skal komme ind på.

I relativitetsteoriens sprog udsiger formel (2), at der i kvanteteorien består et almindeligt, reciprokt forhold mellem den maksimale skarphed, hvormed de individerne tilordnede rum-tids-henholdsvis energi-impulsvektorer kan defineres. Dette forhold kan betragtes som et simpelt symbolsk udtryk for rum-tidsbeskrivelsens og kausalitetsfordringens komplementære natur. Samtidig tillader imidlertid forholdets almindelige karakter i et vist omfang at forene benyttelsen af energi- og impulsætningen med den rum-tidslige fremstilling af iagttagelserne, idet man i stedet for to i et rum-tidspunkt sammenfaldende, veldefinerede begivenheder betragter sammenfald af unøjagtigt definerede individer inden for endelige rum-tidsområder.

Denne omstændighed tillader at undgå de velbekendte paradokser, som møder os ved beskrivelsen af spredning af stråling ved frie, elektriske smådele og af sammenstød mellem to smådele. Ifølge de klassiske begreber fordrer beskrivelsen af spredningen strålingens endelig udbredelse i rum og tid; kvantepostulatet derimod fordrer tilsyneladende en momentan ændring af elektronens bevægelse i et enkelt rumpunkt. Imidlertid lader elektronens impuls og energi sig lige så lidt som strålingens definere uden at tage et endeligt rum-tidsområde i betragtning. Endvidere forudsætter energi- og impulsætningens anvendelse på processen, at den nøjagtighed, hvormed impuls- og energi-vektorerne er defineret, er den samme for stråling og elektron. Ifølge formel (2) kan man altså ved beskrivelsen af deres vekselvirkning tilordne de to individer det samme rum-tidsområde.

Noget ganske analogt gælder for stødet mellem to materielle partikler; dog havde man ikke været opmærksom på kvantepostulatets betydning for dette fænomen, før man erkendte uundværligheden af bølgeforestillingen. Dette postulat repræsenterer jo her antagelsen om partiklernes individualitet, som rækker ud over den rum-tidslige beskrivelse og imødekommer kausalitetsfordringen. Medens hele lyskvanteteoriens håndgribelige indhold rummes i sætningerne om energiens og impulsens bevarelse, må man ved de elektriske elementarpartikler i denne forbindelse også tage hensyn til bevarelsen af elektricitetsladningen. Det er næppe nødvendigt at bemærke, at vi ved den nærmere beskrivelse af vekselvirkningen mellem individerne ikke kan nøjes med de ved formlerne (1) og (2) udtrykte kendsgerninger, men må benytte os af hjælpemidler, som tillader at tage den for denne vekselvirkning afgørende kobling i betragtning, hvorved netop elektricitetsladningens betydning kommer frem. Som vi skal se nedenfor, fordrer disse hjælpemidler en endnu videregående resignation med hensyn til anskuelighed i sædvanlig forstand.

MÅLINGER I KVANTETEORIEN

I sin allerede nævnte undersøgelse over de kvanteteoretiske metoders modsigelsesfrihed, har Heisenberg opstillet relationen (2) som udtryk for den størst mulige nøjagtighed, med hvilken man

på en gang kan måle en partikels rum-tidskoordinater og impuls-energiværdier. Han støtter sig derved på følgende betragtning: på den ene side kan man f. eks. med et optisk instrument måle en partikels sted med en hvilken som helst nøjagtighed, hvis man bare ved afbildningen benytter stråling med tilstrækkelig kort bølgelængde. Ifølge kvanteteorien er imidlertid strålingens spredning fra objektet altid forbundet med en vis endelig impulsændring, som er desto større, jo kortere bølgerne er. På den anden side kan en partikels impuls bestemmes med en hvilken som helst nøjagtighed f. eks. ved måling af dens hastighed ved hjælp af Doppler-effekten ved spredning af stråling, hvis blot det benyttede lys har så stor en bølgelængde, at man ikke behøver at tage hensyn til tilbagestødet; derved bliver imidlertid stedbestemmelsen på tilsvarende måde unøjagtig.

Kernen i disse betragtninger er betoningen af kvantepostulatets uundgåelighed ved bedømmelsen af målingsmulighederne. Imidlertid er en nøjere undersøgelse af definitionsmulighederne påkrævet for at få beskrivelsens komplementære karakter alsidigt frem. I og for sig ville en diskontinuert ændring af partiklens energi og impuls ved iagttagelsesprocessen ikke kunne hindre os i at tilskrive såvel rum-tidskoordinaterne som impuls-energistørrelserne nøjagtige værdier før og efter processen. Den reciprokke usikkerhed, som altid knytter sig til angivelsen af sådanne værdier, er jo også, som det fremgår af ovenstående redegørelse, fremfor alt betinget af den begrænsede nøjagtighed, med hvilken energi- og impulsændringer kan defineres, hvis de til iagttagelsen benyttede bølgefelter skal have en tilstrækkelig begrænset udstrækning til at fastlægge partiklens rum-tidskoordinater.

Ved stedbestemmelse ved hjælp af et optisk instrument må man i denne forbindelse betænke, at afbildningen altid beror på benyttelsen af et divergent strålebundt. Et mikroskops opløsningsevne er således givet ved det bekendte udtryk $\lambda/2\varepsilon$, hvor λ betyder lysets bølgelængde og ε den såkaldte numeriske apertur, d. v. s. sinus til den halve åbningsvinkel. Selv om man til belysning af objektet benytter parallelt lys, og altså den indfaldende lyskvants impuls h/λ er fuldkommen bestemt også med hensyn til retningen, vil den endelige apertur forhindre os i nøjagtigt at kende det tilbagestød, der ledsager den lysspredning, hvorpå iagt-

tagelsen beror. Hvis partiklens impuls var nøjagtigt kendt før spredningsprocessen, ville efter iagttagelsen vort kendskab til dens impulskomponent i objektplanen alligevel være behæftet med en usikkerhed som åbenbart er $2\epsilon h/\lambda$. Produktet af den nøjagtighed, med hvilken vi kan bestemme stedkoordinat og impulskomponent i en bestemt retning, er altså netop udtrykt ved formel (2). Man kunne tænke sig, at ikke blot aperturen, men også bølgetogets længde ville være af betydning ved bedømmelsen af stedbestemmelsens nøjagtighed, fordi partiklen under den endelige belysningstid kunne ændre sin stilling. Da imidlertid det nøjagtige kendskab til lysets bølgelængde er uvæsentligt for de ovenanførte betragtninger, indser man let, at bølgetoget for enhver apertur kan vælges så kort, at en ændring af partiklens sted under iagttagelsen er uden betydning i forhold til den af opløsnings- evnen definerede nøjagtighedsgrænse.

I tilfælde af en impulsmåling ved hjælp af Doppler-effekten – under hensyntagen til Compton-effekten – vil man benytte sig af et parallelt bølgetog. Bølgetogets udbredelse i forplantningsretningen er imidlertid væsentligt for den nøjagtighed, med hvilken bølgelængdeændringen ved strålingens spredning kan måles. Betegnes bølgetogets længde med l , og antager vi, at den indfaldende og spredte strålings retning er henholdsvis lig og modsat den, i hvilken sted- og impulskomponenterne måles, kan størrelsen $c\lambda/2l$ betragtes som mål for hastighedsmålingens nøjagtighed. Herved er for simpelhedens skyld lyshastigheden c antaget at være stor i forhold til partiklens hastighed. Er m partiklens masse, er altså den usikkerhed, som knytter sig til en iagttagelse af impulsen lig med $mc\lambda/2l$. I dette tilfælde er tilbagestødets størrelse $2h/\lambda$ så godt defineret, at det ikke giver anledning til nogen nævneværdig usikkerhed i angivelsen af partiklens impuls efter iagttagelsen. Compton-effektens almindelige teori tillader jo også ud fra den indfaldende og den spredte strålings bølgelængde at beregne hastighedskomponenterne i strålingens retning før og efter impulsændringen. Men selv om partiklens stedkoordinater til at begynde med er nøjagtigt bekendt, vil stedangivelsen efter impulsmålingen indeholde en usikkerhed. På grund af umuligheden af at angive et nøjagtigt tidspunkt for tilbagestødet, kan vi nemlig kun kende middelhastigheden i iagttagelsesretningen

under spredningsprocessen med en nøjagtighed $2h/m\lambda$. Da det til processen hørende tidsinterval er l/c , vil usikkerheden i stedangivelsen efter iagttagelsen derfor være $2hl/m\lambda c$. Også her er altså produktet af steds- og impulsmålingens nøjagtighed givet ved den almindelige formel (2).

Ligesom ved stedbestemmelsen kan iagttagelsesprocessens varighed ved impulsmålinger gøres vilkårlig kort, hvis vi blot benytter tilstrækkelig kortbølget stråling. At tilbagestødet der ved bliver større, har jo, som vi har set, ingen indflydelse på målenøjagtigheden. Det må endnu bemærkes, at det, når vi gentagne gange har talt om partiklens hastighed, i denne sammenhæng kun drejer sig om en bekvem, formel tilslutning til den sædvanlige rum-tidsbeskrivelse. Som det allerede fremgår af de ovenanførte betragtninger af de Broglie, må hastighedsbegrebet stedse anvendes med forsigtighed. En entydig definition af dette begreb er jo også udelukket ved kvantepostulatet, hvad man særlig må betænke, når man sammenligner resultatet af flere på hinanden følgende iagttagelser. Vel kan man bestemme et individs sted til to forskellige tidspunkter med en hvilken som helst nøjagtighed. Hvis vi imidlertid på sædvanlig måde vil beregne individets hastighed i intervallet derimellem, så har vi at gøre med en idealisation, ud fra hvilken vi ikke kan drage entydige slutninger med hensyn til individets tidligere og fremtidige forhold.

Ifølge de ovenstående betragtninger angående definitionsmulighederne af individernes egenskaber vil det ved diskussionen af den nøjagtighed, med hvilken en partikels sted og impuls kan måles, åbenbart ikke gøre nogen forskel, om vi i stedet for spredning af stråling benytter stød mellem materielle partikler. I begge tilfælde ser vi, at den omhandlede usikkerhed i lige høj grad knytter sig til målemidlet som til objektet. Denne usikkerhed er uundgåelig ved beskrivelsen af individernes opførsel i forhold til et på sædvanlig måde ved faste legemer og uforstyrrelige ure fastlagt koordinatsystem. Forsøgsbetingelserne – åbnen og lukken af blendere o. s. v. – tillader jo kun at drage slutninger angående det tilordnede bølgefelts udbredelse i rum og tid.

Ved tilbageføringen af iagttagelserne til vorre sansefønelser kommer kvantepostulatet endnu engang i betragtning ved

målemidtets opfattelse, hvad enten vi har at gøre med dets direkte virkning på øjet, eller opfattelsen sker ved passende hjælpemidler som fotografplader, Wilsonske tågefigurer o. s. v. Man indser imidlertid let, at det nye statistiske element, der derved kommer til, ikke vil have nogen væsentlig indflydelse på usikkerheden af objektets beskrivelse. Man kunne måske endog formode, at den vilkårlighed, som adskillelsen af objekt og målemiddel rummer, indebar en mulighed for at undgå denne usikkerhed. Ved en partikels stedbemmelse ved hjælp af et optisk instrument kunne man således spørge, om vi ikke ved hjælp af impulsætningen kunne bestemme den ved spredningen afgivne impuls ved en måling af de impulsændringer, som mikroskopet inklusive lyskilde og fotografplader undergår ved iagttagelsesprocessen. En nærmere undersøgelse viser imidlertid, at en sådan måling ikke er mulig, hvis man samtidig skal kende mikroskopets sted med tilstrækkelig nøjagtighed. Ud fra de erfaringer, som kommer til udtryk i materiens bølgeteori, følger nemlig for ethvert legeme, at dets tyngdepunktskoordinater og komponenterne af dets samlede bevægelsesmængde kun kan defineres med en nøjagtighed, som ligger inden for den ved formlen (2) angivne grænse.

Strengt taget tilhører iagttagelsesbegrebet den kausale rumtidsbeskrivelse. På grund af den almindelige karakter af den ved formlen (2) udtrykte relation kan man imidlertid også i kvanteteorien anvende dette begreb på modsigelsesfri måde, hvis man blot tager hensyn til den i denne relation udtrykte usikkerhed. Som Heisenberg har fremhævet, får man en lærerig illustration til den kvanteteoretiske beskrivelse af de atomare (mikroskopiske) fænomener, hvis man sammenligner denne usikkerhed med den, som enhver iagttagelse allerede i den sædvanlige beskrivelse af naturfænomenerne er behæftet med på grund af målingernes ufuldkommenhed. Han bemærker i denne forbindelse, at man endog ved de sædvanlige (makroskopiske) fænomener i en vis forstand kan sige, at de opstår ved gentagne iagttagelser. Det må imidlertid ikke glemmes, at enhver påfølgende iagttagelse efter den klassiske teori tillader at forudsige fænomenernes forløb med en stedse større sikkerhed, idet den giver os et stedse nøjagtigere kendskab til systemets begyndelsestilstand. I kvanteteorien

derimod optræder et helt nyt, ukontrollerbart element ved enhver iagttagelse som følge af den endelige vekselvirkning med målemidlet. Som det fremgår af de ovenstående betragtninger, er jo målingen af en partikels stedkoordinater ikke blot forbundet med en endelig ændring af de dynamiske variable; men fastlæggelsen af partiklens sted rummer altid et fuldstændigt brud på den kausale beskrivelse af dens dynamiske forhold, ligesom kendskabet til dens impuls vindes på bekostning af et hul i dens rum-tidslige beskrivelse. Netop denne omstændighed giver et tydeligt indtryk af den komplementære karakter, som den kvanteteoretiske beskrivelse af de atomare fænomener udviser, og som kan anses for en umiddelbar følge af modsætningen mellem kvantepostulatet og den af iagttagelsesbegrebet krævede adskillelse mellem genstand og målemiddel.

KORRESPONDENSPRINCIP OG MATRIXTEORI

Indtil nu har vi kun betragtet visse almindelige træk af kvanteteoriens væsen. Ifølge sagens natur er det imidlertid en hovedopgave at formulere love for vekselvirkningen mellem de genstande, der symboliseres ved abstraktionerne frie partikler og stråling. Udgangspunkter for denne formulering har problemet om atomernes bygning afgivet. Som bekendt har det her været muligt allerede ved hjælp af en simpel anvendelse af klassiske begreber i direkte tilknytning til kvantepostulatet at belyse væsentlige sider af erfaringerne. Dette beror fremfor alt på den omstændighed, at man ved disse spørgsmål i stort omfang kan se bort fra en nærmere beskrivelse af processernes forløb i tid og rum. Således gengiver antagelsen af diskrete stationære tilstande og individuelle overgangsprocesser umiddelbart hovedtræk vedrørende forsøgsresultaterne over frembringelsen af atomspektre ved elektronstød eller bestråling.

Ved disse betragtninger kommer modsætningen til den sædvanlige beskrivelsesmåde særlig tydeligt frem derved, at spektrallinier, som efter den klassiske opfattelse måtte antages at hidrøre fra en og samme tilstand af atomet, efter kvantepostulatet tilskrives forskellige mulige overgangsprocesser, over for valget mellem hvilke atomet er stillet. Til trods for denne modsætning

viste det sig muligt at erholde en formel tilslutning til de klassiske forestillinger i de grænsetilfælde, hvor den relative forskel mellem naboltilstandes egenskaber asymptotisk forsvinder, og hvor man ved statistiske anvendelser kan se bort fra diskontinuiteterne. Denne omstændighed tillod ved kvanteteoriens hjælp at opnå en vidtgående forklaring af spektrenes lovmæssigheder i tilknytning til vore almindelige forestillinger om atomernes bygning.

Bestræbelserne for at opfatte kvanteteorien som en rationel almindeliggørelse af de klassiske teorier førte til opstillingen af det såkaldte korrespondensprincip. Anvendelsen af dette princip ved tydningen af de spektrale fænomener hvilede på en symbolsk benyttelse af den klassiske elektrodynamik, ved hvilken de enkelte overgangsprocesser tilordnedes hver sin svingningskomponent i atomdelenes bevægelser beskrevet ved sædvanlig mekanik. Undtagen i den ovennævnte grænse, hvor den relative forskel mellem på hinanden følgende stationære tilstande kan lades ude af betragtning, tillod en sådan stykkevis anvendelse af de klassiske teorier dog kun i visse tilfælde en streng, kvantitativ beskrivelse af fænomenerne. Vi skal her særlig minde om den af Ladenburg og Kramers klarlagte forbindelse mellem den klassiske behandling af dispersionsfænomenerne og de af Einstein udviklede statistiske love for forekomsten af de overgangsprocesser, der ledsager strålingsfænomenerne. Skønt netop Kramers' behandling af dispersionsproblemet gav betydningsfulde bidrag til en følgerigtig udvikling af korrespondensbetragtningerne, er det dog først ved hjælp af de i de senere år skabte kvanteteoretiske metoder blevet muligt almindeligt at gennemføre de i korrespondensprincippet indeholdte bestræbelser.

Som bekendt blev den nye udvikling indledet med et grundlæggende arbejde af Heisenberg, i hvilket det lykkedes ham fuldstændigt at frigøre sig fra det klassiske bevægelsesbegreb. De sædvanlige kinematiske og mekaniske størrelser erstattedes således overalt med symboler, som direkte refererer til de af kvantepostulatet fordrede individuelle processer, idet man i stedet for de mekaniske størrelses fremstilling som summer af svingningskomponenter opererer med matrixskemaer, hvis elementer hvert for sig symboliserer rene svingninger og er tilordnet de mulige

overgange mellem stationære tilstande. På grund af den fordring, at de elementerne tilordnede svingningstal stedse må opfylde spektralliniernes kombinationsprincip, frembyder der sig, som Heisenberg kunne vise, simple regneregler for symbolerne, der tillader en direkte kvanteteoretisk omskrivning af den klassiske mekaniks grundligninger. Denne dristige og sindrige behandling af atomteoriens dynamiske problem viste sig fra første begyndelse af som et yderst kraftigt og frugtbart middel til kvantitativ tydning af eksperimentelle resultater. Ved medvirken af Born, Jordan og Dirac fik teorien hurtigt en formulering, som, hvad indre konsekvens og almindelighed angår, kan kappes med den klassiske mekanik. Det må ved denne teori særlig bemærkes, at det for kvanteteorien karakteristiske element, den Planckske konstant, kun optræder eksplicit i de regneregler, som symbolerne er underkastet. For de matricer, som svarer til kanonisk konjugerede variable i Hamiltonsk forstand, gælder nemlig ikke loven om den kommutative multiplikation, men for to sådanne størrelser q og p gælder ombytningsrelationen

$$pq - qp = \sqrt{-1} \frac{h}{2\pi}, \quad (3)$$

hvis form er et slående udtryk for hele teoriens symbolske karakter. Matrixteorien er ofte blevet betegnet som regning med direkte iagttagelige størrelser. Man må imidlertid betænke, at den beskrevne fremgangsmåde netop tager sigte på problemer, hvor det er muligt ved anvendelsen af kvantepostulatet i vidtgående omfang at se bort fra en rum-tidsbeskrivelse, og hvor derfor spørgsmålet om iagttagelse i sædvanlig forstand træder i baggrunden.

For den videre forfølgelse af korrespondensen mellem kvanteteorien og den klassiske mekanik har betoningen af den af kvantepostulatet betingede, statistiske karakter af den kvanteteoretiske beskrivelse været af afgørende betydning. Et stort fremskridt blev her opnået af Dirac og Jordan, hvem det lykkedes ved en almindeliggørelse af den beskrevne symbolske metode at operere med matricer, der ikke nødvendigvis er ordnede efter de stationære tilstande, men hvor de karakteristiske værdier for hvilke

som helst ombyttelige mekaniske størrelser kan optræde som indices for matrixelementerne. Ligesom i teoriens oprindelige form »diagonalelementerne«, som refererer til en enkelt stationær tilstand, kan tydes som tidsmiddelværdier for den pågældende størrelse, opnår man i den såkaldte transformationsteori ved hjælp af tilsvarende matrixelementer en fremstilling af mere almindelige middelværdier, hvor et antal mekaniske størrelser, der kan siges at karakterisere »tilstanden«, antager foreskrevne værdier, medens de kanonisk konjugerede variable kan antage alle mulige værdier. I tilslutning til de af disse forfattere udviklede metoder såvel som til tanker af Born og Pauli har nu Heisenberg, som allerede nævnt, forsøgt en nærmere analyse af kvanteteoriens fysiske indhold med særligt henblik på den paradoksale karakter af ombytningsrelationen (3). I denne forbindelse har han opstillet den almindelige formel

$$\Delta q \Delta p \sim h \quad (4)$$

som udtryk for den størst mulige nøjagtighed, med hvilken på engang to kanonisk konjugerede mekaniske størrelser kan iagttages. Ad denne vej er det lykkedes Heisenberg på overordentlig interessant måde at belyse mange paradokser, som kommer frem ved anvendelsen af kvantepostulatet, og således i vid udstrækning at eftervise den symbolske metodes modsigelsesfrihed.

I forbindelse med den kvanteteoretiske beskrivelses komplementære natur må man, som det ofte er fremhævet i det foregående, ved bedømmelsen af modsigelsesfriheden stedse tage såvel iagttagelses- som definitionsmulighederne i betragtning. Netop for dette spørgsmåls klarlæggelse har, som vi skal se, den af Schrödinger udviklede bølgemekaniske metode vist sig overmåde nyttig, idet den også for partikler i vekselvirkning tillader en almindelig anvendelse af superpositionsprincippet og derfor en umiddelbar tilslutning til betragtningerne over stråling og frie partikler. I det følgende skal vi komme tilbage til bølgemekanikkens forhold til den almindelige formulering af kvantelovene ved hjælp af transformationsteorien.

BØLGEMEKANIK OG KVANTEPOSTULAT

Ved sine betragtninger over bølgebeskrivelsen af de materielle partikler har allerede de Broglie henvist til muligheden af at anskueliggøre atomets stationære tilstande som et interferensfænomen af de til de bundne elektroner hørende fasebølger. Ganske vist førte dette synspunkt i kvantitativ henseende foreløbig ikke ud over de ældre på anvendelsen af klassiske begreber hvilende kvanteteoretiske metoder, til hvis udvikling særlig Sommerfeld har bidraget. Det lykkedes imidlertid Schrödinger at skabe en bølgeteoretisk metode, som har åbnet nye udsyn, og som har været af afgørende betydning for atomteoriens store fremskridt i den sidste tid. Som bekendt giver den Schrödingerske bølgelignings egensvingninger en simpel fremstilling af atomets stationære tilstande, hvorved enhver tilstands energi er forbundet med den tilordnede svingningsperiode ved den almindelige kvanterelation ($h\nu$). Ligeledes giver en optælling af egensvingningernes knudepunkter en simpel tydning af begrebet kvantetal, som allerede optrådte i de ældre teorier, men som i matrixformuleringen midlertidigt var forsvundet. Schrödinger var endvidere i stand til for enhver løsning af bølgeligningen at angive en kontinuert elektrisk ladnings- og strømtæthed, som, når det drejer sig om en egensvingning, gengiver atomets elektrostatiske og magnetiske egenskaber i den tilsvarende stationære tilstand. Til en superposition af to egenløsninger svarer på samme måde en kontinuert fordeling af elektriske svingninger, der efter den klassiske elektrodynamik ville give anledning til en udstråling, hvis beskaffenhed, hvad svingningstal og intensitet angår, nøje svarer til de slutninger vedrørende overgangsprocessen mellem de to tilstande, som kvantepostulatet og den af matrixteorien formulerede korrespondens forlanger. Af stor betydning for den følgende udvikling var endvidere Borns på grundlag af den Schrödingerske metode udførte undersøgelser over problemet om sammenstød mellem atomer og frie elektriske partikler. Navnlig lykkedes det ham at give en statistisk tydning af bølgefunktionerne, som tillader at beregne sandsynligheden for de af kvantepostulatet fordrede individuelle overgangsprocesser mellem stationære tilstande. Herved opnåedes også en bølgemekanisk for-

mulering af Ehrenfests adiabatprincip, hvis frugtbarhed særlig tydeligt fremgår af Hunds lovende undersøgelser over problemet om molekyledannelsen.

Med henblik på disse resultater har Schrödinger udtalt det håb, at en konsekvent udvikling af bølge teorien ville gøre det muligt helt at undgå den i kvantepostulatet indeholdte irrationa- lité og nå til en beskrivelse af atomfænomenerne efter de klas- siske teories retningslinier. Som støtte for denne opfattelse har Schrödinger fremhævet at vi, hver gang det ifølge kvantepostu- latet drejer sig om en diskontinuert energiudveksling mellem ato- mer, i bølge teorien har at gøre med et simpelt resonansproblem. I særdeleshed skulle forestillingen om de individuelle stationære tilstande være en illusion og deres anvendelighed kun en illu- stration til den nævnte resonans. Det må imidlertid bemærkes, at der ved det nævnte resonansproblem er tale om et mekanisk system, der er strengt afsluttet, og som altså efter den her hæv- dede opfattelse unddrager sig enhver iagttagelse. Overhovedet er bølgemeknikken, ligesom matrixteorien, ifølge denne opfattelse at betragte som en til kvanteteoriens væsen afpasset, symbolsk omskrivning af den klassiske mekaniks bevægelsesproblem, der kun kan tydes ved eksplicit anvendelse af kvantepostulatet. Iøvrigt kan de to formuleringer af vekselvirkningsproblemet med hen- blik på deres udgangspunkter – henholdsvis bølge- og partikel- opfattelsen af de frie individer – betegnes som komplementære. Dette forhold betinger også den tilsyneladende modsætning, som består ved anvendelsen af energibegrebet i de to teorier.

De principielle vanskeligheder, som stiller sig i vejen for en rum-tidslig beskrivelse af et system af partikler i vekselvirkning ved hjælp af klassiske begreber, følger direkte af superpositions- princippet uundværlighed ved beskrivelsen af de individuelle partiklers forhold. Som vi har set, udelukker allerede ved en fri partikel kendskabet til impuls og energi en nøjagtig anvendelse af rum-tidskoordinater. Dette fører med sig, at en umiddelbar anvendelse af energiprincippet i tilslutning til den klassiske fore- stilling om et systems potentielle energi er udelukket. I den Schrödingerske bølgeligning er nu disse vanskeligheder undgået derved, at det klassiske udtryk for Hamilton-funktionen erstattes med en differentialoperator ved hjælp af formlen

$$p = \sqrt{-1} \frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad (5)$$

hvor p betegner en generaliseret impulskomponent og q den kanonisk konjugerede variable. Herved betragtes den negative værdi af systemets energi som konjugeret til tiden. I bølgeligningen optræder altså såvel tid og rum som energi og impuls foreløbig kun som rent formelle størrelser.

Den Schrödingerske metodes symbolske karakter fremgår ikke blot deraf, at dens simpelhed ligesom matrixmetodens væsentligt beror på brugen af imaginære aritmetiske størrelser. Men allerede af den grund kan der ikke være tale om en umiddelbar forbindelse med vore sædvanlige anskuelsesformer, at det ved bølgeligningen fremstillede »geometriske« problem ikke er knyttet til det sædvanlige tredimensionale rum, men til det såkaldte koordinatrum, hvis dimensionstal er lig antallet af systemets frihedsgrader. Iøvrigt er formuleringen af vekselvirkningsproblemet ved den Schrödingerske bølgeligning ligesåvel som kvanteteoriens matrixformulering underkastet den begrænsning, at der ved det til grund liggende klassisk-mekaniske problem ses bort fra den af relativitetsteorien fordrede endelige udbredelseshastighed af alle kraftvirkninger.

Ved vekselvirkningsproblemet kan fordringen om anskuelighed i tilslutning til rum-tidsbilleder også næppe kaldes berettiget. Alle vore erfaringer om atomernes egenskaber beror jo, for så vidt de ikke angår deres bevægelse som helhed, udelukkende på deres strålings- og stødreaktioner. Tydningen af iagttagelserne fører derfor altid i sidste instans til en betragtning af stråling i det tomme rum eller af frie materielle partikler; på disse abstraktioner hviler vor hele rum-tidsopfattelse af fænomenerne så vel som definitionen af begreberne impuls og energi. Ved bedømmelsen af sådanne hjælpemidlers anvendelse kan det kun komme an på modsigelsesfrihed, hvorved hensyn fremfor alt må tages til definitions- og iagttagelsesmulighederne.

Når den Schrödingerske bølgelignings egensvingninger giver en velegnet fremstilling af atomets stationære tilstande, er det netop fordi de i forbindelse med den almindelige kvanterelation (1) tillader en entydig definition af systemets energi. Dette kræ-

ver imidlertid en vidtgående resignation med hensyn til rumtidsbeskrivelsen, der, som vi skal se, udelukker enhver mulighed for at forbinde et nærmere kendskab til de enkelte partiklers forhold i atomet med en modsigelsesfri anvendelse af begrebet stationære tilstande. Ved problemer, hvor en forfølgelse af atomdelene i tid og rum indgår som et væsentligt led ved iagttagelsernes tydning, er vi henvist til en undersøgelse af bølgeligningens almindelige løsning, som fremkommer ved en superposition af egenløsninger. Det drejer sig her om en komplementaritet af definitionsmulighederne af ganske samme art som ved det tidligere betragtede spørgsmål om lysets og de frie materielle partiklers egenskaber. Medens definitionen af individernes energi og impuls var knyttet til begrebet harmonisk elementarbølge, hvilede, som vi så, enhver beskrivelse af fænomenerne i rum og tid på en betragtning af de interferenser, som finder sted inden for en gruppe af sådanne elementarbølger. Også i det her omhandlede tilfælde lader overensstemmelsen mellem iagttagelsesmulighederne og definitionsmulighederne sig direkte efterse.

Ifølge kvantepostulatet vil en iagttagelse, der kan belære os om de enkelte atomdeles forhold, altid medføre en ændring af atomets tilstand. Som fremhævet af Heisenberg, vil denne ændring, når det gælder atomer i stationære tilstande med lave kvantetal, endogså i almindelighed bestå i en udstødning af den betragtede elektron af atomet. En bestemmelse af elektronens »bane« i atomet ved gentagne iagttagelser er altså i sådanne tilfælde udelukket. Dette hænger sammen med den omstændighed, at man af egensvingninger med få knuder ikke kan opbygge en bølgegruppe, som blot tilnærmelsesvis kan fremstille en partikels »bevægelse«. Beskrivelsens komplementære natur kommer imidlertid fremfor alt til udtryk derved, at en entydig fortolkning af iagttagelser over partiklernes forhold i atomet altid må bero på, at man under iagttagelsesprocessen kan se bort fra vekselvirkningen og betragte partiklerne som frie. Dette fordrer imidlertid, at processens varighed er kort i forhold til atomets naturlige perioder og medfører derfor en usikkerhed i vort kendskab til den iagttagelsen ledsagende energiændring, som er stor i forhold til energidifferenserne mellem på hinanden følgende stationære tilstande.

Ved bedømmelsen af iagttagelsesmulighederne må man overhovedet huske på, at de bølgemekaniske løsninger kun kan tillægges en anskuelig betydning, for så vidt de lader sig beskrive ved hjælp af begrebet frie partikler. Netop her kommer forskellen mellem den klassiske mekanik og den kvanteteoretiske behandling af vekselvirkningsproblemet tydeligt frem. I den førstnævnte teori er jo et sådant forbehold unødvendigt, da en umiddelbar »realitet« her tilskrives partiklen, uafhængigt af om den er fri eller bundet. Denne omstændighed må særlig tages i betragtning ved spørgsmålet om en modsigelsesfri anvendelse af den Schrödingerske elektricitæthed som mål for sandsynligheden af elektronernes tilstedeværelse inden for bestemte rumområder i atomet. Med henblik på det nævnte forbehold er denne anvendelse ensbetydende med den antagelse, at sandsynligheden for en fri partikels tilstedeværelse bestemmes ved den til bølgefeltet hørende elektricitæthed, på tilsvarende måde som sandsynligheden for et lyskvantums tilstedeværelse bestemmes af den bølgeteoretisk beregnede strålingstæthed.

Som allerede nævnt, har den Dirac-Jordanske transformations-teori, ved hvis hjælp Heisenberg har formuleret sin almindelige usikkerhedsrelation (4), givet os midler i hænde til en almen, modsigelsesfri udnyttelse af de klassiske begreber i kvanteteorien. I denne teori har også den Schrödingerske bølgeligning fundet en lærerig anvendelse. Denne lignings egenløsninger optræder nemlig som hjælpefunktioner ved transformationen fra matricer, hvor systemets energiværdier benyttes som indices, til sådanne hvor partiklens rumkoordinater optræder som indices. I denne forbindelse er det også af interesse at nævne, at det for nylig er lykkedes Jordan og Klein ud fra en bølgefremstilling af de enkelte partikler at give en formulering af vekselvirkningsproblemet i overensstemmelse med den Schrödingerske bølgeligning. De benytter her en symbolsk fremgangsmåde, som slutter sig til den af Dirac i tilknytning til matrixteorien udviklede dybtgående behandling af strålingsproblemet, til hvilken vi nedenfor skal komme tilbage.

DE STATIONÆRE TILSTANDES REALITET

Ved begrebet stationære tilstande har vi, som allerede nævnt, at gøre med en karakteristisk anvendelse af kvantepostulatet. Dette begreb fordrer ifølge sin natur, at der ses fuldstændig bort fra en tidsbeskrivelse, hvad der jo ud fra det her indtagne synspunkt netop også er betingelsen for en entydig definition af atomets energi. Strengt taget fordrer begrebet stationær tilstand udelukkelsen af enhver ydre vekselvirkning med individer der ikke hører til systemet. At der tilskrives et sådant afsluttet system en bestemt energiværdi, kan opfattes som et umiddelbart udtryk for den i energisætningen indeholdte kausalitetsfordring. Heri ser vi berettigelsen af den til grund for anvendelsen af kvantepostulatet på spørgsmålet om atomernes bygning liggende antagelse om de stationære tilstandes supramekaniske stabilitet, ifølge hvilken atomet før og efter enhver ydre indvirkning befinder sig i en veldefineret stationær tilstand.

Ved bedømmelsen af de velkendte paradokser, som denne antagelse fører med sig ved beskrivelsen af stød og strålingsreaktionerne, er det væsentligt at tage hensyn til den ved relationen (2) udtrykte begrænsning af reaktionsmidlernes definitionsmuligheder. Ifølge denne relation forlanger en definition af de reagerende individers energi, som er tilstrækkelig nøjagtig til at man kan tale om energibevarelse ved reaktionen, at det tilhørende tidsinterval er langt i forhold til den periode, der ifølge formel (1) er tilordnet overgangsprocessen mellem de pågældende stationære tilstande. Dette forhold gør sig på interessant måde gældende ved betragtningen af de processer, som finder sted ved gennemgang af hurtigt bevægede partikler gennem et atom. Ifølge den sædvanlige kinematik ville jo her den effektive stød-tid være lille i forhold til atomets naturlige periode, og det kunne derfor synes forbundet med principielle vanskeligheder at forene energisætningen med antagelsen om de stationære tilstandes stabilitet. I bølgefremstillingen derimod er den reaktionstid, der kommer i betragtning, direkte forbundet med nøjagtigheden af vort kendskab til den stødende partikels energi, og der kan aldrig blive tale om en modstrid med energisætningen. I sammenhæng med en diskussion om paradokser af den art har Campbell fore-

slået at opfatte tidsbegrebet selv som væsentlig statistisk. Ifølge den her hævdede opfattelse, hvorefter rum-tidsbeskrivelsen er udtryk for en på de frie individers almindelige forhold grundet abstraktion, turde en sådan principiel adskillelse af begreberne tid og rum allerede på grund af relativitetsfordringen ikke være gennemførlig. Tidens særstilling i forbindelse med begrebet stationære tilstande hidrører, som vi har set, kun fra de foreliggende problemers særlige art.

Anvendelsen af begrebet stationære tilstande forlanger, at det ved enhver iagttagelse – f. eks. ved hjælp af stød eller strålingsreaktioner – som tillader at skelne mellem de forskellige stationære tilstande, er berettiget at se bort fra atomets forhistorie. Ved første øjekast kunne det se ud som en vanskelighed, at de symbolske kvanteteoretiske metoder tilskriver enhver stationær tilstand en svingningsfase, som i strid med de stationære tilstandes idé tilsyneladende rummer muligheden for en forbindelse med tidligere indvirkninger på systemet. Hvis det overhovedet drejer sig om et tidsproblem, kan der imidlertid aldrig være tale om et strengt afsluttet system. Anvendelsen af rene egensvingninger ved tydingen af iagttagelserne er blot en hensigtsmæssig idealisation, som ved en nøjere diskussion altid må erstattes med en gruppe af harmoniske svingninger svarende til et endeligt frekvensinterval. Som allerede berørt, er det nu en almindelig følge af superpositionsprincippet, at der ved gruppen som helhed aldrig kan være tale om en fase i den forstand, som det er tilfældet ved de enkelte elementarbølger eller egensvingninger.

Denne fra de optiske instrumenters teori velkendte uagttagelighed af fasen spiller en særlig rolle ved diskussionen af Sterns og Gerlachs forsøg over afbøjning af molekularstråler i et magnetfelt, som afgiver så vigtigt et hjælpemiddel til undersøgelse af enkelte atomers egenskaber. Som Heisenberg har påpeget, er det indlysende, at sådanne forsøg kun tillader at skelne mellem atomer af forskellig orientering i feltet, når strålernes magnetiske afbøjning er større end den spredning af strålerne, som den nødvendige afblænding efter de Broglies bølgeopfattelse må ventes at give anledning til. Som en simpel regning viser, forlanger denne betingelse, at produktet af den tid, som atomerne bruger til at gennemløbe magnetfeltet, med den fra strålingsbundtets

endelige bredde hidrørende ubestemthed i vort kendskab til de enkelte atomers energi i feltet mindst skal være lig med virkningskvantet. Heisenberg så i dette resultat en støtte for relationen (2) angående den reciprokke usikkerhed hvormed vi kan angive energi og tid. Det drejer sig dog ikke her om en egentlig måling af atomets energi til en given tid. Da imidlertid perioden for atomets egensvingninger i feltet er forbundet med dets totale energi ved den almindelige relation (1), ser vi, at den nævnte betingelse for adskillelsen netop betyder tabet af vort kendskab til fasen. Denne omstændighed tillader at undgå de tilsyneladende modsigelser, som visse ofte diskuterede, af Heisenberg nævnte tankeeksperimenter vedrørende resonansstrålingsfænomenerne frembyder.

Når vi i det foregående har sammenlignet et atom med et afsluttet system, er dette ensbetydende med, at vi har set bort fra strålingsemissionen, som også uden en ydre indvirkning sætter en grænse for de stationære tilstandes levetid. At en sådan for-sømmelse er berettiget ved mange anvendelser, hænger sammen med, at den kobling mellem atomer og strålingsfelt, som man efter den klassiske elektrodynamik måtte antage, i almindelighed er svag i forhold til koblingen mellem atomets dele. Ved beskrivelsen af atomets tilstand er det derfor muligt i vid udstrækning at lade strålingens tilbagevirkning ude af betragtning, idet man ser bort fra den uskarphed i energiværdierne, der i overensstemmelse med relationen (2) bestemmes ved de stationære tilstandes levetid. Det er netop dette forhold, der muliggør en simpel korrespondensmæssig anvendelse af den klassiske elektrodynamik, når det gælder om at drage slutninger med hensyn til strålingens beskaffenhed. Dette var da også udgangspunktet for behandlingen af strålingsproblemet efter de nye kvanteteoretiske metoder i tilknytning til Heisenbergs oprindelige overvejelser. En lærerig analyse af den Schrödingerske behandling af strålingsfænomenerne, som støtter sig til korrespondensprincippet, er nylig givet af Klein. Ved den mere indgående af Dirac begrundede behandling bliver strålingsfeltet derimod regnet med til det betragtede, afsluttede system. Derved blev det muligt på følgerigtig måde at tage strålingsprocessernes af kvanteteorien forlangte individuelle karakter i betragtning og at opbygge en

dispersionsterori, i hvilken der tages hensyn til spektralliniernes endelige bredde. Den vidtgående opgivelse af rum-tidsbilleder, som kendetegner denne behandling, afgiver et slående eksempel på den uundgåeligt komplementære karakter af den kvanteteoretiske beskrivelse. Dette hænger nøje sammen med de allerede nævnte store afvigelser fra den kausale beskrivelsesmåde, som ved strålingsfænomenerne ytrer sig deri, at atomerne ved udsendelsen af spektrenes linier i almindelighed er stillet foran et valg imellem forskellige mulige overgangsprocesser.

Med henblik på den af korrespondensprincippet fordrede asymptotiske tilslutning af atomernes egenskaber til den klassiske elektrodynamik kunne det måske føles som en vanskelighed, at begrebet stationære tilstande og beskrivelsen af de enkelte atomdeles forhold gensidig udelukker hinanden. Denne tilslutning betyder jo, at man i de store kvantetals område, hvor den relative forskel mellem på hinanden følgende stationære tilstande asymptotisk forsvinder, kan gøre rede for elektronernes forhold ved hjælp af mekaniske billeder. Her drejer det sig dog ingenlunde om en gradvis overgang til den klassiske teori, hvor kvantepostulatet lidt efter lidt bliver overflødigt. Tværtimod hviler de slutninger, som man ved hjælp af de klassiske billeder kunne drage af korrespondensprincippet, netop på opretholdelsen af begrebet stationære tilstande og af de individuelle overgangsprocesser også i denne grænse.

Ved dette spørgsmål fik netop de nye metoder en lærerig anvendelse. Som Schrödinger har vist, er det muligt i det omhandlede område ved superposition af egensvingninger at opbygge bølgegrupper, hvis udstrækning er lille i forhold til atomets »størrelse«, og hvis forplantning kommer de klassiske forestillinger om bevægede materielle partikler vilkårlig nær, når kvantetallene tages tilstrækkelig store. I det særlige tilfælde, hvor man har med en harmonisk oscillator at gøre, kunne han vise, at sådanne bølgegrupper endogså for ubegrænsede tider holder sammen og svinger frem og tilbage på en måde, som svarer til det klassiske bevægelsesbillede. Netop i denne omstændighed så Schrödinger en støtte for håbet om at opbygge en ren bølge-teori for materien uden benyttelse af kvantepostulatet. Som Heisenberg nærmere har gjort rede for, danner imidlertid de simple

forhold ved de betragtede oscillatorer en undtagelse, som hænger sammen med den tilsvarende klassiske bevægelses rent harmoniske natur. Endvidere er der efter problemets art her slet ikke tale om gradvis overgang til en bevægelse af frie partikler. I det almindelige tilfælde vil bølgegrupperne lidt efter lidt udbrede sig over atomets hele område, således at en bundet elektrons bevægelse kun kan følges under et antal omløb, som er af samme størrelsesorden som de kvantetal, der er tilordnet egensvingningerne. Dette spørgsmål er blevet nærmere undersøgt i et nylig udkommet arbejde af Darwin, som bringer mange lærerige eksempler på bølgegrupperes forhold. Fra matrixteoriens standpunkt har Kennard gennemført en behandling af lignende problemer.

Vi møder således her igen den modsætning mellem det bølge-teoretiske superpositionsprincip og antagelsen om smådelenes individualitet, som vi allerede har lært at kende ved de frie partikler. Tillige tilbyder den asymptotiske tilslutning til den klassiske mekanik, som ikke kender nogen principiel forskel på frie og bundne partikler, en særlig simpel illustration til de foregående betragtninger over den modsigelsesfrie anvendelse af begrebet stationære tilstande. Som vi har set, fordrer eftervisningen af et atoms tilstedeværelse i en bestemt stationær tilstand en ubestemthed i tidsbeskrivelsen af samme størrelsesorden som de perioder, som er tilordnet overgangsprocesserne mellem de pågældende stationære tilstande. I de høje kvantetals område kan disse perioder nu netop tydes som omløbsperioder, og vi ser altså, at det også her er udelukket at opnå en kausal forbindelse mellem iagttagelser, der tillader påvisningen af en bestemt stationær tilstand, og tidligere iagttagelser over de enkelte partiklers forhold i atomet.

Sammenfattende kan vi vel sige, at der inden for deres anvendelsesområde tilkommer begreberne stationære tilstande og individuelle overgangsprocesser ligeså megen eller ligeså lidt realitet som de individuelle partikler selv. Såvel i det ene som i det andet tilfælde drejer det sig om udtryk for den til rum-tidsbeskrivelsen komplementære kausalitetsfordring, hvis følgerigtige anvendelse kun begrænses af de pågældende begrebers definitionsmuligheder.

PROBLEMET OM ELEMENTARPARTIKLERNE

Under hensyntagen til det af kvantepostulatet fordrede træk af komplementaritet synes det virkelig muligt ved hjælp af de symbolske metoder at opbygge en modsigelsesfri beskrivelse af de atomare fænomener, som kan opfattes som en naturlig almindeliggørelse af den sædvanlige kausale rum-tidsbeskrivelse. Denne opfattelse betyder imidlertid ikke, at den klassiske elektronteori simpelthen kan betragtes som et grænsetilfælde, svarende til en forsvindende ringe værdi for virkningskvantet. Den på grundlag af elektronteorien tilstræbte beskrivelse af erfaringerne hviler nemlig på antagelser, som næppe kan skilles fra kvanteteoriens problemkreds. En påmindelse herom giver allerede de bekendte vanskeligheder, som de elektriske elementarpartiklers individualitet bereder de sædvanlige mekaniske og elektrodynamiske principper. Også gravitationsteorien, sådan som den er blevet formuleret i den almindelige relativitetsteori, har i denne henseende ikke opfyldt de til den nærede forhåbninger. En tilfredsstillende løsning af de her berørte spørgsmål kan man vel først vente af en følgerigtig omtydning af den almindelige feltteori, i hvilken det elektriske elementarkvantum har fundet sin naturlige plads, som udtryk for det træk af individualitet, som kendetegner kvanteteorien. Fornylig har Klein henvist til muligheden af at forbinde dette problem med den af Kaluza indførte 5-dimensionale, sammenfattende fremstilling af elektromagnetisme og gravitation, i hvilken teori elektricitetens bevarelse fremtræder som et analogon til bevarelsessætningerne for energi og bevægelsesmængde. Ligesom de sidstnævnte begreber ved beskrivelsen af de atomare fænomener optræder som komplementære til rum-tidsbeskrivelsen, vil man, som Klein har fremhævet, efter denne teori sige, at den sædvanlige 4-dimensionale beskrivelses hensigtsmæssighed såvel som dens symbolske, kvanteteoretiske udnyttelse væsentligt beror på, at elektricitetsladningen altid optræder som vel defineret elementarkvantum, sådan at den konjugerede femte dimension derfor ikke direkte indgår i tydningen af erfaringerne.

Helt bortset fra disse uløste, dybtliggende problemer har den klassiske elektronteori endnu i den sidste tid afgivet grundlag for den videre udbygning af den korrespondensmæssige beskrivelse,

især i forbindelse med den af Compton først udtalte tanke, at man foruden masse og ladning må tilskrive elementarpartiklerne et magnetisk moment, som hidrører fra et ved virkningskvantet fastlagt impulsmoment. Denne antagelse, som af Goudsmit og Uhlenbeck med held blev indført i diskussionen om den anomale Zeeman-effekts oprindelse, har, som særlig Heisenberg og Jordan kunne vise, også bevaret sin frugtbarhed i forbindelse med de nye metoder. Man kan vel endog sige, at magnetelektronhypotesen sammen med det af Heisenberg klarlagte resonansproblem, som optræder i den kvanteteoretiske beskrivelse af atomer med flere elektroner, har bragt den korrespondensmæssige tydning af spektrenes og det periodiske systems lovmæssigheder til en vis afslutning. De principper, der ligger til grund for denne tydning, har tilmed åbnet vejen til at drage slutninger om atomkernens egenskaber. Således er det for nylig lykkedes Dennison, i tilslutning til tanker af Heisenberg og Hund, at vise hvorledes de vanskeligheder, som hidtil var forbundet med forklaringen af brintens varmfylde ved lave temperaturer, kan undgås, når man antager, at også protonen har et impulsmoment af samme størrelse som elektronen. På grund af dets større masse må man imidlertid tilskrive protonen et langt mindre magnetisk moment end elektronen.

De hidtidige metoders utilstrækkelighed overfor elementarpartiklernes problem kommer ved de lige omtalte spørgsmål frem derved, at de ikke tillader en entydig begrundelse af det af Pauli opstillede såkaldte udelukkelsesprincip, der åbenbarer så ejendommelig en forskel mellem de elektriske elementarpartikler og de af lyskvanteforestillingen symboliserede »individer«. I dette princip, som har været overordentlig frugtbart såvel for problemet om atomernes bygning som for den nyeste udvikling af de statistiske teorier, har vi jo at gøre med en af flere tænkelige muligheder, som hver for sig tilfredsstiller korrespondensfordringerne. Iøvrigt møder vi ved magnetelektronproblemet et særlig lærerigt eksempel på den vanskelighed, det volder i kvanteteorien at tilfredsstille relativitetsfordringen. Således var det hidtil ikke muligt at bringe Darwins og Paulis iøvrigt så lovende forsøg på en til behandling af dette problem egnet almindeliggørelse af de kvanteteoretiske metoder i overensstemmelse med Thomas' for

forklaringen af de eksperimentelle resultater så væsentlige relativitetskinematiske betragtninger. I den allerseneste tid er det imidlertid lykkedes Dirac med held at angribe problemet om den magnetiske elektron ved hjælp af en ny, yderst sindrig udvidelse af den symbolske metode, der i alle enkeltheder gør rede for de pågældende spektrale fænomener og samtidig tilfredsstiller relativitetsfordringen. Dette angreb hviler ikke blot som de tidligere fremgangsmåder på indførelsen af en kompleksitet, der er kendetegnet ved brugen af imaginære størrelser, men benytter i selve grundligningerne tallegemer af en endnu højere kompleksitetsgrad.

Ifølge sin natur forudsætter allerede formuleringen af relativitetsargumentet den for de klassiske teorier ejendommelige forening af rum-tidskoordinationen med kausalitetsfordringen. Vi må derfor ved den følgerigtige tilpasning af relativitetsfordringen til kvantepostulatet være forberedt på en endnu videregående opgivelse af anskuelighed i sædvanlig forstand end ved de her omtalte, kvanteteoretiske metoder. Vi befinder os her på den af Einstein betrædte vej, hvor det gælder den gradvise tilpasning af vore fra sansefornemmelserne stammende anskuelsesformer til vort efterhånden uddybede kendskab til naturlovene. De vanskeligheder, som vi møder på denne vej, hidrører fremfor alt derfra, at så at sige hvert ord i vort sprog er knyttet til disse anskuelsesformer. I kvanteteorien møder denne vanskelighed os straks ved spørgsmålet om uundgåeligheden af det træk af irrationalitet som kendetegner kvantepostulatet. Jeg håber imidlertid, at begrebet komplementaritet vil være vel egnet til at karakterisere den bestående situation, som fremviser en dyb analogi med de almindelige vanskeligheder for menneskelig begrebsdannelse, som vor skelnen mellem subjekt og objekt betinger.

6.2 Bohr-Einstein dialogen.

Den erkendelsesteoretiske fortolkning af kvanteteorien, således som den blev præsenteret af Bohr ved Como-kongressen, blev kendt som Københavnerfortolkningen eller komplementaritetfortolkningen, og den blev i vidtstrakt grad anerkendt og accepteret af de fleste teoretiske skoler.

Den skulle imidlertid konfronteres med en varig indsigelse fra en lille kreds, der anført af Einstein principielt fastholdt at naturen var kausal bestemt, og at kvanteteorien derfor var en ufuldstændig teori.

Denne holdning deltes også af bl.a. Schrödinger og de Broglie - bølgemekanikkens skabere - og især Schrödinger udtrykte meget klart sin holdning ved et besøg i Kbh. i sep. 26: "hvis man er nødt til at acceptere de forbandede kvantespring så fortryder jeg, at jeg nogensinde er blevet involveret i dette."

Men det var Einstein, der gennem sin autoritet og originalitet til stadighed inspirerede Bohr til en meningsfyldt dialog - en dialog, der blev en af fysikhistoriens mest betydningsfulde, og som stadig samler stor interesse.

Bohr-Einstein dialogen forblev indtil midten af 30'erne en intern debat, der foregik med en heftig brevudveksling, samt ikke mindst ved diskussionerne under 2 på hinanden følgende Solvay konferencer i 1927 og 1930.

Solvay konferencerne dannede rammen om en international udveksling af nye store resultater i fysikken, og emnet for konferencen i okt. 27 var "elektroner og fotoner", der hentydede til partikel-bølge dualiteten i kvanteteorien.

Bohr-Einstein diskussionen tog udgangspunkt i dette fundamentale aspekt, og den blev afledt af de tankeeksperimentelle, vi har set tidligere i partikel-bølgedualiteten i dobbeltspalte eksperimentet.

Fig. 6.2



Da Einstein i begyndelsen af 30'erne emigrerede til USA, kom Bohr-Einstein dialogen til at antage en helt ny dimension.

Det var med en artikel af Einstein-Podolsky-Rosen (EPR-paradokset) fra 1935, at Einstein's kritik af kvantemekanikken havde nået en bemærkelsesværdig grad af genialitet, der herved førte debatten ud i vide kredse.

Heri hævdede EPR at kvantemekanikken ikke kunne være en fuldstændig teori til beskrivelse af atomare fænomener. Få måneder efter tilbageviste Bohr dette med henvisning til komplementaritetsprincippet.

Det var opfattelsen af fysisk realitet, der skilte de 2 parter, og med dette udvikledes en videnskabsteoretisk diskussion, der fulgte indtil 1982 før et eksperimentelt udslag afkræftede EPR-påstanden, og dermed af-

sluttede en 45 årig lang strid om kvantemekanikkens eksistensgrundlag.

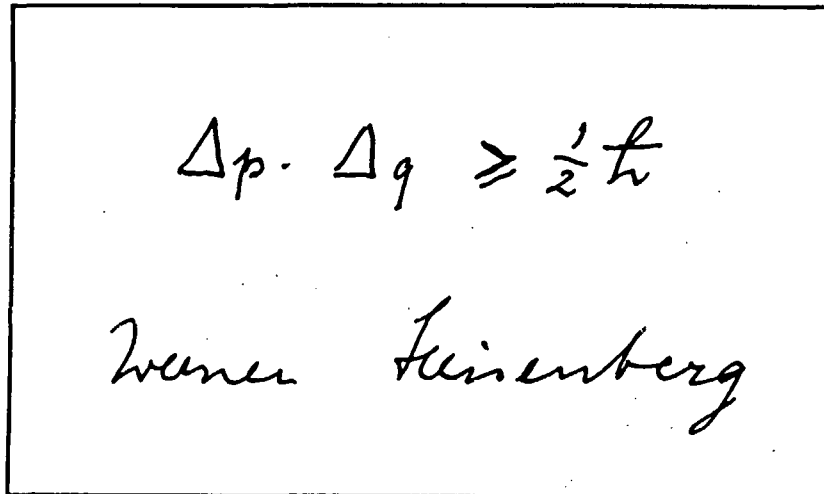


Fig. 6.3

6.2.1 Bohr : Diskussion med Einstein om erkendelses-teoretiske problemer i atomfysikken.

Vi vil afslutte dette kap. med artikel af Bohr fra 1949, der beskriver de fundamentale aspekter i Bohr-Einstein dialogen.

FIFTH SOLVAY CONFERENCE 1927



A. PICCARD E. HENRIOT P. EHRENFEST EG. HERZEN TH. DE DONDER E. SCHROEDINGER E. VERSCHAFFELT W. PAULI W. HEISENBERG R.H. FOWLER L. BRILLOUIN
 P. DEBYE M. KNUDSEN W.L. BRAGG H.A. KRAMERS P.A.M. DIRAC A.H. COMPTON L. de BROGLIE M. BORN N. BOHR
 I. LANGMUIR M. PLANCK Mme. CURIE H.A. LORENTZ A. EINSTEIN P. LANGEVIN CH.E. GUYE C.T.R. WILSON O.W. RICHARDSON
 Arrangé : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL

Fig. 6.4

Diskussion med Einstein om erkendelsesteoretiske Problemer i Atomfysikken

1949

DA udgiveren af serien »Living Philosophers« indbød mig til at skrive en artikel til dette bind, i hvilket samtidens videnskabsmænd ærer Albert Einsteins epokegørende bidrag til den fysiske videnskab og giver udtryk for den taknemmelighed, som hele vor generation føler for den vejledning som hans geni har ydet os, tænkte jeg meget over, hvordan jeg bedst kunne beskrive den inspiration jeg har modtaget fra ham. I den forbindelse er de mange lejligheder ved hvilke jeg gennem årene har haft den store oplevelse med Einstein at diskutere de erkendelsesteoretiske problemer, som den nyere udvikling af atomfysikken har rejst, kommet levende tilbage i mit sind, og jeg har følt, at jeg næppe kunne gøre noget bedre end at forsøge at give en beretning om disse diskussioner, der har betydet så stærk en ansporelse og været af så stor værdi for mig. Jeg håber også, at beretningen må bibringe videre kredse et indtryk af, hvor afgørende en åben meningsudveksling har været for fremskridt på et område, hvor overraskende erfaringer gang på gang har krævet fornyet overvejelse af vore synspunkter.

Lige fra begyndelsen var diskussionernes hovedpunkt spørgsmålet om, hvordan man skal stille sig til den afvigelse fra tilvante principper for naturbeskrivelsen, som kendetegner den nye udvikling af fysikken, der blev indledt i det første år af dette århundrede med Plancks opdagelse af det universelle virkningskvantum. Denne opdagelse, som afslørede et helhedstræk hos naturlovene der går langt ud over den gamle lære om stoffets begrænsede delighed, belærte os om at de klassiske fysiske teorier er idealisationer, som kun finder entydig anvendelse i den grænse, hvor alle optrædende virkninger er store i forhold til kvantet. Det omdiskuterede

problem har været, hvorvidt det afkald på en årsagsbeskrivelse af atomare processer, som bestræbelserne på at finde sig til rette i situationen havde medført, betød en midlertidig afvigelse fra idealer som til syvende og sidst måtte genindføres, eller om vi stod overfor et uigenkaldeligt skridt til opnåelse af den rette harmoni imellem analyse og syntese af fysiske fænomener. For at beskrive baggrunden for vore diskussioner og så klart som muligt belyse argumenterne for de divergerende synspunkter, har jeg følt det nødvendigt i en vis udstrækning at minde om nogle hovedtræk af udviklingen, til hvilken Einstein selv har ydet så afgørende bidrag.

Det var som bekendt den især af Boltzmann klarlagte nære sammenhæng imellem de termodynamiske principper og de for mekaniske systemer med mange frihedsgrader gældende statistiske lovmæssigheder, som var ledetråden for Plancks skarpsindige behandling af varmemstrålingsproblemet, der førte til hans fundamentale opdagelse. Medens Planck i sin undersøgelse hovedsagelig anvendte betragtninger af væsentlig statistisk karakter og med stor forsigtighed undlod at drage definitive slutninger om rækkevidden af de afvigelser fra grundlaget for mekanikken og elektrodynamikken, som kvantets eksistens måtte medføre, var Einsteins store bidrag til kvanteteorien (1905) netop erkendelsen af, hvorledes fysiske fænomener som fotoeffekten direkte kan afhænge af individuelle kvanteeffekter¹. I de samme år, hvor Einstein ved udviklingen af relativitetsteorien skabte et nyt grundlag for den fysiske videnskab, udforskede han med dristig fantasi de nye helhedstræk, som pegede ud over hele den klassiske fysiks begrebsramme.

Med sikker intuition ledtes Einstein således skridt for skridt til den slutning, at enhver strålingsproces består i emission eller absorption af individuelle lyskvanter eller »fotoner« med energi og bevægelsesmængde

$$E = h\nu \text{ og } P = h\sigma, \quad (1)$$

hvor h er Plancks konstant, medens ν og σ henholdsvis er antallet af svingninger pr. tidsenhed og antallet af bølger pr. længdeenhed. Trods fotonforestillingens frugtbarhed medførte den et ganske uforudset dilemma, idet ethvert simpelt korpuskulært billede af

1. A. Einstein, Ann. d. Phys. 17, 132 (1905).

strålingsforplantningen øjensynlig ville være uforeneligt med de interferensvirkninger, som udgør et så væsentligt træk ved strålingsfænomenerne og som kun kan beskrives ved hjælp af bølgebilleder. Dilemmaets alvorlige karakter fremhæves af den omstændighed, at interferenseffekterne er vort eneste middel til at definere begreberne frekvens og bølgelængde, der indgår i selve udtrykkene for fotonens energi og bevægelsesmængde.

I denne situation kunne der ikke blive tale om noget forsøg på at give en på årsagsprincippet hvilende beskrivelse af strålingsfænomenerne, men blot om ved en kombineret udnyttelse af de kontrasterende billeder at beregne sandsynligheder for forekomsten af de individuelle strålingsprocesser. Det er imidlertid meget vigtigt at gøre sig klart at den brug, der under disse omstændigheder gøres af sandsynlighedslove, har et væsentligt andet sigte end den velkendte anvendelse af statistiske betragtninger som et praktisk hjælpemiddel ved redegørelsen for egenskaberne hos mekaniske systemer af kompliceret opbygning. I kvantefysikken har vi ikke at gøre med komplikationer af denne art, men med umuligheden af i den klassiske begrebsramme at indbefatte det særegne træk af udelelighed eller »individualitet«, som kendetegner de elementære processer.

De klassiske fysiske teories svigten ved redegørelsen for atomare fænomener blev yderligere fremhævet ved uddybelsen af vort kendskab til atomernes bygning. Fremfor alt afslørede Rutherfords opdagelse af atomkernen (1911) straks de klassiske mekaniske og elektromagnetiske begrebers uegnethed til at forklare den for atomet så karakteristiske stabilitet. Her frembød kvanteteorien atter en nøgle til afklaringen af situationen, og det viste sig muligt at gøre rede for såvel den atomare stabilitet som de empiriske love for grundstoffernes spektre ved at antage at enhver reaktion af atomet, der medførte en ændring af dets energi, betød en fuldstændig overgang mellem to såkaldte stationære kvantetilstande, og at spektrene fremkom ved en trinvis proces, i hvilken hver overgang er ledsaget af udsendelsen af et monokromatisk lyskvantum med en energi netop svarende til Einsteins foton.

Disse forestillinger, som snart efter blev bekræftet ved forsøg af Franck og Hertz (1914) over excitationen af spektre ved beskydning af atomer med elektroner, rummede et yderligere afkald på den

kausale beskrivelsesmåde, eftersom tydningen af spektrallove åbentbart medfører, at der for et atom i en anslået tilstand i almindelighed vil være mulighed for overgang med fotonudsendelse til den ene eller anden af dets lavere energitilstande. Forestillingen om stationære tilstande er i sig selv uforenelig med enhver forskrift for valget mellem sådanne overgange og giver kun plads for begrebet relative sandsynligheder for de individuelle overgangsprocesser. Den eneste ledetråd ved beregningen af disse sandsynligheder var det såkaldte korrespondensprincip, der udtrykker bestræbelsen på at opnå den nærest mulige forbindelse mellem den statistiske beskrivelse af de atomare processer og de konsekvenser, som man måtte vente af den klassiske teori, der må gælde i den grænse, hvor alle de på ethvert stadium af fænomenernes undersøgelse optrædende virkninger er store i sammenligning med det universelle kvantum.

På den tid var en sammenhængende modsigelsesfri kvanteteori endnu ikke i sigte, men den fremherskende indstilling kan måske bedst belyses af følgende udtalelse i et foredrag af forfatteren fra 1913²:

Jeg håber, at jeg har udtrykt mig så tydeligt, at De vil have opfattet, hvor meget de fremførte betragtninger strider imod den så beundringsværdigt sammenbyggede kreds af forestillinger, som man med rette har benævnt den klassiske elektrodynamik. På den anden side har jeg bestræbt mig for at bibringe Dem det indtryk, at der – netop ved så stærkt at fremhæve denne modstrid – måske er mulighed for med tiden også at bringe en vis sammenhæng i de nyere forestillinger.

Et betydningsfuldt fremskridt i udviklingen af kvanteteorien blev gjort af Einstein selv i 1917 med hans berømte afhandling³ om strålingsligevægten, hvori han viste, at Plancks varmestrålingslov simpelt kunne udledes fra antagelser, der stemte overens med grundforestillingerne i kvanteteorien for atomernes opbygning. Med henblik herpå formulerede Einstein almindelige statistiske regler for forekomsten af strålingsovergange mellem stationære tilstande, idet han ikke alene antog, at der når atomet er udsat for et strålingsfelt vil optræde såvel absorptions- som emissionsprocesser med en sandsynlighed pr. tidsenhed, proportional med strålings-

2. N. Bohr, Fysisk Tidsskrift 12, 97 (1914).

3. A. Einstein, Phys. Zs. 18, 121 (1917).

intensiteten, men at der også uden ydre påvirkning vil forekomme spontane emissionsprocesser med en hyppighed svarende til en vis *a priori* sandsynlighed. I forbindelse med dette sidste punkt fremhævede Einstein på tankevækkende måde den statistiske beskrivelses fundamentale karakter ved at henlede opmærksomheden på analogien mellem antagelserne angående forekomsten af de spontane strålingsovergange og de velkendte love for radioaktive stoffers omdannelser.

I forbindelse med en omhyggelig undersøgelse af termodynamikkens fordringer vedrørende strålingsproblemer understregede Einstein det ovennævnte dilemma endnu stærkere ved at påvise at enhver strålingsproces måtte være »ensrettet« i den forstand, at der ikke alene ved absorptionsprocessen overføres en bevægelsesmængde til atomet svarende til en foton med strålingsforplantningens retning, men at også det emitterende atom vil modtage en tilsvarende impuls i modsat retning, til trods for at bølgebilledet ikke er foreneligt med nogen sådan retningsbestemmelse for emissionsprocessen. Einsteins egen indstilling til disse overraskende slutninger er udtrykt i et afsnit af artiklen (*loc. cit.*, s. 127 f.), der i oversættelse lyder:

Disse egenskaber hos de elementære processer synes at gøre udviklingen af en ren kvanteteoretisk behandling af stråling næsten uundgåelig. Teoriens svaghed er dels at der ikke kan opnås en nærmere forbindelse med bølgeteorien, og dels at tiden og retningen for de elementære processer overlades til tilfældet (*Zufall*); men ikke desto mindre nærer jeg fuld tillid til, at vi er slået ind på den rette vej.

Da jeg havde den store oplevelse at møde Einstein for første gang ved et besøg i Berlin i 1920, var disse fundamentale spørgsmål emnet for vore samtaler. Diskussionerne, som jeg ofte siden er vendt tilbage til i mine tanker, føjede til min beundring for Einstein et dybt indtryk af hans fordomsfrie indstilling. Hans forkærlighed for maleriske vendinger som »spøgelsesbølger (*Gespensterfelder*) der styrer fotonerne«, rummede på ingen måde en tendens til mysticisme, men var snarere udtryk for en dyb humor bag hans skarpsindige bemærkninger. En vis forskel i indstilling og udsyn gjorde sig dog gældende, idet Einstein med sin mesterlige evne til at forbinde tilsyneladende modstridende erfaringer uden at forlade kontinuitet og kausalitet måske var mere tilbøjelig til at opgive

disse idealer end en, for hvem afkald i så henseende stod som den eneste vej til videreførelsen af den umiddelbart foreliggende opgave at sammenfatte de righoldige erfaringer vedrørende atomare fænomener, som dag for dag forøgedes ved udforskningen af dette nye kundskabsområde.

I de følgende år, hvor atomproblemerne tiltrak sig opmærksomhed inden for en hastigt voksende kreds af fysikere, følte de tilsyneladende modsigelser i kvanteteorien stadig stærkere. Betegnende for denne situation er den diskussion, som opdagelsen af Stern-Geerlach-effekten i 1922 gav anledning til. På den ene side støttede denne opdagelse på slående måde forestillingen om stationære tilstande og især den af Sommerfeld på dette grundlag udviklede kvanteteori for Zeeman-effekten; på den anden side stillede opdagelsen, som det så klart blev påvist af Einstein og Ehrenfest, ethvert forsøg på at anskueliggøre et atoms opførsel i et magnetfelt overfor uoverstigelige vanskeligheder⁴. Lignende paradokser rejstes ved Comptons opdagelse (1924) af den ændring af bølgelængden, som ledsager elektroners spredning af røntgenstråler. Som bekendt gav dette fænomen en direkte bekræftelse af Einsteins synspunkter vedrørende overførelsen af energi og bevægelsesmængde ved strålingsprocesser; samtidig var det lige så klart, at intet simpelt billede af et korpuskulært sammenstød kunne give en udtømmende beskrivelse af fænomenet. Under indtrykket af sådanne vanskeligheder blev der endog en tid næret tvivl om bevarelsen af energi og impuls ved de individuelle strålingsprocesser⁵, et synspunkt som imidlertid meget hurtigt måtte forkastes, idet den fuldstændige korrelation mellem fotonens afbøjning og elektronens tilsvarende tilbagestød kunne påvises ved de fortsatte mere forfinede forsøg.

Vejen til klarlæggelse af situationen måtte imidlertid først banes ved udviklingen af en mere sammenhængende kvanteteori. Det første skridt henimod dette mål var deBroglies erkendelse (1925) af at bølge-partikel dualiteten ikke var begrænset til den elektromagnetiske strålings egenskaber, men var lige uundgåelig ved beskrivelsen af materielle partiklers opførsel. Denne opfattelse, som

4. A. Einstein og P. Ehrenfest, *Zs. f. Phys.* 11, 31 (1922).

5. N. Bohr, H. A. Kramers og J. C. Slater, *Phil. Mag.* 47, 785 (1924).

snart efter på overbevisende måde blev bekræftet ved forsøg over interferensfænomener hos elektroner, blev straks hilst af Einstein som allerede tidligere havde gjort opmærksom på en dybtgående analogi mellem egenskaberne hos varmestrålingen og luftarter i den såkaldte udartede tilstand⁶. Den nye tankegang blev med største held videreført af Schrödinger (1926), der i særdeleshed viste, hvorledes et atomart systems stationære tilstande kunne fremstilles som egenløsningerne af en bølgeligning, til hvis opstilling han ledtes af den oprindelig af Hamilton påviste formelle analogi imellem mekaniske og optiske problemer. Kvanteteoriens paradoksale træk var dog hermed på ingen måde opklaret, men fremhævedes snarere af den tilsyneladende modstrid mellem bølgebeskrivelsens superpositionsprincip og det for de elementære atomare processer karakteristiske træk af individualitet.

På samme tid havde Heisenberg (1925) skabt grundlaget for en rationel kvantemekanik, som hurtigt udvikledes ved betydningsfulde bidrag af Born, Jordan og Dirac. I denne teori er indført en formalisme, i hvilken den klassiske mekaniks kinematiske og dynamiske variable erstattedes med symboler underkastet en ikke-kommutativ algebra. Til trods for opgivelse af forestillingen om partikelbaner bibeholdtes Hamiltons kanoniske ligninger, og Plancks konstant optræder kun i ombytningsrelationerne

$$qp - pq = \sqrt{-1} \frac{h}{2\pi}, \quad (2)$$

der gælder for ethvert par af konjugerede variable q og p . Symbolernes repræsentation ved hjælp af matricer med elementer, der henviser til overgange mellem stationære tilstande, muliggjorde for første gang en kvantitativ formulering af korrespondensprincippet. Det må i denne forbindelse erindres, at et vigtigt forberedende skridt hen imod dette mål havde været den især af Kramers udviklede kvanteteori for dispersionsfænomenerne, i hvilken der gøres væsentlig brug af Einsteins almindelige sandsynlighedslove for absorptions- og emissionsprocessers forekomst.

Som Schrödinger snart efter viste, er denne kvantemekaniske formalismes resultater identiske med dem, der opnås ved hjælp af den i matematisk henseende ofte mere bekvemme bølgeteori, og i

6. A. Einstein, Berl. Ber. 261 (1924) samt 3 og 18 (1925).

løbet af de følgende år udvikledes almindelige metoder til statistisk beskrivelse af atomare processer, hvorved det for kvanteteorien særegne træk af individualitet modsigelsesfrit forbandtes med superpositionsprincippet's fordringer. Blandt de mange fremskridt fra denne periode må særlig nævnes, at det viste sig muligt ved hjælp af formalismen at give udtryk for det udelukkelsesprincip, der karakteriserer tilstandene af et system bestående af flere elektroner og som allerede før kvantemekanikkens fremkomst var blevet opstillet af Pauli på grundlag af undersøgelser af atomspektre. Opnåelsen af en kvantitativ beskrivelse af et meget stort erfaringsmateriale kunne ikke lade tvivl om den kvantemekaniske formalismes frugtbarhed og hensigtsmæssighed, men dens abstrakte karakter gav anledning til en udbredt følelse af utilfredshed. Afklaringen af situationen skulle da også kræve indgående undersøgelse af selve iagttagelsesproblemet i atomfysikken.

Dette stadium af udviklingen blev som bekendt indledt i 1927 af Heisenberg, som fremhævede at det kendskab der kan opnås vedrørende et atomart systems tilstand altid vil være behæftet med en særegen »ubestemthed«⁷. Således vil enhver måling af en elektrons position ved hjælp af en eller anden måleanordning, f. eks. et mikroskop i hvilket der gøres brug af højfrekvent stråling, ifølge de fundamentale relationer (1) være forbundet med udveksling af bevægelsesmængde mellem elektronen og apparatet, der bliver desto større jo nøjagtigere stedmålingen foretages. Heisenberg sammenholdt sådanne overvejelser med den kvantemekaniske formalismes fordringer og gjorde opmærksom på, at ombytningsreglen (2) medfører en reciprok begrænsning i fastlæggelsen af to konjugerede variable q og p , udtrykt ved relationen

$$\Delta q \cdot \Delta p \approx h, \quad (3)$$

hvor Δq og Δp er passende definerede spillerum i bestemmelsen af disse variable. Ved at fremhæve den nære forbindelse mellem kvantemekanikkens statistiske beskrivelse og de faktiske målemuligheder er disse såkaldte ubestemthedsrelationer, som Heisenberg viste, yderst betydningsfulde for opklaringen af de paradokser, der er forbundet med forsøgene på at beskrive kvante-effekter ved henvisning til sædvanlige fysiske billeder.

7. W. Heisenberg, Zs. f. Phys. 43, 172 (1927).

De nye fremskridt i atomfysikken blev kommenteret fra forskellig side ved den internationale fysiske kongres, der blev afholdt i september 1927 i Como til minde om Volta. I et foredrag ved denne lejlighed⁸ gjorde jeg mig til talsmand for et synspunkt, som kort kan betegnes »komplementaritet« og som er egnet til at omfatte kvantefænomenernes karakteristiske individualitet og samtidig klarlægge de særegne træk, som iagttagelsesproblemet på dette erfaringsområde udviser. I denne forbindelse er det af største betydning at gøre sig klart, at redegørelsen for alle erfaringer – uanset hvor langt fænomenerne ligger uden for den klassiske fysiske beskrivelses rækkevidde – må udtrykkes ved klassiske begreber. Begrundelsen er simpelthen, at vi med ordet »eksperiment« henviser til en situation, hvor vi kan fortælle andre hvad vi har gjort og hvad vi har lært, og at forsøgsanordningen og måleresultaterne derfor må beskrives i det sædvanlige sprog med passende anvendelse af den klassiske fysiks terminologi.

Dette afgørende punkt, der skulle blive et hovedemne for de diskussioner hvorom der skal berettes i det følgende, medfører umuligheden af en skarp adskillelse mellem atomare objekters opførsel og deres vekselvirkning med de måleinstrumenter som tjener til at definere betingelserne hvorunder fænomenerne optræder. De typiske kvanteeffekters individualitet finder netop udtryk i den omstændighed, at enhver opdeling af fænomenet ville kræve en ændring af forsøgsanordningen med nye muligheder for principiel ukontrollerbar vekselvirkning mellem objekter og måleinstrumenter. Erfaringer opnået under forskellige forsøgsbetingelser kan derfor ikke forbindes i et enkelt billede, men må betragtes som komplementære i den forstand, at fænomenerne kun tilsammen udtømmer de mulige oplysninger om objekterne.

Under disse omstændigheder kan tilskrivelsen af sædvanlige fysiske egenskaber til atomare objekter rumme en ejendommelig flertydighed, således som det fremgår af det omtalte dilemma vedrørende partikel- og bølgeegenskaberne af elektroner og fotoner, hvor vi har at gøre med kontrasterende billeder der hver for sig viser hen til væsentlige sider af erfaringerne. Et lærerigt eksempel på hvorledes de tilsyneladende paradokser løses ved undersøgelse af

8. Atti del Congresso Internazionale dei Fisici, Como, Settembre 1927; på dansk i Atomteori og Naturbeskrivelse, København 1929.

de eksperimentelle betingelser hvorunder de komplementære fænomener optræder, har man i Compton-effekten, hvis modsigelsesfri beskrivelse først syntes at frembyde så store vanskeligheder. Enhver forsøgsanordning egnet til at kontrollere udvekslingen af energi og bevægelsesmængde imellem elektronen og fotonen må nemlig for rum-tidsbeskrivelsen af vekselvirkningen indebære et spillerum tilstrækkeligt for definitionen af de i (1) optrædende bølgetal og frekvenser. Omvendt ville ethvert forsøg på mere nøjagtigt at lokalisere sammenstødet mellem fotonen og elektronen udelukke et nøjere regnskab med energi- og impulsbalancen på grund af den uundgåelige vekselvirkning med de målestokke og ure, der fastlægger rum-tidshenførelsessystemet.

Som det blev betonet i foredraget, frembyder den kvantemekaniske formalisme netop et for den komplementære beskrivelsesmåde egnet matematisk redskab. Vi har jo her at gøre med et rent symbolsk skema, som på korrespondensmæssigt grundlag tillader forudsigelser vedrørende forsøgsresultater der kan opnås under betingelser fastlagt ved hjælp af klassiske begreber. Det må i denne forbindelse erindres, at det selv i ubestemthedsrelationen (3) drejer sig om en konsekvens af formalismen, som det ikke er muligt på entydig måde at fortolke i ord egnede til at beskrive klassiske fysiske billeder. Således giver en sætning som »vi kan ikke kende både bevægelsesmængden og positionen af et atomart objekt« straks anledning til spørgsmål om den fysiske realitet af sådanne attributter til objektet, hvortil svar kun kan gives ved henvisning til betingelserne for den entydige anvendelse af rum-tidsbegreberne på den ene side og de dynamiske bevarelsesætninger på den anden. Medens foreningen af disse begreber i et enkelt billede er grundlaget for den klassiske mekaniks årsagsbeskrivelse, skabes der netop plads til lovmæssigheder uden for denne beskrivelses rækkevidde ved den omstændighed, at studiet af komplementære fænomener kræver forsøgsanordninger, der udelukker hinanden.

Nødvendigheden af i atomfysikken påny at undersøge grundlaget for den entydige brug af elementære fysiske forestillinger minder i mange henseender om den situation, som oprindeligt førte Einstein til at fremhæve iagttagelsesproblemetets afgørende betydning og gav anledning til hans geniale revision af grundlaget for rum-tidskoordinationen, der skulle give vort verdensbillede så stor

en enhed. Uagtet alle nye træk ved betragtningensmåden var det muligt i relativitetsteorien at opretholde årsagsbeskrivelsen i ethvert henførelsessystem; i kvanteteorien tvinges vi imidlertid af den ukontrollerbare vekselvirkning mellem objekter og måleinstrumenter til et afkald selv i sådan henseende. Denne erkendelse rummer dog ingenlunde en begrænsning af den kvantemekaniske beskrivelses rækkevidde, og den i Como-foredraget fremførte tankegang tog netop sigte på at vise, at komplementaritetssynspunktet må betragtes som en rationel almindeliggørelse af selve kausalitetsidealet.

Under diskussionerne i Como savnede vi alle Einsteins tilstedeværelse, men kort efter, i oktober 1927, havde jeg lejlighed til at træffe ham i Bruxelles på Solvay-Instituttets femte fysiske konference, hvis emne var »Elektroner og fotoner«. Ved Solvay-konferencerne havde Einstein fra begyndelsen været en fremtrædende skikkelse, og mange af os mødte med store forventninger for at høre hans reaktion på det seneste stade af udviklingen, der efter vor opfattelse havde bragt vidtgående afklaring af de problemer, som han selv så skarpsindigt havde fremdraget. Under konferencen,

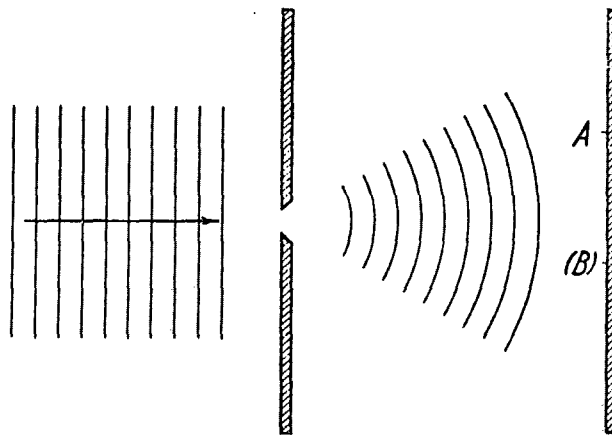


FIG. I

hvor hele emnet blev gennemgået ved bidrag fra mange sider og hvor også de i det foregående omtalte argumenter blev fremsat igen, udtrykte Einstein imidlertid stor betænkelighed ved at den

rum-tidslige årsagsbeskrivelse i så stor udstrækning var opgivet i kvantemekanikken.

For at belyse sin indstilling henviste Einstein ved et af møderne⁹ til det ved fig. 1 illustrerede simple eksempel, hvor en partikel (elektron eller foton) passerer et hul eller en snæver spalte i en skærm, der er anbragt foran en fotografisk plade. På grund af spredningen af den til partiklens bevægelse knyttede bølge, der på figuren er antydnet ved de tynde linier, er det under sådanne betingelser ikke muligt at forudsige hvilket punkt på den fotografiske plade elektronen vil nå, men kun at beregne sandsynligheden for at elektronen ved et eksperiment vil blive fundet inden for et givet område på pladen. Den tilsyneladende vanskelighed som Einstein følte så stærkt er, at der, såfremt elektronen ved eksperimentet bliver iagttaget i et punkt A på pladen, aldrig kan blive tale om at observere nogen virkning af denne elektron i et andet punkt (B), skønt lovene for sædvanlig bølgeudbredelse ikke rummer mulighed for en korrelation mellem to sådanne begivenheder.

Einsteins indstilling gav anledning til ivrige diskussioner inden for en lille kreds, hvori Ehrenfest, der gennem årene havde været en nær ven af os begge, deltog på aktiv og hjælpsom måde. Selvfølgelig stod det os alle klart, at det ovenstående eksempel ikke frembød nogen analogi til anvendelsen af statistik ved behandlingen af komplicerede mekaniske systemer, men snarere mindede om baggrunden for Einsteins egne tidlige slutninger vedrørende individuelle strålingseffekters ensrettethed, der står i så skarp modsætning til et simpelt bølgebillede (jvf. s. 49). Diskussionerne koncentreredes om spørgsmålet om, hvorvidt den kvantemekaniske beskrivelse udtømte mulighederne for at redegøre for de iagttagelige fænomener, eller om, som Einstein fastholdt, undersøgelsen kunne føres videre, og især om der kunne opnås en mere udtømmende beskrivelse ved i betragtningen at inddrage den detaljerede energi- og impulsbalance i individuelle processer.

For at forklare Einsteins tankegang er det oplysende her at betragte nogle simple træk ved bevægelsesmængde- og energibalancen i forbindelse med lokalisation af en partikel i rum og tid. Til dette formål skal vi undersøge det simple tilfælde, hvor en

9. Institut International de Physique Solvay, Rapport et discussions du 5e Conseil, Paris 1928, 253 ff.

partikel går igennem et hul i en skærm, uden eller med en lukker til at åbne og tildække hullet, som antydnet i henholdsvis fig. 2a og 2b. De ækvidistante parallelle linier til venstre i figurerne angiver det plane bølgetog svarende til bevægelsestilstanden af en partikel,

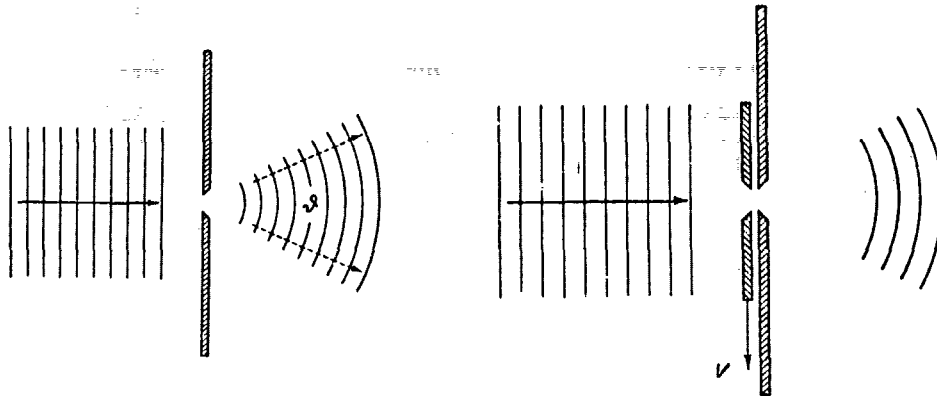


FIG. 2a

FIG. 2b

der inden ankomsten til skærmen har en impuls P knyttet til bølgetallet σ ved den anden af ligningerne (1). I overensstemmelse med at bølgerne afbøjes når de passerer hullet, er partiklens bevægelsestilstand til højre for skærmen repræsenteret ved et sfærisk bølgetog med en passende defineret angulær apertur ϑ og, i tilfældet på fig. 2b, også med en begrænset radial udstrækning. Beskrivelsen af denne tilstand indebærer derfor en vis uskarphed Δp i partiklens bevægelsesmængdekomponent parallel med skærmen og, i tilfælde af en blænder med lukker, yderligere et spillerum ΔE for den kinetiske energi.

Eftersom et mål for uskarpheden Δq i partiklens lokalisering i skærmens plan er givet ved hullets radius a , og da $\vartheta \approx 1/\sigma a$, får vi ved benyttelse af (1) netop $\Delta p \approx \vartheta P \approx h/\Delta q$, i overensstemmelse med ubestemthedsrelationen (3). Dette resultat kunne naturligvis udledes direkte ved at bemærke at den begrænsede udstrækning af bølgefeltet i spalten vil medføre et spillerum $\Delta \sigma \approx 1/a \approx 1/\Delta q$ for bølgetallets komponent parallel med skærmens plan. På lignende måde er spredningen af frekvenserne af de harmoniske komponenter i det begrænsede bølgetog i fig. 2b åbenbart $\Delta \nu \approx 1/\Delta t$, hvor Δt er tidsintervallet i hvilket hullet er åbent

og således repræsenterer spillerummet for tiden for partiklens passage gennem blænderen. Fra (1) får vi derfor

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx h, \quad (4)$$

der atter er i overensstemmelse med relationen (3) for de to konjugerede variable E og t .

Ud fra bevarelsesætningerne hidrører de uskarpheder, der optræder i beskrivelsen af partiklens tilstand efter passagen gennem hullet, fra mulighederne for udveksling af bevægelsesmængde og energi med skærmen eller lukkeren. I henførelsessystemet i fig. 2a og 2b kan man se bort fra skærmens bevægelse og behøver kun at tage udvekslingen af impulsen Δp mellem partiklen og skærmen i betragtning. Derimod bevæger lukkeren, der lader hullet åbent i tiden Δt , sig med en betydelig hastighed $V \approx a/\Delta t$, og en impulsoverførsel Δp er derfor forbundet med en energiudveksling med partiklen, som beløber sig til

$$V \Delta p \approx \frac{\Delta q \Delta p}{\Delta t} \approx \frac{h}{\Delta t}$$

og netop er af samme størrelsesorden som uskarpheden ΔE givet ved (4), og giver således spillerum for impuls- og energibalancen.

Einstein rejste nu det problem, i hvilken udstrækning en kontrol af den med lokaliseringen af partiklen i tid og rum forbundne overførsel af bevægelsesmængde og energi kunne benyttes til en videregående fastlæggelse af partiklens tilstand efter passagen gennem hullet. Her må det erindres, at vi hidtil har antaget at position og bevægelse af skærmen og lukkeren nøjagtigt kunne fastlægges i rum-tidshenførelsessystemet. I beskrivelsen af disse legemers tilstand medfører denne antagelse en væsentlig uskarphed i deres impuls og energi, som selvfølgelig ikke behøver at indvirke mærkbart på hastighederne, hvis skærmen og lukkeren er tilstrækkelig tunge. Så snart vi imidlertid ønsker at kende bevægelsesmængden og energien af disse dele af apparatet med en nøjagtighed tilstrækkelig til at kontrollere impuls- og energiudvekslingen med den undersøgte partikel, vil vi, i overensstemmelse med de almindelige ubestemthedsrelationer, tabe muligheden for at lokalisere dem nøjagtigt i rum og tid. Vi må derfor undersøge, i hvilken udstrækning

denne omstændighed vil berøre den tilsigtede brug af hele forsøgsanordningen, og som vi skal se bringer dette afgørende punkt fænomenernes komplementære karakter klart for dagen.

Vender vi et øjeblik tilbage til den på fig. 1 angivne simple opstilling, må vi erindre at det hidtil ikke er blevet angivet hvad den påtænkes benyttet til. Det er jo kun under forudsætning af at skærmen og pladen har veldefinerede positioner i rummet, at det inden for den kvantemekaniske formalismes rammer er umuligt at gøre mere detaljerede forudsigelser med hensyn til punktet på den fotografiske plade, hvor partiklen vil blive registreret. Hvis vi imidlertid tillader et tilstrækkelig stort spillerum i kendskabet til skærmens position, skulle det i princippet være muligt at kontrollere impulsoverførslen til skærmen og således at gøre mere nøjagtige forudsigelser vedrørende retningen af elektronens vej fra hullet til registreringspunktet. Hvad angår den kvantemekaniske beskrivelse, drejer det sig her om et tolegeme-system bestående af skærmen såvel som partiklen, og det er netop en direkte anvendelse af bevarelsesætningerne på et sådant system vi har at gøre med ved Compton-effekten, hvor for eksempel iagttagelsen af tilbagestødet af elektronen ved hjælp af et tågekammer tillader os at forudsige, i hvilken retning den afbøjede foton vil blive iagttaget.

Betydningen af sådanne betragtninger blev i samtalerne løb på

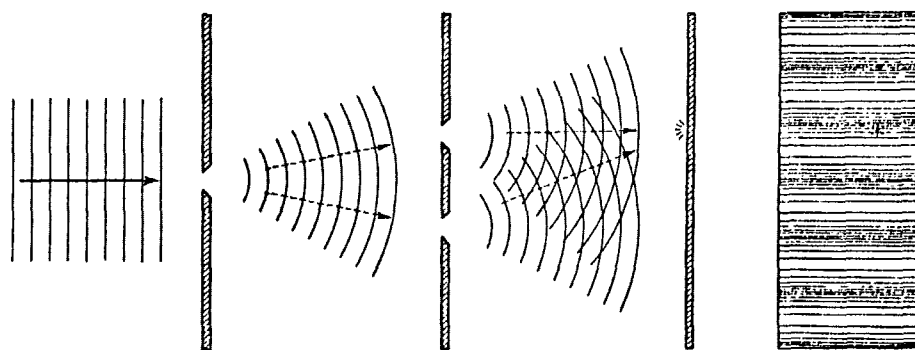


FIG. 3

interessant måde belyst ved undersøgelsen af en anordning, i hvilken der mellem skærmen med spalten og den fotografiske plade er anbragt en anden skærm med to parallelle spalter, således som vist på fig. 3. Hvis en parallel strøm af elektroner (eller fotoner) fra

venstre falder ind på den første skærm, vil vi under normale betingelser iagttage et interferensmønster på pladen, som er antydnet ved skraveringen af den fotografiske plade, der til højre på figuren er vist set forfra. Ved intensiv bestråling bygges dette mønster op ved akkumulation af et stort antal individuelle processer, der hver giver anledning til en lille plet på den fotografiske plade, og fordelingen af disse pletter følger en simpel lov som kan udledes fra bølgeanalysen. Den samme fordeling skulle også findes ved den statistiske beskrivelse af mange forsøg foretaget med stråling så svag, at kun én elektron (eller foton) i hver enkelt eksponering vil nå hen til pladen og ramme denne i et eller andet punkt, på figuren antydnet ved en lille stjerne. Da nu, som angivet ved de punkterede pile, den til den faste skærm overførte impuls må afhænge af, om elektronen går gennem øverste eller nederste spalte i den anden skærm, formodede Einstein at en kontrol med impulsoverførslen ville tillade en nøjere analyse af fænomenet og i særdeleshed afgøre, hvilken af de to spalter elektronen havde passeret før den nåede pladen.

En nærmere undersøgelse viste imidlertid, at den foreslåede kontrol af bevægelsesmængdeoverførslen ville medføre en uskarphe-
hed i kendskabet til skærmens position, der ville udelukke fremkomsten af det omhandlede interferensfænomen. Hvis nemlig ω er den lille vinkel mellem de antagne veje for en partikel der går gennem den øverste eller nederste spalte, vil forskellen i impulsoverførslen i de to tilfælde ifl. (1) blive $h\sigma\omega$, og enhver kontrol af skærmens bevægelsesmængde med en nøjagtighed tilstrækkelig til at måle denne forskel vil på grund af ubestemthedsrelationen være forbundet med et spillerum for skærmens position, der mindst beløber sig til $1/\sigma\omega$. Dersom skærmen med de to spalter, således som på figuren, er anbragt midt imellem den første skærm og den fotografiske plade, vil antallet af striber pr. længdeenhed netop være $\sigma\omega$, og da en ubestemthed $1/\sigma\omega$ i den første skærms position bevirker en lige så stor ubestemthed i stribernes beliggenheder, kan der altså ikke konstateres nogen interferenseffekt. Det samme resultat kan let vises at gælde for enhver anden placering af den anden skærm mellem den første skærm og pladen og ville også fås, hvis man i stedet for den første skærm benyttede et andet af de tre legemer til den foreslåede kontrol af impulsoverførslen.

Dette punkt er af stor logisk betydning, eftersom det kun er den omstændighed at vi står over for et valg mellem *enten* at efterspore en partikels vej *eller* iagttage interferensvirkninger, som tillader os at undgå den paradoksale slutning, at en elektrons eller foton's opførsel skulle afhænge af tilstedeværelsen af en spalte i skærmen, gennem hvilken den kunne vises ikke at passere. Vi har her at gøre med et typisk eksempel på, hvorledes de komplementære fænomener optræder under hinanden udelukkende forsøgsomstændigheder (jvf. s. 53) og står netop over for umuligheden af ved undersøgelsen af kvanteeffekter at skelne skarpt mellem en selvstændig opførsel af atomare objekter og deres vekselvirkning med de måleinstrumenter, som tjener til at definere betingelserne hvorunder fænomenerne optræder.

Vore samtaler om den stilling man må tage til en ny situation med hensyn til erfaringers undersøgelse og sammenfatning førte os naturligt ind på mange sider af filosofisk tænkning, og til trods for alle forskelle i opfattelse og betragtningsmåde var diskussionerne besjælet af megen humor. Einstein på sin side spurgte os ironisk, om vi virkelig kunne tro at guddommelige magter tog tilflugt til terningspil («... *ob der liebe Gott würfelt*»), hvortil jeg svarede ved at henvise til at allerede oldtidens tænkere havde manet til forsigtighed med at tilskrive forsynet attributter hentede fra dagligsproget. Jeg husker også, hvordan Ehrenfest på diskussionens højdepunkt, med sin elskværdige måde at drille sine venner på, spøgende hentydede til den tilsyneladende lighed mellem Einsteins holdning og indstillingen hos relativitetsteoriens modstandere; dog tilføjede Ehrenfest straks at han for sit vedkommende ikke ville kunne føle fuldstændig befrielse, før der var opnået enighed med Einstein.

Einsteins betæneligheder og kritik blev for os alle en yderst værdifuld ansporelse til at underkaste de forskellige sider af situationen vedrørende beskrivelsen af atomare fænomener fornyet prøvelse. For mig var det en velkommen tilskyndelse til yderligere at klarlægge den rolle måleinstrumenterne spiller, og for at tydeliggøre den gensidigt udelukkende karakter af de forsøgsbetingelser hvorunder komplementære fænomener optræder søgte jeg i de dage at skitsere forskellige apparatopstillinger i en pseudorealitisk stil, som de følgende figurer er eksempler på. Til studiet af et inter-

ferensfænomen af den type, der er angivet i fig. 3, ligger det således nær at benytte en forsøgsanordning som vist i fig. 4, hvor de massive apparatdele, der tjener som skærme og pladeholder, er skruet fast på et fælles underlag. Med en sådan opstilling, hvor kendskabet til de relative positioner af skærmene og den fotografiske plade er sikret gennem den stive forbindelse, er det øjen-

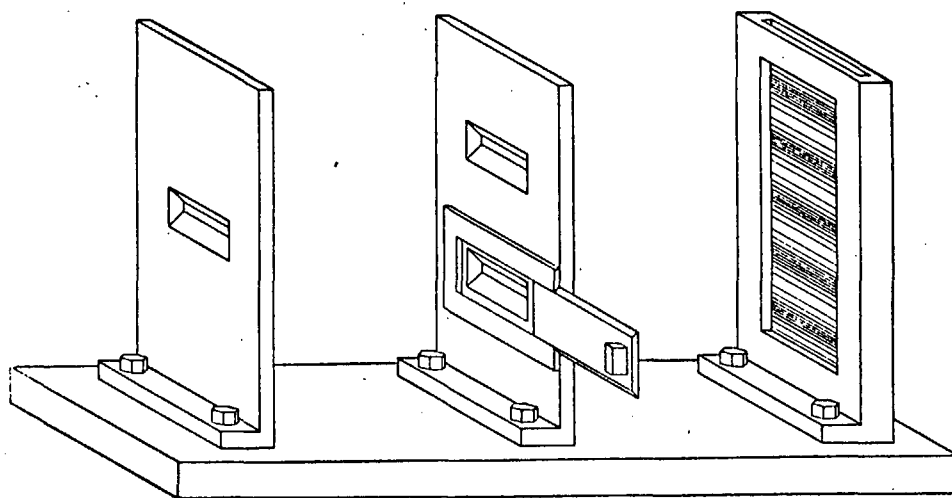


FIG. 4

synligt umuligt at kontrollere nogen mellem partiklen og apparatets enkelte dele udvekslet bevægelsesmængde. Den eneste måde, hvorpå vi i en sådan anordning kunne sikre at partiklen gik gennem en bestemt af spalterne i midterskærmen, er at lukke den anden spalte med et dæksel, således som antydnet på figuren; men hvis spalten er tildækket er der naturligvis ikke tale om noget interferensfænomen, og på pladen vil vi simpelthen iagttage en kontinuert fordeling svarende til eksemplet med en enkelt skærm i fig. 1.

Ved studiet af fænomener, ved hvis beskrivelse vi har at gøre med detaljeret impulsbalance, må visse dele af opstillingen selvfølgelig være frit bevægelige uafhængigt af andre. Et sådant apparat er skitseret i fig. 5, hvor en skærm med en spalte er op-
hængt ved hjælp af svage fjedre fra et solidt åg, der er skruet fast på det underlag til hvilket også andre ubevægelige dele af anordningen må fæstnes. Skalaen på skærmen sammen med viseren på

en af ågets bærestænger henviser til den undersøgelse af skærmens bevægelse, der ville være nødvendig for at måle den overførte bevægelsesmængde og drage slutninger vedrørende den afbøjning,

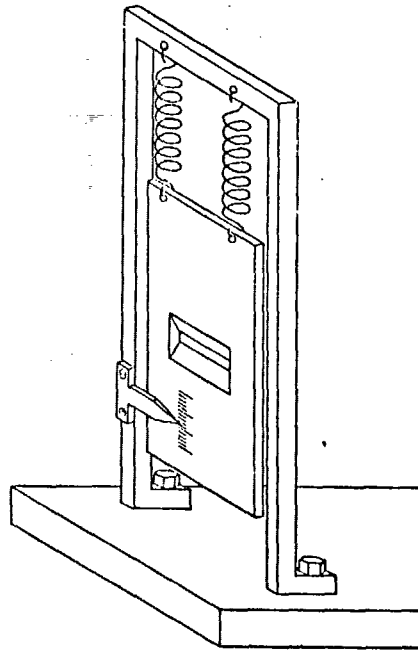


FIG. 5

som partiklen har fået ved at passere spalten. Da imidlertid enhver aflæsning af skalaen, hvordan denne end foretages, vil være forbundet med en ukontrollerbar ændring af skærmens impuls, vil der – i overensstemmelse med ubestemthedsprincippet – altid bestå et reciprok forhold mellem vort kendskab til spaltens position og nøjagtigheden af kontrollen med bevægelsesmængden.

I samme halvt alvorlige stil forestiller fig. 6 en del af en opstilling egnet til undersøgelse af fænomener som – i modsætning til de lige omtalte – rummer en direkte tidskoordination. Apparatet består af en lukker fast forbundet med et robust ur fæstnet til et underlag, der bærer en skærm og på hvilket andre lignende apparatdele, der reguleres af det samme ur eller af andre dermed synkroniserede ure, også må fastgøres. Den særlige hensigt med figuren er at understrege, at et ur er en maskine hvis virkemåde fuldstændigt beskrives ved hjælp af sædvanlig mekanik og som hverken influeres ved aflæsning af viserens position eller ved vekselvirkningen mellem

urets tilbehør og en atomar partikel. Ved at sikre at hullet åbnes et bestemt øjeblik kan et apparat af denne type f. eks. benyttes til en nøjagtig måling af den tid det tager for en elektron eller foton at

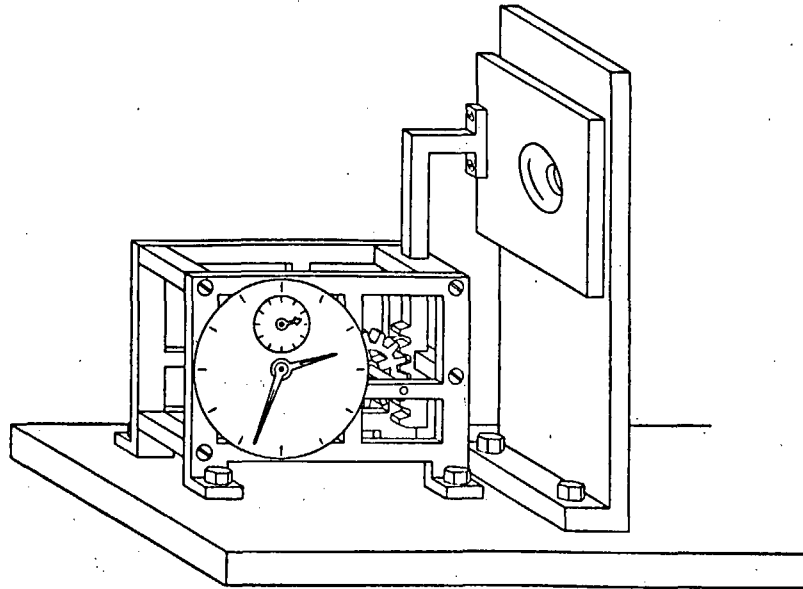


FIG. 6

komme fra skærmen til et andet sted, men det giver åbenbart ingen mulighed for at kontrollere energioverførslen til lukkeren og således drage slutninger vedrørende energien af den gennem hullet passerede partikel. Hvis vi er interesseret i sådanne slutninger, må der naturligvis benyttes en opstilling hvor lukkeranordningerne ikke længere kan tjene som nøjagtige ure, men hvor kendskabet til tidspunktet for åbningen af hullet i skærmen indeholder en uskarphed, som gennem den almindelige relation (4) er forbundet med energimålingens nøjagtighed.

Betragtninger af sådanne mere eller mindre praktiske anordninger og deres mere eller mindre fiktive brug viste sig meget lærerige ved at henlede opmærksomheden på væsentlige træk hos problemerne. Hovedsagen er her at skelne mellem *undersøgelingsobjekterne* og de *måleinstrumenter* som tjener til ved klassiske begreber at definere betingelserne hvorunder fænomenerne optræder. I denne forbindelse kan det bemærkes, at det for de foregående betragtninger ikke er relevant, at eksperimenter der indebærer en

nøjagtig kontrol med overførslen af bevægelsesmængde og energi fra atomare partikler til tunge legemer som skærme og lukkerte ville være meget vanskelige at foretage, om de overhovedet kunne bringes til udførelse. Det er blot afgørende, at disse legemer – i modsætning til de egentlige måleinstrumenter – i så tilfælde sammen med partiklerne udgør det system, på hvilket den kvantemekaniske formalisme skal anvendes. Med hensyn til fastlæggelsen af betingelserne for enhver veldefineret anvendelse af formalismen er det endvidere væsentligt, at *hele det eksperimentelle arrangement* tages i betragtning. Indførelsen af nye apparatdele, f. eks. et spejl, på partiklens vej kan medføre nye interferensvirkninger, der væsentligt indvirker på forudsigelserne vedrørende de mulige iagttagelsesresultater.

I hvor høj grad vi som følge af deres udelelighed må give afkald på anskueliggørelse af atomare fænomener, kommer slående til udtryk i følgende eksempel, som Einstein meget tidligt henledte opmærksomheden på og ofte er vendt tilbage til. Hvis en foton passerer et semi-reflekterende spejl der giver to muligheder for dens forplantningsretning, kan fotonen enten registreres på en og kun én af to fotografiske plader anbragt i store afstande i de omhandlede retninger, eller vi kan – ved at erstatte pladerne med spejle – iagttage virkninger fremkommet ved interferens mellem de to tilbagekastede bølgetog. Ved ethvert forsøg på billedlig fremstilling af fotonens opførsel ville vi således stå overfor følgende vanskelighed: på den ene side at blive nødt til at sige, at fotonen altid vælger *én* af de to veje, og på den anden side, at den opfører sig som om den var gået *begge* veje.

Det er netop argumenter af den art, der minder os om umuligheden af at underdele kvantefænomener og vanskeligheden ved at tilskrive atomare objekter sædvanlige fysiske attributter. Især må vi gøre os klart, at enhver entydig brug af rum-tidsbegreber i beskrivelsen af atomare fænomener – ud over redegørelsen for placeringen og synkroniseringen af de instrumenter der udgør forsøgsanordningen – er begrænset til registrering af iagttagelser beroende på mærker på en fotografisk plade eller lignende praktisk irreversible forstærkningseffekter, såsom opbygningen af en vanddråbe omkring en ion i et tågekammer. Skønt virkningskvantet selvfølgelig til syvende og sidst er ansvarligt for egenskaberne hos

de stoffer, hvoraf måleinstrumenterne er opbygget og på hvilke iagttagelsesmidlernes virkemåde beror, er denne omstændighed ikke relevant for spørgsmålet om hensigtsmæssigheden og fuldstændigheden af de her diskuterede aspekter af den kvantemekaniske beskrivelse.

Disse problemer blev instruktivt belyst på det samme Solvaymøde¹⁰, hvor Einstein rejste sine almindelige indvendinger. Ved den lejlighed opstod også en interessant diskussion om, hvordan man skal tale om fremkomsten af fænomener for hvilke der kun kan gøres forudsigelser af statistisk karakter. Spørgsmålet var, om vi med hensyn til optræden af individuelle effekter skulle gøre brug af en af Dirac foreslået terminologi og sige at det drejede sig om et valg fra »naturens« side, eller om vi, som Heisenberg gjorde sig til talsmand for, skulle sige at vi havde at gøre med et valg foretaget af iagttageren, der konstruerer måleinstrumenterne og aflæser resultaterne. Enhver sådan terminologi turde imidlertid forekomme tvivlsom, idet det på den ene side næppe er rimeligt at tilskrive naturen en vilje i sædvanlig forstand, medens det på den anden side jo ikke er muligt for iagttageren at indvirke på de begivenheder, som kan fremkomme under de af ham arrangerede betingelser. Efter min opfattelse er der ikke andet alternativ end at erkende, at vi på dette erfaringsområde har at gøre med individuelle fænomener, og at vore muligheder for at benytte måleinstrumenterne kun tillader os at træffe et valg mellem de forskellige komplementære typer af fænomener som vi ønsker at studere.

De erkendelsesteoretiske problemer som her er berørt blev mere eksplicit behandlet i et bidrag til et festskrift¹¹ i anledning af Plancks 70 års fødselsdag i 1929. I denne artikel sammenlignedes den belæring, som opdagelsen af det universelle virkningskvantum har givet os, med den udvikling der havde efterfulgt erkendelsen af lysets endelige hastighed og som gennem Einsteins banebrydende værk i så høj grad afklarede de grundlæggende principper for naturbeskrivelsen. Ved betoning af alle fænomeners afhængighed af henførelsessystemet åbnede relativitetsteorien helt nye veje til at efterspore almindelige fysiske love af uanet rækkevidde. I

10. Sst. 248 ff.

11. N. Bohr, *Die Naturwissenschaften* 17, 483 (1929); på dansk i *Atomteori og Naturbeskrivelse*, København 1929.

kvanteteorien har den logiske beskrivelse af de så længe skjulte fundamentale lovmæssigheder, der behersker atomare fænomener, krævet erkendelsen af at der ikke kan skelnes skarpt mellem objekternes opførsel og deres vekselvirkning med de måleinstrumenter som definerer henførelsessystemet.

I denne henseende stiller kvanteteorien os over for en ny situation i den fysiske videnskab, men i artiklen understregedes ligheden med situationer vedrørende analyse og syntese af erfaringer på andre områder af menneskelig kundskab. Som velkendt stammer mange problemer i psykologien fra den forskellige placering af skellet mellem objekt og subjekt ved beskrivelsen af psykiske oplevelser. Således benyttes ord som »tanker« og »følelser«, der er lige uundværlige til at belyse det bevidste livs rigdom og mangfoldighed, på lignende komplementær måde som rum-tidskoordination og dynamiske bevarelseslove i atomfysikken. En nøjagtig formulering af sådanne analogier indebærer selvfølgelig terminologiske vanskeligheder, og forfatterens indstilling antydes måske bedst i et afsnit af artiklen, hvori der henvises til det gensidige udelukkelsesforhold der altid vil bestå mellem den praktiske brug af ethvert ord og forsøg på dets strenge definition. Hovedformålet med disse betragtninger, der ikke mindst var inspireret af håbet om at påvirke Einsteins indstilling, var at pege på den baggrund som studiet af nye men simple fysiske erfaringer har skabt til belysning af almindelige erkendelsesproblemer.

Ved det næste møde med Einstein ved Solvay-konferencen i 1930 tog vore diskussioner en næsten dramatisk vending. Som en indvending mod den opfattelse, at en kontrol med udvekslingen af bevægelsesmængde og energi mellem objekterne og måleinstrumenterne var udelukket, hvis disse instrumenter skulle tjene deres formål, nemlig at definere rum-tidsrammen for fænomenerne, fremførte Einstein det argument, at en sådan kontrol måtte være mulig når relativitetsteoriens fordringer toges i betragtning. I særdeleshed skulle den almindelige relation mellem energi og masse, udtrykt i Einsteins berømte formel

$$E = mc^2, \quad (5)$$

tillade ved simpel vejning at måle den totale energi af ethvert

s*

system og således i princippet at kontrollere den energi der overføres til det under dets vekselvirkning med et atomart objekt.

Som en anordning egnet til et sådant formål foreslog Einstein den i fig. 7 antydede indretning, der består af en kasse, i hvis ene væg der

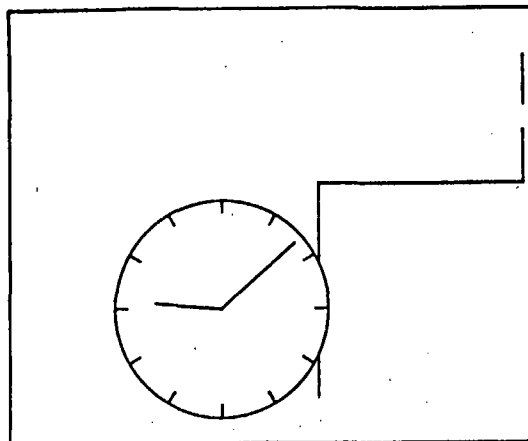


FIG. 7

er et hul som kan åbnes og lukkes ved hjælp af en af et urværk bevæget lukker. Hvis kassen i begyndelsen indeholdt en vis mængde stråling, og uret var sat til at åbne hullet til en bestemt tid i et meget lille interval, kunne det opnås at en enkelt foton slap gennem hullet til et tidspunkt der var kendt med så stor nøjagtighed det skulle være. Yderligere ville det tilsyneladende være muligt ved at veje hele kassen før og efter denne begivenhed at måle fotonens energi med enhver ønsket nøjagtighed, i direkte modstrid med den reciproke ubestemthed af tids- og energistørrelserne i kvantemekanikken.

Dette argument syntes at rumme en alvorlig indvending og gav anledning til indgående undersøgelse af hele problemet. Ved udgangen af diskussionen, til hvilken Einstein selv bidrog virksomt, blev det imidlertid klart at argumentet ikke kunne opretholdes. Det viste sig nødvendigt ved spørgsmålets behandling nærmere at undersøge konsekvenserne af den i relation (5) indeholdte identifikation af træg og tung masse. Især var det væsentligt at være opmærksom på den fra rødforskydningen af linierne i solens spektrum velkendte sammenhæng mellem et urs gang og dets position

i et tyngdefelt, som er en følge af Einsteins princip om ækvivalensen mellem tyngdevirkninger og fænomener der iagttages i accelererede henførelsessystemer.

Diskussionen drejede sig især om den mulige benyttelse af et

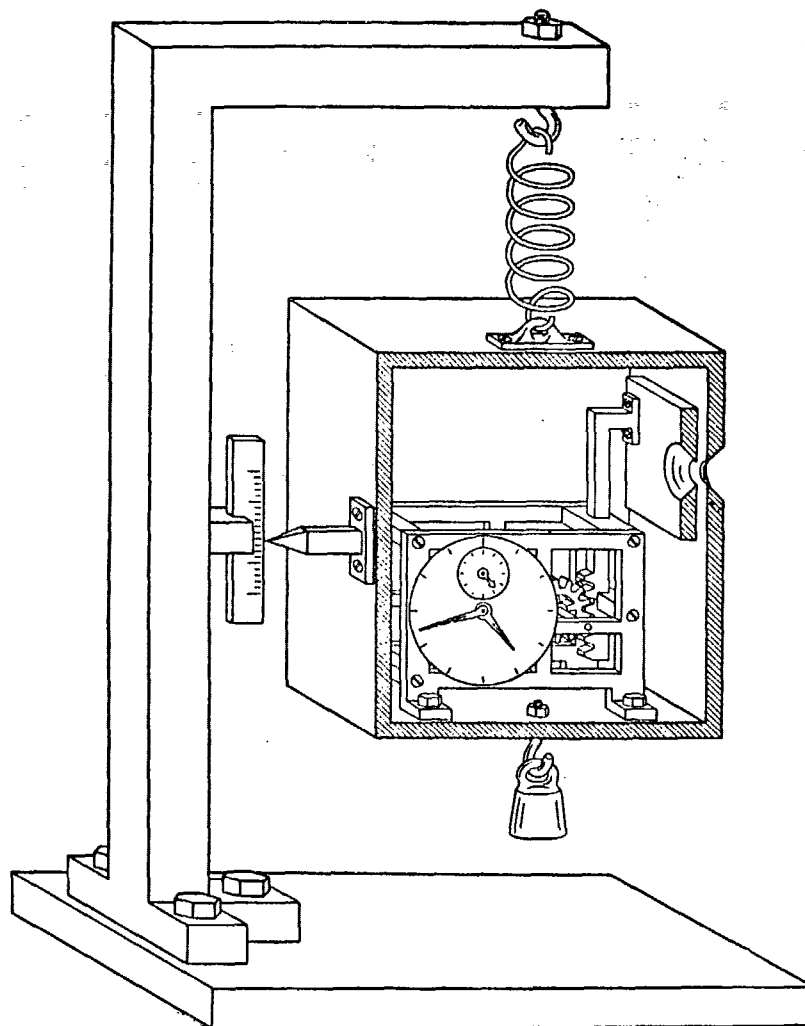


FIG. 8

apparat, der indeholder Einsteins anordning og som i fig. 8 er tegnet i den samme pseudorealistiske stil som nogle af de foregående figurer. Kassen, af hvilken et tværsnit er vist for at man kan se dens indre, er ophængt i en fjeder og forsynet med en viser til at angive dens position på en skala fastgjort til bærestangen. Vejningen af kassen kan således foretages med enhver given nøjagtighed Δm ved at justere vægten til sin nulstilling ved hjælp af passende lodder.

Det væsentlige punkt er nu, at enhver bestemmelse af denne position med en given nøjagtighed Δq kræver et mindste spillerum Δp i kontrollen med kassens bevægelsesmængde, forbundet med Δq ved relationen (3). Dette spillerum må øjensynligt igen være mindre end den totale impuls, som i løbet af hele den tid T , som det tager at udføre vejningen, kan overføres fra gravitationsfeltet til et legeme med massen Δm , eller

$$\Delta p \approx \frac{h}{\Delta q} < T \cdot g \cdot \Delta m, \quad (6)$$

hvor g er gravitationskonstanten. Jo større nøjagtighed viser aflæsningen q forlanger, desto længere må altså vejningsintervallet T være, hvis en given nøjagtighed Δm af vejningen af kassen med indhold skal opnås.

Ifølge den almindelige relativitetsteori vil nu et ur, der forskydes et stykke Δq i retning af gravitationskraften, forandre sin gang på en sådan måde, at dets aflæsning i løbet af et tidsinterval T viser en afvigelse ΔT givet ved relationen

$$\frac{\Delta T}{T} = \frac{1}{c^2} g \Delta q. \quad (7)$$

Ved at sammenligne (6) og (7) ser vi derfor, at der efter vejningen vil være et spillerum i vort kendskab til urets justering

$$\Delta T > \frac{h}{c^2 \Delta m}.$$

Sammen med formlen (5) leder denne relation til

$$\Delta T \cdot \Delta E > h,$$

i overensstemmelse med ubestemthedsprincippet. Benyttelsen af apparatet som et middel til en nøjagtig måling af fotonens energi vil altså hindre os i at kontrollere tidspunktet for dens udsendelse.

Diskussionen, der på så lærerig måde viste relativistiske argumenters styrke og modsigelsesfrihed, understregede således endnu engang nødvendigheden af ved studiet af atomare fænomener at skelne mellem egentlige måleinstrumenter, som tjener til at defi-

ner henførelsessystemet, og de dele som udgør undersøgelsesobjekterne og i hvis beskrivelse virkningskvantet ikke kan lades ude af betragtning. Uanset den så slående bekræftelse af den kvantemekaniske beskrivelsesmådes konsekvens og rækkevidde udtrykte Einstein ikke desto mindre i en påfølgende samtale med mig bekymring med hensyn til den tilsyneladende mangel på urokkelige principper for naturbeskrivelsen som alle kunne enes om. Fra mit synspunkt kunne jeg imidlertid kun svare, at vi stillet over for den opgave at bringe orden på et helt nyt erfaringsområde næppe kunne stole på nogen tilvante nok så almindelige principper, bortset fra kravet om at undgå logisk modsigelse, og i denne henseende opfyldte kvantemekanikkens matematiske formalisme jo alle fordringer.

Solvay-mødet i 1930 var den sidste lejlighed, hvor vi i diskussionerne med Einstein kunne nyde godt af Ehrenfests stimulerende og mæglende indflydelse, men kort før sin tragiske død i 1933 fortalte han mig, at Einstein var langt fra at være tilfreds og med sædvanlig skarpsindighed havde fremdraget nye aspekter af situationen, som bestyrkede hans kritiske indstilling. Ved en videre undersøgelse af mulighederne for at anvende vejningsanordningen havde Einstein udtænkt andre fremgangsmåder, der – selv om de ikke tillod den brug han oprindeligt havde tilstræbt – syntes at skærpe paradokserne og forhindre deres logiske løsning. Einstein havde således peget på, at man efter den indledende vejning af kassen med uret og den påfølgende udsendelse af fotonen havde valget imellem at gentage vejningen eller at åbne kassen og sammenligne uret med et standard-ur. Vi kan altså på dette stadium endnu vælge frit, om vi ønsker at drage slutninger vedrørende fotonens energi eller om det tidspunkt den forlod kassen. Uden på nogen måde at forstyrre fotonen mellem dens udsendelse og dens senere vekselvirkning med andre passende målemidler er vi således i stand til at gøre nøjagtige forudsigelser vedrørende *enten* tidspunktet for dens ankomst *eller* energimængden frigjort ved dens absorption. Ifølge den kvantemekaniske formalisme kan der imidlertid i fastlæggelsen af en isoleret partikels tilstand ikke indgå både en veldefineret forbindelse med tidsskalaen og en nøjagtig bestemmelse af energien, og det kunne således se ud som om denne formalisme ikke frembød en adekvat beskrivelse.

Endnu engang havde Einsteins søgende tanke fremdraget et ejendommeligt træk af situationen i kvanteteorien, som slående illustrerer hvor langt vi her er uden for tilvandt forklaring af fysiske fænomener. Dog kunne jeg ikke slutte mig til den tankegang, hvorom Ehrenfest berettede. Efter min opfattelse kunne en logisk modsigelsesfri matematisk formalisme kun siges at være utilstrækkelig, når det kunne påvises at dens konsekvenser afveg fra erfaringen eller at dens forudsigelser ikke udtømte iagttagelsesmulighederne, og på intet af disse punkter tog Einsteins argumentation sigte. Vi må jo gøre os klart, at der ved det omhandlede problem ikke er tale om *én* fastlagt forsøgsanordning, men om *to* forskellige hinanden udelukkende anordninger. I den ene benyttes vægten sammen med andre apparatdele, f. eks. et spektrometer, til at undersøge energioverførelse ved en foton; i den anden anvendes en lukker, der reguleres af et standardiseret ur, sammen med andre apparater af lignende art, nøjagtigt synkroniseret i forhold til uret, til undersøgelse af tiden for fotonens forplantning over en given afstand. I begge disse tilfælde forventes de iagttagelige effekter, som også antaget af Einstein, at være i overensstemmelse med teoriens forudsigelser.

Problemet understreger atter nødvendigheden af at betragte *hele* forsøgsanordningen, hvis fastlæggelse er nødvendig for enhver veldefineret anvendelse af den kvantemekaniske formalisme. I denne sammenhæng kan det bemærkes, at lignende paradokser som de af Einstein overvejede også optræder ved så simple anordninger som den i fig. 5 antydede. Efter en indledende måling af skærmens bevægelsesmængde har vi, når en elektron eller foton er gået igennem hullet, i princippet valget mellem at gentage impulsmålingen eller at kontrollere skærmens position og således gøre forudsigelser vedrørende forskellige påfølgende iagttagelser. Det kan også tilføjes, at det øjensynligt ikke kan gøre nogen forskel med hensyn til de ved en bestemt forsøgsanordning opnåelige iagttagelser, om vore planer for konstruktionen og benyttelsen af apparaterne er fastlagt i forvejen, eller om vi foretrækker at udsætte planlægningen til et senere tidspunkt, når partiklen allerede er på vej fra et apparat til et andet.

I den kvantemekaniske beskrivelse kommer vor frihed til at opbygge og benytte forsøgsanordningen til udtryk i muligheden af at

vælge de klassisk definerede parametre, der indgår i enhver veldefineret anvendelse af formalismen. I alle sådanne henseender svarer kvantemekanikken, så nøje som det er foreneligt med fænomenernes individualitet, til forholdene i den klassiske fysik. Ved at hjælpe til at bringe dette punkt så klart frem havde Einsteins betænkkeligheder således atter givet en velkommen tilskyndelse til at udforske væsentlige træk af situationen.

Emnet for det næste Solvay-møde i 1933 var problemerne vedrørende atomkernernes struktur og egenskaber, et område hvor der netop på den tid var sket store fremskridt såvel som følge af eksperimentelle opdagelser som af nye frugtbare anvendelser af kvantemekanikken. Det er i denne forbindelse næppe nødvendigt at minde om, at oplysningerne vundne ved studiet af kunstige kerneomdannelser direkte bekræftede Einsteins fundamentale lov om ækvivalensen mellem masse og energi, som skulle blive en stedse mere vigtig ledetråd ved kernefysiske undersøgelser. Det kan også nævnes, hvordan Einsteins intuitive erkendelse af forbindelsen mellem loven for de radioaktive omdannelser og de sandsynlighedsregler, der behersker de individuelle kvanteeffekter (jvf. s. 49), blev bekræftet ved den kvantemekaniske forklaring af de spontane kernesønderdelinger. Vi har her at gøre med et typisk eksempel på den statistiske beskrivelsesmåde, og komplementaritetsforholdet mellem energi-impulsbevarelse og tid-rums-koordination finder slående udtryk i det velkendte paradoks vedrørende partiklers gennemgang gennem potentialbarrierer.

Einstein selv deltog ikke i dette møde, der fandt sted i en tid formørket af den tragiske udvikling i den politiske verden, som skulle indvirke så dybt på hans skæbne og i så høj grad forøge hans byrder i menneskehedens tjeneste. Få måneder tidligere havde jeg imidlertid under et besøg i Princeton, hvor Einstein var gæst ved det nyligt oprettede *Institute for Advanced Study*, til hvilket han snart efter blev fast knyttet, atter lejlighed til at tale med ham om atomfysikkens erkendelsesteoretiske problemer, men forskellene i vor indstilling og måde at udtrykke os på frembød stadig hindringer for gensidig forståelse. Medens forholdsvis få personer indtil da havde taget del i de i denne artikel omtalte diskussioner, blev Einsteins kritiske holdning til kvantemekanikken almindelig kendt

gennem en afhandling¹² med titlen »Kan den kvantemekaniske beskrivelse af den fysiske virkelighed betragtes som fuldstændig?«, der blev offentliggjort i 1935 af Einstein, Podolsky og Rosen.

Argumentationen i denne afhandling er baseret på et kriterium, som forfatterne udtrykker på følgende måde: »Hvis vi, uden på nogen måde at forstyrre et system, med fuld sikkerhed kan forudsige værdien af en fysisk størrelse, så eksisterer der et element af den fysiske virkelighed svarende til denne fysiske størrelse«. Ved en elegant udvikling af den kvantemekaniske formalismes konsekvenser med hensyn til tilstanden af et system bestående af to partikler som i et begrænset tidsinterval har været i vekselvirkning, vises det dernæst at forskellige størrelser, hvis bestemmelse ikke kan forbindes i fremstillingen af et af delsystemerne, ikke desto mindre kan forudsiges ved målinger udført på det andet delsystem. I overensstemmelse med deres kriterium slutter forfatterne derfor, at kvantemekanikken »ikke er en fuldstændig beskrivelse af den fysiske virkelighed«, og de giver udtryk for overbevisningen om, at det vil være muligt at udvikle en mere adækvat redegørelse for fænomenerne.

På grund af argumentets klarhed og tilsyneladende ubestridelighed vakte Einstein, Podolsky og Rosens afhandling røre blandt fysikerne, og den har siden spillet en stor rolle i den almindelige filosofiske diskussion. Det drejer sig jo om et meget subtelt spørgsmål, der er egnet til at understrege hvor langt vi i kvanteteorien er uden for billedlige forestillingers rækkevidde. Imidlertid vil det ses, at vi her har at gøre med problemer af ganske samme art som dem Einstein rejste i de tidligere diskussioner, og i en artikel¹³, der fremkom få måneder senere, søgte jeg at vise at komplementaritetssynspunktet fuldstændigt fjernede de tilsyneladende modsigelser. Tankgangen var i det væsentlige den samme som den der er udviklet på de foregående sider, men for at genkalde den måde hvorpå situationen dengang blev diskuteret vil jeg gerne citere nogle afsnit af artiklen.

Efter at have henvist til de slutninger, som Einstein, Podolsky og Rosen havde draget på grundlag af deres kriterium, skrev jeg:

En sådan argumentation er imidlertid næppe egnet til at anfægte den kvantemekaniske beskrivelse, der er baseret på en sammenhængende mate-

12. A. Einstein, B. Podolsky og N. Rosen, *Phys. Rev.* 47, 777 (1935).

13. N. Bohr, *Phys. Rev.* 48, 696 (1935).

matisk formalisme, som automatisk omfatter enhver måling af den omhandlede art. Den tilsyneladende modsigelse afslører blot, at den tilvante betragtningsmåde på væsentlige punkter er uegnet til rationel redegørelse for de fysiske fænomener, som vi møder i kvantemekanikken. *Den endelige vekselvirkning mellem objektet og målemidlerne*, der er betinget af selve virkningskvantets eksistens, medfører – på grund af umuligheden af at kontrollere objektets reaktion på måleinstrumenterne, hvis disse skal tjene deres formål – nødvendigheden af et definitivt afkald på det klassiske kausalitetsideal og af en gennemgribende revision af vor indstilling til problemet om den fysiske virkelighed. Som vi skal se, indeholder det af de nævnte forfattere foreslåede virkelighedskriterium en væsentlig flertydighed, når det anvendes på de faktiske problemer som vi her står overfor.

Med hensyn til det af Einstein, Podolsky og Rosen behandlede specielle problem blev det derefter vist, at formalismens konsekvenser vedrørende et system bestående af to med hinanden vekselvirkende atomare objekter svarer til de simple argumenter, der i det foregående er nævnt i forbindelse med diskussionen af forsøgsanordninger egnet til studiet af komplementære fænomener. Skønt ethvert par af konjugerede rum- og impulsvariable adlyder den i (2) udtrykte regel for ikke-kommutativ multiplikation og således kun kan fastlægges med reciprokke spillerum givet ved (3), vil differencen $q_1 - q_2$ mellem to rumskoordinater af systemets bestanddele kommutere med summen $p_1 + p_2$ af de tilsvarende bevægelsesmængdekomponenter, hvilket følger direkte af ombytteligheden af q_1 og p_2 og af q_2 og p_1 . Både $q_1 - q_2$ og $p_1 + p_2$ kan altså fastlægges nøjagtigt i en tilstand af det sammensatte system, og vi kan derfor forudsige værdien af enten q_1 eller p_1 hvis enten q_2 eller p_2 er bestemt ved direkte målinger. Hvis vi for de to dele af systemet tager en partikel og en skærm, som den der er antydnet i fig. 5, ser vi at mulighederne for at fastlægge partiklens tilstand ved målinger på skærmen netop svarer til situationen beskrevet side 57f. og yderligere diskuteret side 71f., hvor det blev nævnt at vi efter at partiklen har passeret skærmen stadig i princippet har valget mellem at måle skærmens position eller dens bevægelsesmængde og i hvert af tilfældene gøre forudsigelser med hensyn til påfølgende iagttagelser af partiklen. Som det ofte er blevet understreget, er hovedpunktet her at sådanne målinger kræver hinanden udelukkende forsøgsanordninger.

Argumentationen i artiklen blev sammenfattet i følgende afsnit:

Fra vort synspunkt ser vi nu, at formuleringen af det ovenfor nævnte af Einstein, Podolsky og Rosen foreslåede kriterium på fysisk virkelighed rummer en flertydighed med hensyn til meningen af udtrykket »uden på nogen måde at forstyrre et system«. Selvfølgelig er der i et tilfælde som det vi lige har betragtet ikke tale om en mekanisk forstyrrelse af det undersøgte system på det sidste kritiske stadium af målingerne. Men netop på dette stadium er der tale om *en indflydelse på selve de betingelser, der definerer de mulige typer af forudsigelser vedrørende systemets fremtidige opførsel*. Eftersom disse betingelser udgør et uundværligt element af beskrivelsen af ethvert fænomen til hvilket udtrykket »fysisk virkelighed« på konsekvent måde kan knyttes, ser vi at de nævnte forfatteres argumentation ikke retfærdiggør deres konklusion at den kvantemekaniske beskrivelse er væsentlig ufuldstændig. Denne beskrivelse må tværtimod, som det fremgår af den foregående diskussion, karakteriseres som en rationel udnyttelse af alle muligheder for entydig interpretation af målinger, forenelig med den af virkningskvantet betingede endelige og ukontrollable vekselvirkning mellem objekterne og måleinstrumenterne på kvanteteoriens område. Det er kun det gensidige udelukkelsesforhold mellem to forsøgsanordninger, tilladende entydig definition af komplementære størrelser, der giver plads for nye fysiske love, hvis optræden ved første blik synes uforenelig med naturvidenskabens grundlæggende principper. Det er netop denne helt nye situation med hensyn til beskrivelse af fysiske fænomener, som betegnelsen *komplementaritet* tager sigte på at karakterisere.

Ved at læse disse afsnit igen føler jeg stærkt udtryksformens mangler, der må have gjort det meget vanskeligt at følge tankegangen, som tilstræber at fremhæve den flertydighed der rummes i en henvisning til objekters fysiske attributter, når talen er om fænomener, hvor der ikke kan skelnes skarpt mellem objekternes egen opførsel og deres vekselvirkning med måleinstrumenterne. Jeg håber imidlertid, at redegørelsen for diskussionerne med Einstein i de foregående år, der bidrog så meget til at gøre os fortrolig med situationen i kvantefysikken, giver et klarere indtryk af at genoprettelsen af logisk orden på dette erfaringsområde krævede en gennemgribende revision af grundlaget for fysisk forklaring.

Einsteins synspunkter fra den tid er udtrykt i en artikel med titlen »Fysik og Virkelighed«¹⁴. Efter at have givet en instruktiv fremstilling af den gradvise udvikling af de fundamentale principper i de klassiske fysiske teorier og deres forhold til problemet om den fysiske virkelighed, hævder Einstein her at den kvantemekaniske beskrivelse blot må betragtes som et middel til at redegøre for den

14. A. Einstein, Journ. Franklin Institute 221, 349 (1936).

gennemsnitlige opførsel af et stort antal atomare systemer. Hans indstilling til den opfattelse, at der skulle være tale om en udtømmende beskrivelse af individuelle fænomener udtryktes i følgende ord: »At tro dette er muligt uden logisk modsigelse; men det er i så stærk modsætning til mit videnskabelige instinkt, at jeg ikke kan opgive at søge efter en mere fuldstændig beskrivelse.«

Omend en sådan indstilling i sig selv kunne synes ganske nøgtern, rummer den ikke desto mindre en afvisning af hele den i det foregående udviklede argumentation, der tager sigte på at vise at vi i kvantemekanikken ikke har at gøre med noget vilkårligt afkald på en mere detaljeret analyse af atomare fænomener, men med erkendelsen af at en sådan analyse er *principielt* udelukket. Kvanteeffekternes ejendommelige individualitet stiller os med hensyn til sammenfatningen af veldefinerede erfaringer over for en ny situation, der var uforudset i den klassiske fysik og er uforenelig med tilvante forestillinger egnede til vor orientering i og tilpasning til dagliglivets verden. Det er i denne henseende at kvanteteorien har krævet en fornyet revision af grundlaget for den entydige brug af elementære begreber som et videre skridt i den udvikling, der siden relativitetsteoriens fremkomst er blevet så karakteristisk for vor tids videnskab.

I de følgende år vakte de mere filosofiske sider af situationen i atomfysikken interesse i stadig videre kredse og blev blandt andet diskuteret på Den anden internationale kongres for videnskabens enhed, der fandt sted i København i juli 1936. I et foredrag¹⁵ ved denne lejlighed søgte jeg især at understrege ligheden i erkendelsesteoretisk henseende mellem årsagsbeskrivelsens begrænsning i atomfysikken og situationer som vi møder på andre kundskabsområder. Et hovedformål med sådanne paralleler var at henlede opmærksomheden på nødvendigheden af på mange områder af menneskelig interesse at tage stilling til problemer af lignende art som dem kvanteteorien har givet anledning til, og derved skabe en mindre fremmed baggrund for den tilsyneladende ekstravagante udtryksmåde, som fysikere har udviklet for at løse deres påtrængende vanskeligheder.

Foruden de komplementære træk, der er iøjnefaldende i psyko-

15. N. Bohr, *Erkenntnis* 6, 293 (1937) og *Philosophy of Science* 4, 289 (1937).

logien og som allerede er blevet berørt (jvf. s. 67), kan eksempler på sådanne sammenhæng også efterspores i biologien, navnlig med hensyn til sammenligningen mellem mekanistiske og vitalistiske synspunkter. Dette sidste spørgsmål havde tidligere været emnet for et foredrag jeg holdt på Den internationale kongres for lysbehandling i København 1932¹⁶. I denne sammenhæng blev det også fremhævet, at selv den af Leibniz og Spinoza diskuterede psyko-fysiske parallelisme havde fået større rækkevidde gennem udviklingen af atomfysikken, som påtvinger os en indstilling til spørgsmålet om forklaring, der minder om den gamle visdom at vi i vor søgen efter harmonier i livet aldrig må glemme at vi i tilværelsens drama er både skuespillere og tilskuere.

Sådanne ytringer måtte naturligt hos mange fremkalde indtrykket af en bagvedliggende mysticisme fremmed for videnskabens ånd. Ved den ovenfor nævnte kongres i 1936 søgte jeg derfor at opklare sådanne misforståelser og understrege, at der kun var tale om en bestræbelse på at klarlægge vilkårene for beskrivelse og sammenfatning af erfaringer på ethvert kundskabsområde¹⁵. Dog er jeg bange for, at det i denne henseende kun i ringe grad lykkedes mig at overbevise mine tilhørere, for hvem de indbyrdes meningsforskelle mellem fysikerne selvfølgelig måtte give anledning til skepticisme vedrørende nødvendigheden af i så vid udstrækning at give afkald på tilvante krav til forklaring af fysiske fænomener. Ikke mindst i en ny diskussion med Einstein i Princeton i 1937, hvor vi ikke kom videre end til en humoristisk strid om hvilken stilling Spinoza ville have taget, hvis han havde oplevet udviklingen i vore dage, blev jeg stærkt mindet om betydningen af den yderste omhyggelighed i alle spørgsmål om terminologi og dialektik.

Disse sider af situationen blev især diskuteret ved en kongres i Warszawa i 1938, der var arrangeret af Folkeforbundets internationale institut for intellektuelt samarbejde¹⁷. De foregående år havde været vidne til store fremskridt i kvantefysikken, stammende såvel fra fundamentale opdagelser vedrørende atomkernernes opbygning og egenskaber som fra en betydningsfuld udvikling i be-

16. Trykt i kongresberetningen; på dansk i *Naturens Verden* 22, 433 (1938), gengivet i foreliggende samling, s. 11.

17. *New Theories in Physics*, Paris 1938, 11.

stræbelserne på at tilpasse den matematiske formalisme til relativitetsteoriens krav. I den sidste henseende frembød Diracs geniale kvanteteori for elektronen et slående eksempel på den kvantemekaniske beskrivelsesmådes styrke og frugtbarhed. Ved skabelsen og tilintetgørelsen af elektronpar har vi at gøre med nye fundamentale helhedstræk, der er nøje forbundet med de i udelukkelsesprincippet udtrykte uklassiske aspekter af kvantestatistikken, og som har krævet endnu mere vidtgående afkald på forklaring ved hjælp af billedlig fremstilling.

I mellemtiden havde diskussionen af de erkendelsesteoretiske problemer i atomfysikken tiltrukket sig mere opmærksomhed end nogensinde, og ved omtalen af Einsteins synspunkter vedrørende den kvantemekaniske beskrivelsesmådes ufuldstændighed gik jeg mere direkte ind på terminologiske spørgsmål. I denne forbindelse advarede jeg især mod udtryk der ofte forekommer i den fysiske litteratur, som f. eks. »forstyrrelse af fænomener ved iagttagelse« eller »skabelse af atomare objekters fysiske attributter ved målinger«. Sådanne udtryk kan vel tjene til at minde om de tilsyneladende paradokser i kvanteteorien, men er på samme tid vildledende, fordi ord som »fænomener« og »iagttagelse« ligesom »attributter« og »målinger« benyttes på en måde, der næppe er forenelig med sædvanligt sprog og praktisk definition.

Som en mere træffende udtryksmåde foreslog jeg, at ordet *fænomen* udelukkende anvendes til at henvise til iagttagelser der er vundet under angivne omstændigheder omfattende en redegørelse for hele forsøgsanordningen. Med en sådan terminologi er iagttagelsesproblemet befriet for en hvilken som helst forvikling, eftersom alle iagttagelser ved faktiske eksperimenter udtrykkes ved entydige udsagn, der f. eks. angår registreringen af det punkt hvor en elektron ankommer til en fotografisk plade. En sådan udtryksmåde er endvidere egnet til at understrege, at det ved den konsekvente fysiske tydning af den symbolske kvantemekaniske formalisme alene drejer sig om forudsigelser, af entydig eller statistisk karakter, vedrørende individuelle fænomener optrædende under betingelser defineret ved klassiske fysiske begreber.

Uanset al forskel mellem de fysiske problemer, der har givet anledning til udviklingen af relativitetsteorien og kvanteteorien, afslører en sammenligning af de rent logiske træk af den relati-

vistiske og komplementære betragtningsmåde slående ligheder med hensyn til afkaldet på den absolutte betydning af objekters sædvanlige fysiske attributter. Det er endvidere karakteristisk for anvendelsen af både relativitetsteorien og kvantemekanikken, at man ved redegørelsen for erfaringerne ser bort fra den atomare opbygning af måleinstrumenterne selv. Virkningskvantets lidenhed i forhold til de virkninger der optræder ved sædvanlige erfaringer, herunder også opstillingen og benyttelsen af fysiske apparater, er lige så væsentlig i atomfysikken som det enorme antal atomer, hvoraf verden består, er for den almindelige relativitetsteori. Som ofte fremhævet kræver denne jo, at dimensionerne af apparater til vinkelmåling kan gøres små i sammenligning med rummets krumningsradius.

I Warszawa-foredraget omtalte jeg benyttelsen af ikke direkte anskuelige symbolismer i relativitetsteorien og kvanteteorien på følgende måde:

Selv formalismerne, der i begge teorier inden for deres anvendelsesområder er egnede til at sammenfatte alle tænkelige erfaringer, udviser dybtgående ligheder. Den forbavsende simpelhed af disse generalisationer af de klassiske fysiske teorier, som opnås ved brugen af flerdimensional geometri og ikke-kommutativ algebra, beror i begge tilfælde på indførelsen af det konventionelle symbol $\sqrt{-1}$. Den abstrakte karakter af de omhandlede formalismer er jo ved nærmere betragtning lige så typisk for relativitetsteorien som for kvantemekanikken, og det er i denne henseende udelukkende et spørgsmål om tradition, hvis den førstnævnte teori betragtes som en afrunding af den klassiske fysik snarere end et indledende fundamentalt skridt i den dybtgående revision af vore begrebsmæssige hjælpemidler til sammenfatning af iagttagelser, som fysikkens nyere udvikling har påtvunget os.

Det er naturligvis rigtigt, at vi i atomfysikken står over for mange uløste fundamentale problemer, navnlig med hensyn til den intime forbindelse mellem den elementære elektriske enhedsladning og det universelle virkningskvantum; men disse problemer har ikke mere forbindelse med de her diskuterede erkendelsesteoretiske spørgsmål end begrundelsen af den relativistiske betragtningsmåde har med de endnu uløste kosmologiske problemer. Både i relativitetsteorien og i kvantemekanikken har vi at gøre med nye træk af videnskabelig analyse og syntese, og det er i denne forbindelse interessant at bemærke, at der selv i den kritiske filosofis store epoke i forrige århundrede kun var tale om, i hvilken udstrækning der *a priori*

kunne gives argumenter for rum-tidskoordination og kausal forbindelse mellem erfaringer, men aldrig tale om rationel almindeliggørelse eller iboende begrænsning af sådanne kategorier for menneskelig tænkning.

Skønt jeg i de senere år adskillige gange har haft lejlighed til at møde Einstein, har de fortsatte diskussioner, fra hvilke jeg altid har modtaget nye impulser, endnu ikke ført til en fælles opfattelse af de erkendelsesteoretiske problemer i atomfysikken, og vore modstridende synspunkter er måske klarest udtrykt i et nylig udkommet hefte af *Dialectica*¹⁸, der bringer en almindelig diskussion af disse problemer. Med henblik på de mange hindringer for gensidig forståelse vedrørende et emne, hvor udgangspunkt og baggrund må påvirke enhvers indstilling, har jeg imidlertid været glad for denne lejlighed til at give en bredere fremstilling af den udvikling, ved hvilken en sand krise i den fysiske videnskab efter min opfattelse er blevet overvundet. Den belæring som vi herved har modtaget turde have bragt os et afgørende skridt videre i den aldrig afsluttede stræben efter harmoni mellem indhold og form, og endnu engang mindet os om at intet indhold kan fremstilles uden en logisk ramme, og at enhver form, hvor nyttig den end hidtil har været, kan vise sig for snæver til at omfatte nye erfaringer.

I en situation som denne, hvor det har været så svært at nå til gensidig forståelse ikke blot mellem filosoffer og fysikere, men selv mellem fysikere af forskellige skoler, har vanskelighederne ikke sjældent deres rod i forkærlighed for udtryksmåder, der tilbyder sig alt efter hvordan man nærmer sig problemerne. På Instituttet i København, hvor gennem årene mange unge fysikere fra forskellige lande er kommet sammen til diskussioner, plejede vi i vanskelige stunder at trøste os med spøg, blandt andet med den gamle historie om de to slags sandheder. Til den ene slags hører udsagn, der er så simple og klare, at den modsatte påstand øjensynligt ikke kan forsvares. Den anden slags, de »dybe« sandheder, er udsagn for hvilke det gælder at det modsatte også indeholder dyb sandhed. Udviklingen på et nyt område vil jo sædvanligvis gå igennem stadier, hvorunder kaos gradvis erstattes med orden; men ikke mindst på de mellemliggende trin, hvor dybe sandheder er fremherskende, er arbejdet spændende og ansporer

18. *Dialectica* 1, 312 (1948).

fantasien til at søge fastere grund. For sådanne bestræbelser på at opnå den rette balance mellem alvor og humor står Einsteins personlighed som et forbillede, og når jeg udtrykker min forvisning om, at vi gennem et enestående frugtbart samarbejde mellem en hel generation af fysikere nærmer os det mål, hvor logisk orden tillader os i vid udstrækning at undgå dybe sandheder, håber jeg at det vil blive opfattet i hans ånd og må tjene som undskyldning for adskillige af bemærkningerne på de foregående sider.

Diskussionerne med Einstein, der har udgjort emnet for denne artikel, har strakt sig over mange år, hvor vi har været vidne til store fremskridt på atomfysikkens område. Hvad enten vore møder har været af kortere eller længere varighed, har de altid efterladt et dybt og uforglemmeligt indtryk i mit sind, og under udarbejdelsen af denne beretning har jeg så at sige diskuteret med Einstein hele tiden, selv når jeg er kommet ind på emner der kunne synes fjernt fra de specielle problemer som drøftedes ved vore møder. Hvad redegørelsen for vore samtaler angår, er jeg selvfølgelig klar over, at jeg kun bygger på min egen hukommelse, ligesom jeg er forberedt på muligheden af at mange træk af kvanteteoriens udvikling, ved hvilken Einstein har spillet så stor en rolle, for ham selv kan fremtræde i et andet lys. Jeg håber imidlertid at jeg har formået at give et indtryk af, hvor meget det har betydet for mig at være i stand til at nyde godt af den inspiration, som vi alle har modtaget ved enhver kontakt med Einstein.



APPENDIX: Øvelsesvejledninger.

1. EDB-øvelser.
2. Undervisningsforsøg.

A1.2 Potentialbrønden.

De til potentialbrønden hørende energiniveauer samt bølgefunktioner kan bestemmes ved at løse den stationære schrødingeligning, men det er ikke muligt at regne sig frem til en eksplicit formel for brøndens energispektrum. Schrødingeligningen kan imidlertid løses ved hjælp af numeriske metoder. Programmet BRØND løser schrødingeligningen numerisk. I det følgende er angivet en række opgaver som kan løses numerisk ved anvendelse af dette program.

Opg. 1. Bestem energispektret for en elektron i en potentialbrønd, hvis dybde er 300 eV. Brøndens bredde er 2 bohrnradier. Find de korresponderende bølgefunktioner.

Opg. 2. I hvilken orden fremkommer de lige og ulige funktioner?

Opg. 3. Nummerer fra bunden de stationære tilstande og undersøg relationen mellem tilstandens nummer og antal skæringer bølgefunktionen har med x-aksen.

Opg. 4. Hvorledes afhænger energispektret af brøndens dybde og bredde?

Opg. 5. Bestem energiniveauerne i en potentialbrønd, hvis bredde og dybde er henholdsvis 4 bohrnradier og 10000 eV. Sammenlign med potentialboksens energispektrum.

Opg. 6. En positron er bundet i en 1000 eV dyb potentialbrønd, hvis bredde er 1 bohrradius. Tegn skitser over positronens sandsynlighedsfordeling i de tre laveste energiniveauer. Diskuter hvorledes de beregnede sand-

synligheder er i overensstemmelse med den klassiske fysik. I hvilken af de tre tilstande er det mest sandsynligt at træffe positronen i det klassisk "forbudte" område ?

Opg. 7. Vurder anvendeligheden af den i afsnit 5.1.2 givne approksimative formel for energiniveauerne i en potentialbrønd.

Opg. 8. Find de diskrete energiniveauer i en dobbeltbrønd, hvis dybde og bredde er henholdsvis 300 eV og 2 bohrnradier. Afstanden mellem brøndene er 0.5 bohrradius. Sammenlign det beregnede energispektrum med resultatet af opg. 1.

Opg. 9. Beregn hvorledes energispektret i en givendobbeltbrønd er afhængig af afstanden mellem brøndene. Indtegn på millimeterpapir energiniveauerne som funktion af brøndafstanden. Forklar kurvernes udseende.

Opg. 10. Dobbeltbrønden antages ofte at være en god model for en kovalent binding. Giv en kvantemekanisk forklaring på den kovalente binding (analyser resultatet af opg. 8).

FRANCK - HERTZ' FORSØG.

Materiel: Se fotoopstilling og diagram.

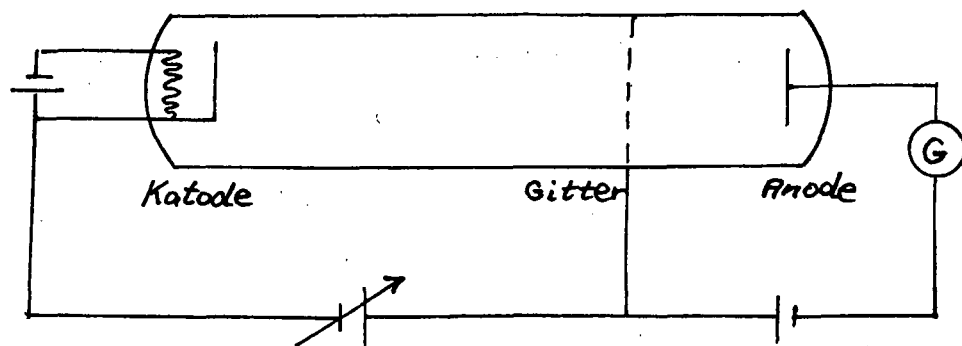
Formål: At eftervise N.Bohr's atomteori: at elektronerne befinder sig i stationære tilstande omkring kernen.

Beskrivelse: Franck-Hertz' forsøg viser, at sammenstød mellem kviksølvatomer og elektroner foregår som "elastiske" sammenstød dvs. på en måde så elektronerne ikke mister energi derved, indtil elektronerne har nået en energi på 4.9 eV. De mister da al deres energi og samtidig udsender kviksølvatomerne en dertil svarende spektrallinie, 2537 Å, svarende til overgang fra den næstlaveste til laveste energitilstand. En elektron kan altså kun afgive energi til et atom, når dens energi er tilstrækkelig til at anslå, excitere, atomet, så det går til en anden stationær tilstand.

I F-H's forsøg høves en elektron i Hg-atomet fra grundtilstanden til den først anslåede tilstand, og springer derefter tilbage igen under udsendelse af et lyskvant med den overskydende energi.

Forsøget er altså en støtte til Bohr's atommodel. Når en gas lyser, exciteres atomerne ifølge Bohr's atomteori til et højere liggende energiniveau for hurtigt derefter at overgå til et lavere niveau under afgivelse af et lyskvant.

Udførelse: Apparatet består af et rør fyldt med kviksølvdamp samt 3 elektroder.

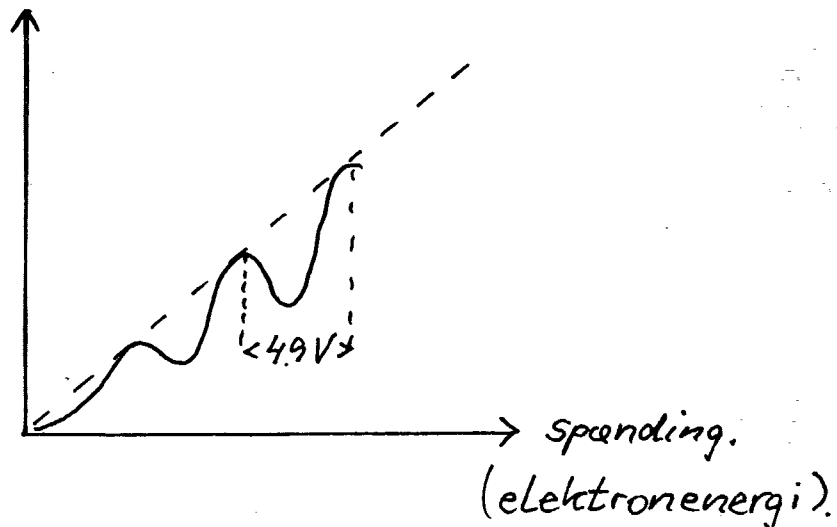


Hvis gassen bombarderes med monoenergetiske elektroner, bør, på grund af energiens kvantisering, excitationen kun ske, hvis elektronen har opnået mindst en vis energi - lig med excitationens energi. Over denne værdi mister visse elektroner energi til atomerne, hvilket kan observeres.

Foran anoden er placeret et gitter med noget højere potential end anodens (dvs. lavere set ud fra elektronens synspunkt) for at de elektroner, som har mistet deres energi ikke skal nå anoden.

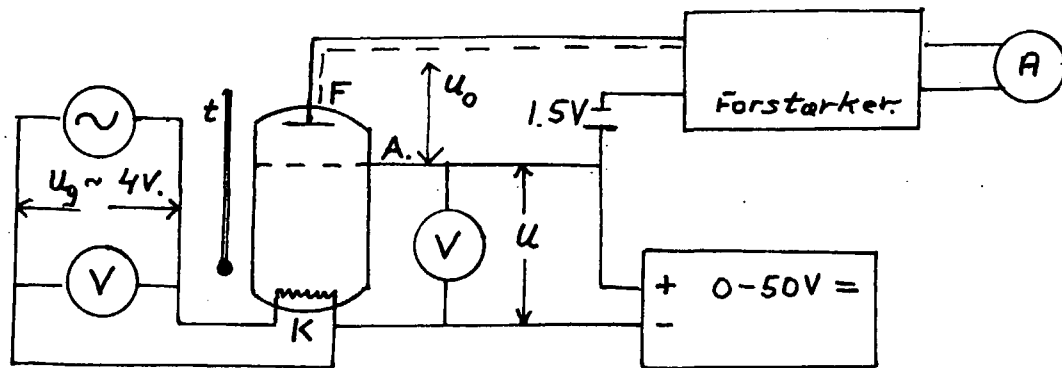
Når spændingen øges successivt, finder man, at elektronstrømmen ved anoden aftager, samtidig med at kviksølvdampen begynder at lyse. Når spændingen øges yderligere opnås gentagne strømminima med en afstand på 4.9 v.

Anodestrøm.



Det første fald i strømmen kan forklares på følgende måde : en elektron med tilstrækkelig stor energi kan anslå et Hg-atom, når den rammer det. Derved mister elektronen så meget energi, at den ikke kan overvinde modspændingen og nå hen til anoden. Strømmen begynder derfor at falde, når elektronerne har tilstrækkelig energi til at anslå et Hg-atom.

Det næste fald i strømmen sker, når elektronerne får energi nok på vej gennem røret til at anslå 2 Hg-atomer. Ved tredje fald anslås 3 Hg-atomer etc. Forskellen i spænding mellem 2 toppe er ca 4.9 V. Det betyder, at der skal 4.9 eV til at anslå eet Hg-atom fra grundtilstanden til første exciterede niveau.



Opstilling :

Røret indeholder Hg-dampe, der opvarmes til temperaturen $t=175 \pm 5^\circ\text{C}$.

- forklar virkningen af glødespændingen U_g .
- forklar virkningen af gitterspændingen U mellem K og A.
- forklar virkningen af modspændingen U_0 mellem A og fangelektroden F.

Under forsøget går der en lille strøm I gennem røret fra F. Vi vil måle sammenhørende værdier af I og spændingen U og sætte dem op i et skema :

- tegn en $(I-U)$ graf og lav en konklusion.

Som alternativ kan der tilsættes en skraver som vist på fotoopstillingen, hvorefter $(I-U)$ grafen optegnes direkte.

ELEKTRONENS BØLGELÆNGDE.

Materiel : Elektrondiffraktionsrør (Teltron 555), lavspændingskub, 2 Voltmetre, 1 milliampere-meter, skydelære samt ledninger og millimeterpapir.

Formål : At eftervise de Broglie's teori om partiklers bølgeegenskaber og søge at bestemme elektroners bølgelængde.

Beskrivelse : Elektrondiffraktionsrøret indeholder en elektronkanon E, der består af en glødetråd, som forsynes med en glødespænding på max 6.3 V, og en cylindrisk anode, som pålægges en høj jævnspænding, der kan accelerere de løsrevne elektroner op til en hastighed så de for så megen energi, at de kan forlade glødetråden. I anodens endeflade er der et cirkulært hul, der tillader en del af elektronerne at passere videre ud i røret (se fig 1), Der bliver således dannet en stråle af elektroner, som er næsten retlinet - det kaldes et beam.

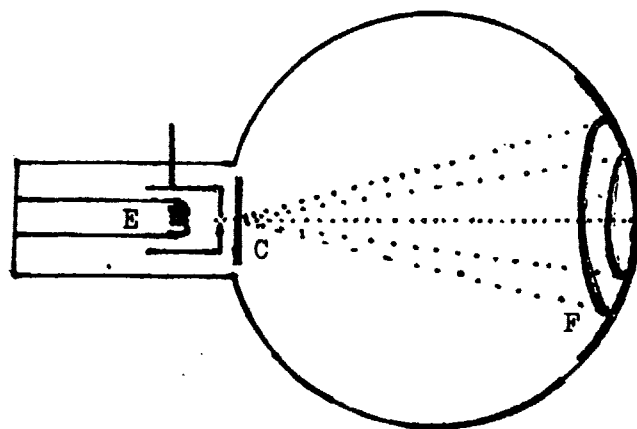


Fig. 1

Foran hullet i anoden er anbragt et tyndt grafitlag C, som rammes af beamet. Grafitlaget består af en mængde små grafitkrystaller, der er orienteret i alle mulige

retninger. En del af disse krystaller vil have en sådan retning i forhold til det indfaldende elektronbeam, at krystalplanerne, der dannes af C-atomernes elektronsystemer, kan skabe konstruktiv interferens, når de rammes af en bølge.

Hvis de indfaldende elektroner har bølgeegenskaber, vil en del af grafitkrystallerne afbøje elektronerne i bestemte retninger i forhold til beamet. Foruden det primære beam, som rammer rørets inderside overfor elektronkanonen, vil man derfor kunne iagttage nogle kegleformede elektronstråler, der danner et par lysende ringe med det primære beam som centrum på rørets inderside ved (F). Dette viser at der er opstået interferens, og dette er jo netop en bølgeegenskab, som elektronerne (trods partikler) må have.

Indersiden af røret (F) er belagt med et fluoriserende stof, som lyser grønt, når det rammes af elektronerne.

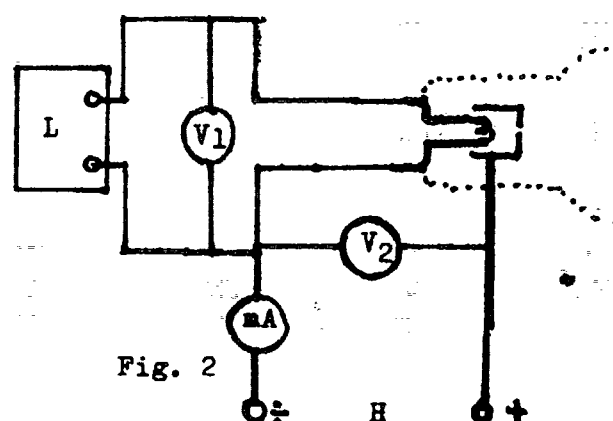


Fig. 2

Udførelse : Diagrammet (fig 2) viser det elektriske kredsløb. Glødetrådets udtag på endeflader af rørets hals forbindes til lavspændingskuben L, Voltmetret V1 måler glødespændingen, denne må ikke overstige 6.3 V.

Den ene glødestrøms bøsning forbindes videre gennem milliamperemetret mA (A-meter område 1 mA) til minus udtaget på højspændingskuben H. Anodetilslutningen på rørhalsen forbindes til + og opstillingen kontrolleres af læreren, inden spænding tilsluttes.

Glødespændingen tilsluttes og reguleres op til ca 5 V, og efter ca 1 minuts opvarmning kan højspændingen slutes til og gradvis øges, men anodestrømmen må hele tiden overvåges, da den aldrig må overstige 0,4 mA - kommer den til det, vil elektronernes intensitet blive så kraftig, at grafitfoliet brændes i stykker og røret ødelægges.

Forsøget må udføres i mørke, så diffraktionsringene kan ses tydeligt. Når anodespændingen U er blevet så stor, at man tydeligt kan se 2 ringe, måles deres diameter d_1 og d_2 , og den tilsvarende anodespænding noteres. Derefter øges anodespændingen og de tilsvarende diametre måles. Der foretages ialt 6 - 7 målinger med en anodespænding i intervallet 2 kV - 4 kV.

Behandling af resultaterne :

Når en elektron har gennemløbet spændingsfaldet U , har den opnået den kinetiske energi Ue , hvor e er dens ladning. Man har da urelativistisk :

$$Ue = \frac{1}{2} mv^2 \quad (1)$$

(U = anodespænding, e = elektronens ladning og m = elektronens hvilemasse)

heraf kan elektronens hastighed v bestemmes :

$$v = \sqrt{\frac{2Ue}{m}} \quad (2)$$

a) hvor er hastigheden v i forhold til lyshastigheden c , begrund om det er rigtigt at fortsætte urelativistisk.

Impulsen for elektronen bliver :

$$p = mv = \sqrt{2Uem} \quad (3)$$

ifølge de Broglie's teori kan elektronerne med impulsen (p) tildeles en bølgelængde λ , hvor λ er lig med h/p , hvor h er Planck's konstant :

$$\text{heraf fås :} \quad \lambda = \frac{h}{2Uem} \quad (4)$$

$$\text{de Broglie :} \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$\text{dvs. :} \quad h = \lambda mv$$

b) hvilken dim. har h ?

Bragg's betingelse for en 1. ordens afbøjning i et krystalgitter er :

$$\lambda = 2d \sin \theta \quad (5)$$

hvor d er afstanden mellem krystalplanerne, og θ er vinklen mellem den indfaldende og den afbøjede bølge. Da θ i vores forsøg altid er en lille vinkel, kan $\sin \theta$ approksimeres med θ målt i radiantal.

c) Vis ved hjælp af en skitse om ligning (5) gælder.

Kaldes afstanden fra grafitfoliet til rørets inderside for R , og diameteren i afbøjningscirklen for D , har vi :

$$\theta = \frac{D}{2R} \quad (6)$$

der indsat i (5) giver :

$$\lambda = \frac{dD}{R} \quad (7)$$

som sammenholdt med (4) bliver til :

$$D = \frac{Rh}{d\sqrt{2em}} \cdot U^{-1/2} \quad (8)$$

Afbild D 'erne som funktion af $U^{-1/2}$. Undersøg om der fremkommer 2 rette linier.

d) Hvis det er tilfældet hvad betyder det så for den fremsatte teori ?

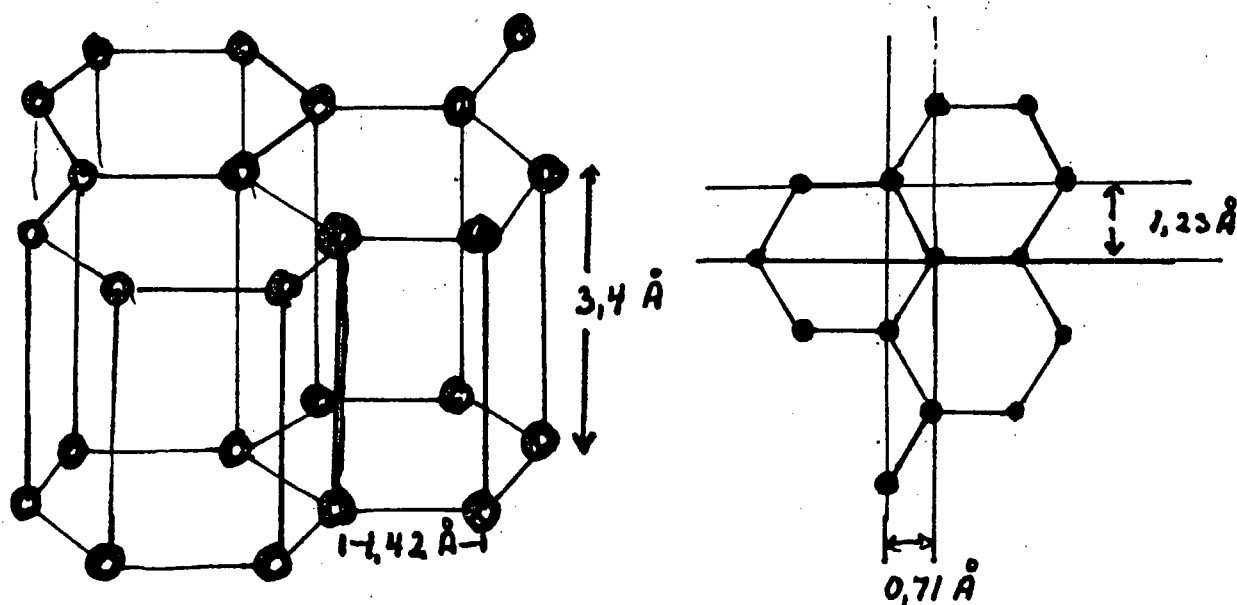


Fig. 3

Grafitkrystallerne består af plane lag opbygget af regelmæssige sekskanter med forholdsvis stor afstand mellem lagene. Ser man på krystalstrukturen for grafit (fig 3), ser man at de mindste afstande mellem krystalplanerne er henholdsvis 0.71 Å og 1.23 Å.

e) hvilken af de 2 ringe kan henføres til afbøjningen fra krystalplanerne på 0.71 Å ?

f) bestem herudfra bølgelængderne for elektronerne ved de forskellige accelerationsspændinger, og undersøg hvor god overensstemmelse, der er med bølgelængderne givet ved ligning (4).

Vi ser bort fra usikkerhedsberegning, men ser gerne en diskussion af fejlkilder ved forsøget.

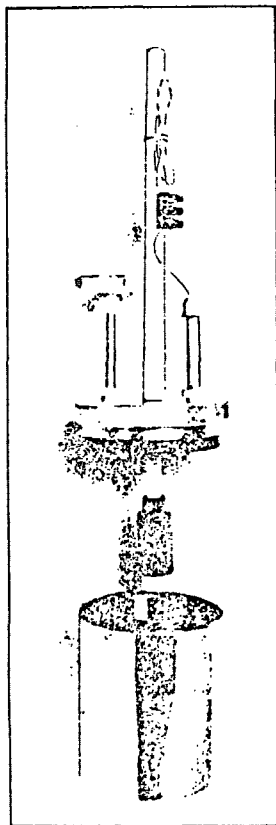
Instrument - oplysninger :

Fabrikanten opgiver at $R = 13.5$ cm, at max. spænding sættes til 5 kV, og anodestrømmen til mellem 0.2 mA og 0.4 mA.

PLANCK'S KONSTANT BESTEMT
VED SORT - LEGEME STRALING.

Materiel : et Modena kalorimeter (se fig), pumpe (min 0.1 torr) og en skriver.

Formål : at bestemme Planck's konstant ud fra sort legeme - stråling.



Beskrivelse : Den mængde varme dQ der kan absorberes af sort - legemet gennem dets overflade S ved en absolut temperatur T , når det er lukket inde i kalorimetret der har en indvendig sort flade og temperaturen T_0 ($T_0 > T$) er givet ved Stefan-Boltzmann's lov :

$$dQ = \sigma S(T_0^4 - T^4)dt \quad (1)$$

hvor σ er den specifikke udstrålingsevne fra det sorte legeme.

Hvis varmekapaciteten fra det sorte legeme kaldes C, så vil dets temperatur vokse med dT, givet ved :

$$dQ = Cdt \quad (2)$$

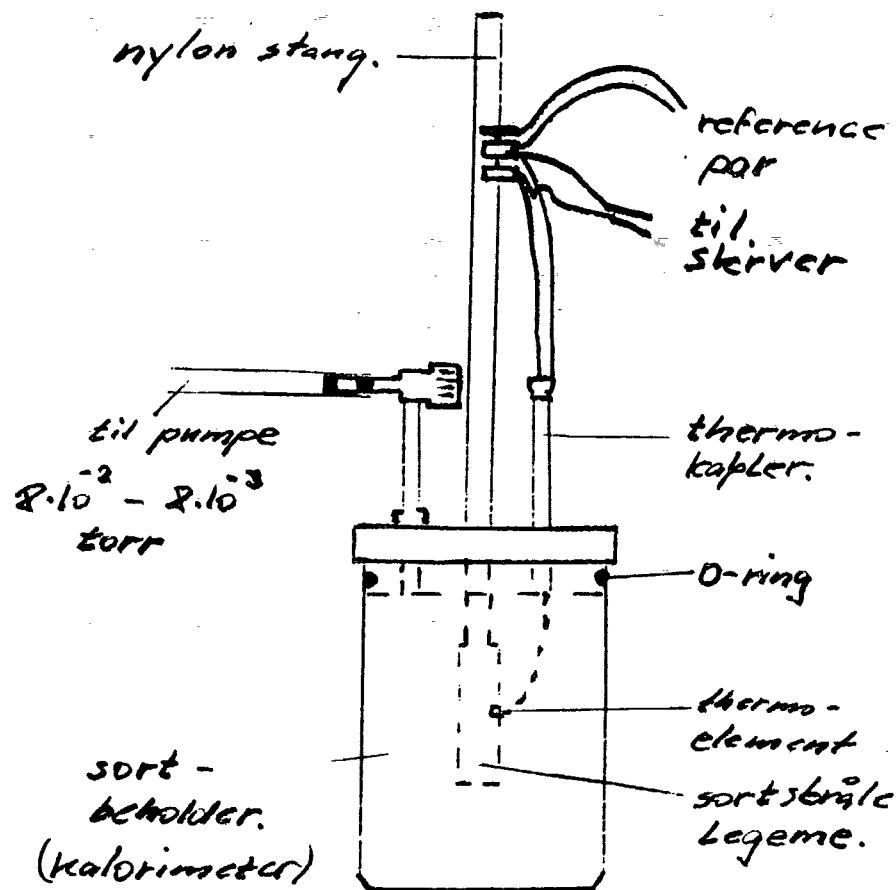
For et endeligt interval af tiden Δt hvor T kan betragtes proportional med t, kan vi kombinere ligningerne (1) og (2) og få :

$$\sigma = \frac{C}{S} \cdot \frac{1}{T_0^4 - T^4} \cdot \frac{\Delta T}{\Delta t} \quad (3)$$

Hvis Stefan-Boltzmann's lov benyttes og integreres med Planck's udstrålings-formler, for den specifikke udstrålingsevne fra et sort legeme i form af dets temperatur finder man at :

$$\sigma = \frac{5^4}{15c^2} \cdot \frac{1}{h^3} \quad (4)$$

ud fra denne formel kan Planck's konstant h bestemmes.



Udførelse : en beholder med passende mængde vand (skal kunne dække kalorimetret neddykket), sættes over til kogning.

Kalorimetret tilsluttes pumpe og skriver og reference ledningerne neddykkes i et glas vand som har stuetemperatur. Pumpen tilsluttes et par min. før vandet koger. Når vandet koger nedsænkes kalorimetret og skriveren tilsluttes med ex. måleområdet 2 mV og 10 mm/min.

Herefter fortsættes opvarmning og plotning af temp/tid kurven i ca 15 min, således at gradienten for 5 - 6 værdier kan bestemmes som :

$$\frac{\Delta T}{\Delta t}$$

(5)

Sort legemet afmonteres og vejes, og dets varmekapacitet bestemmes ud fra en tabel.

Ud fra disse målinger kan (5) indsættes i ligning (3) og derefter kan h bestemmes i ligning (4).

Beregn h og sammenlign (%) med tabelværdi.

Der forlanges ikke usikkerhedsberegning, men gerne en diskussion af fejlkilder ved forsøget.

- 1/78 "TANKER OM EN PRAKSIS" - et matematikprojekt.
Projektrapport af Anne Jensen, Lena Lindenskov, Marianne Kesselhahn 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. Nr. 3 er a jour ført i marts 1984
Lasse Rasmussen, Aage Bonde Kræmmer, Jens Højgaard Jensen.
- 4/78 "TRE ESSAYS" - om matematikundervisning, matematiklæreruddannelsen og videnskabsrindalismen. Nr. 4 er p.t. udgået.
Mogens Niss.
- 5/78 "BIBLIOGRAFISK VEJLEDNING til studiet af DEN MORDERNE FYSIKS HISTORIE". Nr. 5 er p.t. udgået.
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 og Bent C. Jørgensen.
- 7/78 "MATEMATIKKENS FORHOLD TIL SAMFUNDSØKONOMIEN". Nr. 7 er udgået.
B.V. Gnedenko.
- 8/78 "DYNAMIK OG DIAGRAMMER". Introduktion til energy-bound-graph formalismen.
Peder Voetmann Christiansen.
- 9/78 "OM PRAKSIS' INDFLYDELSE PÅ MATEMATIKKENS UDVIKLING". - Motiver til Kepler's: "Nova Stereometria Doliorum Vinariorum".
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 DIFFERENTIALLIGNINGER OG DIFFERENTIALLIGNINGSSYSTEMER". Nr. 12 er udgået
Mogens Brun Heefelt
- 13/79 "CAVENDISH'S FORSØG I GYMNASIET".
Projektrapport af Gert Kreinøe.
Vejleder: Albert Chr. Paulsen

- 67/83 "ELIPSOIDE METODEN - EN NY METODE TIL LINEÆR PROGRAMMERING?"
Projektrapport af Lone Biilmann og Lars Boye
Vejleder: Mogens Brun Heefelt
- 68/83 "STOKASTISKE MODELLER I POPULATIONSGENETIK"
- til kritikken af teoriladede modeller.
Projektrapport af Lise Odgård Gade, Susanne Hansen, Michael Hviid, Frank Mølgård Olsen.
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 69/83 "ELEVFORUDSÆTNINGER I FYSIK"
- en test i 1.g med kommentarer
Albert Chr. Paulsen
- 70/83 "INDLÆRINGS- OG FORMIDLINGSPROBLEMER I MATEMATIK PÅ VOKSEUNDERVISNINGSNIVEAU"
Projektrapport af Hanne Lisbet Andersen, Torben J. Andreasen, Svend Åge Houmann, Helle Glerup Jensen, Keld Fl. Nielsen, Lene Vagn Rasmussen.
Vejleder: Klaus Grünbaum & Anders H. Madsen
- 71/83 "PIGER OG FYSIK"
- et problem og en udfordring for skolen?
Karin Beyer, Sussanne Blegaa, Birthe Olsen, Jette Reich & Mette Vedelsby
- 72/83 "VERDEN IFØLGE PEIRCE" - to metafysiske essays, om og af C.S. Peirce.
Peder Voetmann Christiansen
- 73/83 "EN ENERGIANALYSE AF LANDBRUG"
- økologisk contra traditionelt
ENERGY SERIES No. 9
Specialeopgave i fysik af
Bent Hove Jensen
Vejleder: Bent Sørensen
-
- 74/84 "MINIATURISERING AF MIKROELEKTRONIK" - om videnskabeliggjort teknologi og nytten af at lære fysik
Projektrapport af Bodil Harder og Linda Szkotak Jensen.
Vejledere: Jens Højgaard Jensen og Bent C. Jørgensen
- 75/84 "MATEMATIKUNDERVISNINGEN I FREMTIDENS GYMNASIUM"
- Case: Lineær programmering
Projektrapport af Morten Blomhøj, Klavs Frisdahl, Frank Mølgård Olsen
Vejledere: Mogens Brun Heefelt & Jens Bjørneboe
- 76/84 "KERNEKRAFT I DANMARK?" - Et hørings svar indkaldt af miljøministeriet, med kritik af miljøstyrelsens rapporter af 15. marts 1984.
ENERGY SERIES No. 10
Af Niels Boye Olsen og Bent Sørensen
- 77/84 "POLITISKE INDEKS - FUP ELLER FAKTA?"
Opinionsundersøgelser belyst ved statistiske modeller
Projektrapport af Svend Åge Houmann, Keld Nielsen, Susanne Stender
Vejledere: Jørgen Larsen & Jens Bjørneboe

- 29/80 "ODIN - undervisningsmateriale til et kursus i differentiallyigningsmodeller".
Projektrapport af Tommy R. Andersen, Per H.H. Larsen og Peter H. Lassen.
Vejleder: Mogens Brun Heefelt
- 30/80 "FUSIONSENERGIEN - - - ATOMSAMFUNDETS ENDESTATION".
Oluf Danielsen.
Nr. 30 er udgået.
Udkommer medio 1982 på Fysik-, Matematik- og Kemilærernes forlag.
- 31/80 "VIDENSKABSTEORETISKE PROBLEMER VED UNDERVISNINGSSYSTEMER BASERET PÅ MÆNGDELÆRE".
Projektrapport af Troels Lange og Jørgen Karrebæk.
Vejleder: Stig Andur Pedersen.
Nr. 31 er p.t. udgået
- 32/80 "POLYMERÉ STOFFERS VISCOELASTISKE EGENSKABER - BELYST VED HJÆLP AF MEKANISKE IMPEDANSMÅLINGER OG MOSSBAUER-EFFEKTMÅLINGER".
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.
Nr. 34 er udgået.
Publ. i "Renewable Sources of Energy and the Environment", Tycooli International Press, Dublin, 1981.
- 35/80 "HISTORISKE STUDIER I DEN NYERE ATOMFYSIKS UDVIKLING".
Helge Kragh.
- 36/80 "HVAD ER MENINGEN MED MATEMATIKUNDERVISNINGEN ?".
Fire artikler.
Mogens Niss.
- 37/80 "RENEWABLE ENERGY AND ENERGY STORAGE".
ENERGY SERIES NO.2.
Bent Sørensen.
-
- 38/81 "TIL EN HISTORIE TEORI OM NATURERKENDELSE, TEKNOLOGI OG SAMFUND".
Projektrapport af Erik Gade, Hans Hedal, Henrik Lau og Finn Physant.
Vejledere: Stig Andur Pedersen, Helge Kragh og Ib Thiersen.
Nr. 38 er p.t. udgået
- 39/81 "TIL KRITIKKEN AF VÆKSTØKONOMIEN".
Jens Højgaard Jensen.
- 40/81 "TELEKOMMUNIKATION I DANMARK - oplæg til en teknologivurdering".
Projektrapport af Arne Jørgensen, Bruno Petersen og Jan Vedde.
Vejleder: Per Nørgaard.
Nr. 40 er p.t. udgået
- 41/81 "PLANNING AND POLICY CONSIDERATIONS RELATED TO THE INTRODUCTION OF RENEWABLE ENERGY SOURCES INTO ENERGY SUPPLY SYSTEMS".
ENERGY SERIES NO.3.
Bent Sørensen.

- 55/82 "MATEMATISKE MODELLER" - Litteratur på Roskilde
Universitetsbibliotek.
En bibliografi.
Else Høyrup.
- Vedr. tekst nr. 55/82:
Se også tekst 62/83.
- 56/82 "ÉN - TO - MANGE" -
En undersøgelse af matematisk økologi.
Projektrapport af Troels Lange.
Vejleder: Anders Madsen.
-
- 57/83 "ASPECT EKSPERIMENTET" -
Skjulte variable i kvantemekanikken?
Projektrapport af Tom Juul Andersen.
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen.
- Nr. 57 er udgået.
- 58/83 "MATEMATISKE VANDRINGER" - Modelbetragtninger
over spredning af dyr mellem småbiotoper i
agerlandet.
Projektrapport af Per Hammershøj Jensen &
Lene Vagn Rasmussen.
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 59/83 "THE METHODOLOGY OF ENERGY PLANNING".
ENERGY SERIES NO. 7.
Bent Sørensen.
- 60/83 "MATEMATISK MODEKSPERTISE" - et eksempel.
Projektrapport af Erik O. Gade, Jørgen Karrebæk og
Preben Nørregaard.
Vejleder: Anders Madsen.
- 61/83 "FYSIKS IDEOLOGISKE FUNKTION", som et eksempel på
en naturvidenskab - historisk set.
Projektrapport af Annette Post Nielsen.
Vejledere: Jens Høyrup, Jens Højgaard Jensen og
Jørgen Vogelius.
- 62/83 "MATEMATISKE MODELLER" - Litteratur på Roskilde
Universitetsbibliotek.
En bibliografi. 2. rev. udgave
Else Høyrup
- 63/83 "CREATING ENERGY FUTURES: A SHORT GUIDE TO
ENERGY PLANNING".
ENERGY SERIES No. 8
David Crossley & Bent Sørensen
- 64/83 "VON MATHEMATIK UND KRIEG".
Bernhelm Booss og Jens Høyrup
- 65/83 "ANVENDT MATEMATIK - TEORI ELLER PRAKSIS".
Projektrapport af Per Hedegård Andersen, Kirsten
Habekost, Carsten Holst-Jensen, Annelise von Moos,
Else Marie Pedersen, Erling Møller Pedersen.
Vejledere: Bernhelm Booss & Klaus Grünbaum
- 66/83 "MATEMATISKE MODELLER FOR PERIODISK SELEKTION I
ESCHERICHIA COLI".
Projektrapport af Hanne Lisbet Andersen, Ole
Richard Jensen og Klavs Frisdahl.
Vejledere: Jørgen Larsen og Anders Hede Madsen

- 42/81 "VIDENSKAB TEORI SAMFUND - En introduktion til materialistiske videnskabsopfattelser".
Helge Kragh og Stig Andur Pedersen.
- 43/81 1. "COMPARATIVE RISK ASSESSMENT OF TOTAL ENERGY SYSTEMS".
2. "ADVANTAGES AND DISADVANTAGES OF DECENTRALIZATION".
ENERGY SERIES NO.4.
Bent Sørensen.
- 44/81 "HISTORISK UNDERSØGELSE AF DE EKSPERIMENTELLE FORUDSÆTNINGER FOR RUTHERFORDS ATOMMODEL".
Projektrapport af Niels Thor Nielsen.
Vejleder: Bent C. Jørgensen.
-
- 45/82
- 46/82 "EKSEMPLARISK UNDERVISNING OG FYSISK ERKENDELSE - I+II ILLUSTRERET VED TO EKSEMPLER".
Projektrapport af Torben O. Olsen, Lasse Rasmussen og Niels Dreyer Sørensen.
Vejleder: Bent C. Jørgensen.
- 47/82 "BARSEBÄCK OG DET VÆRST OFFICIELT-TÆNKELIGE UHELD".
ENERGY SERIES NO.5.
Bent Sørensen.
- 48/82 "EN UNDERSØGELSE AF MATEMATIKUNDERVISNINGEN PÅ ADGANGSKURSUS TIL KØBENHAVNS TEKNIKUM".
Projektrapport af Lis Eilertzen, Jørgen Karrebæk, Troels Lange, Preben Nørregaard, Lissi Pedersen, Laust Rishøj, Lill Røn, Isac Showiki.
Vejleder: Mogens Niss.
- 49/82 "ANALYSE AF MULTISPEKTRALE SATELLITBILLEDER".
Projektrapport af Preben Nørregaard.
Vejledere: Jørgen Larsen & Rasmus Ole Rasmussen.
- 50/82 "HERSLEV - MULIGHEDER FOR VEDVARENDE ENERGI I EN LANDSBY". ENERGY SERIES NO.6.
Rapport af Bent Christensen, Bent Hove Jensen, Dennis B. Møller, Bjarne Laursen, Bjarne Lillethorup og Jacob Mørch Pedersen.
Vejleder: Bent Sørensen.
- 51/82 "HVAD KAN DER GØRES FOR AT AFHJÆLPE PIGERS BLOKERING OVERFOR MATEMATIK?"
Projektrapport af Lis Eilertzen, Lissi Pedersen, Lill Røn og Susanne Stender.
- 52/82 "DESUSPENSION OF SPLITTING ELLIPTIC SYMBOLS"
Bernhelm Booss & Krzysztof Wojciechowski.
- 53/82 "THE CONSTITUTION OF SUBJECTS IN ENGINEERING EDUCATION".
Arne Jakobsen & Stig Andur Pedersen.
- 54/82 "FUTURES RESEARCH" - A Philosophical Analysis of Its Subject-Matter and Methods.
Stig Andur Pedersen & Johannes Witt-Hansen.

- 14/79 "BOOKS ABOUT MATHEMATICS: History, Philosophy, Education, Models, System Theory, and Works of Reference etc. A Bibliography".
Else Høyrup. Nr. 14 er p.t. udgæet.
- 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 - FORMAL 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 reality".
-
- 24/80 "MATEMATIKOPFATTELSE HOS 2.G'ERE".
a+b 1. En analyse. 2. Interviewmateriale. Nr. 24 a+b er p.t. udgæet.
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.fl.
- 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 viscoelastiske egenskaber".
Projektrapport, speciale i fysik, af Gert Kreinøe.
Vejleder: Niels Boye Olsen.

- 78/84 "JÆVNSTRØMSLEDNINGSEVNE OG GITTERSTRUKTUR I AMORFT GERMANIUM"
 Specialerapport af Hans Hedal, Frank C. Ludvigsen og Finn C. Physant
 Vejleder: Niels Boye Olsen
- 79/84 "MATEMATIK OG ALMENDANNELSE"
 Projektrapport af Henrik Coster, Mikael Wennerberg Johansen, Povl Kattler, Birgitte Lydholm og Morten Overgaard Nielsen.
 Vejleder: Bernhelm Booss
- 80/84 "KURSUSMATERIALE TIL MATEMATIK B"
 Mogens Brun Heefelt
- 81/84 "FREKVENSafhængig LEDNINGSEVNE I AMORFT GERMANIUM"
 Specialerapport af Jørgen Wind Petersen og Jan Christensen
 Vejleder: Niels Boye Olsen
- 82/84 "MATEMATIK- OG FYSIKUNDERVISNINGEN I DET AUTOMATISEREDE SAMFUND"
 Rapport fra et seminar afholdt i Hvidovre 25-27 april 1983
 Red.: Jens Højgaard Jensen, Bent C. Jørgensen og Mogens Niss
- 83/84 "ON THE QUANTIFICATION OF SECURITY"
 PEACE RESEARCH SERIES NO. 1
 af Bent Sørensen
- 84/84 " NOGLE ARTIKLER OM MATEMATIK, FYSIK OG ALMENDANNELSE".
 Jens Højgaard Jensen, Mogens Niss m. fl.
- 85/84 "CENTRIFUGALREGULATORER OG MATEMATIK"
 Specialerapport af Per Hedegård Andersen, Carsten Holst-Jensen, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen
 Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 86/84 "SECURITY IMPLICATIONS OF ALTERNATIVE DEFENSE OPTIONS FOR WESTERN EUROPE"
 PEACE RESEARCH SERIES NO. 2
 af Bent Sørensen
- 87/84 "A SIMPLE MODEL OF AC HOPPING CONDUCTIVITY IN DISORDERED SOLIDS"
 af Jeppe C. Dyre
- 88/84 "RISE, FALL AND RESURRECTION OF INFINITESIMALS"
 af Detlef Laugwitz
- 89/84 "FJERNVARMEOPTIMERING"
 af Bjarne Lillethorup & Jacob Mørch Pedersen
- 90/84 "ENERGI I 1.G- en teori for tilrettelæggelse"
 af Albert Chr. Paulsen
- 91/85 "KVANTETEORI FOR GYMNASIET"
 1. Lærervejledning
 Projektrapport af: Birger Lundgren, Henning Sten Hansen og John Johansson
 Vejleder: Torsten Meyer

92/85 "KVANTETEORI FOR GYMNASIET
2. Materiale

Projektrapport af: Birger Lundgren, Henning
Sten Hansen og John Johansson

Vejleder: Torsten Meyer