

Kvantemekanikkens fødsel

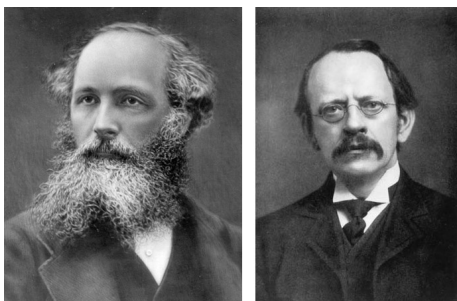
Af Per Hedegård, Niels Bohr Institutet og Nano Science Center, Københavns Universitet

Kvantemekanikken bliver hverken undfanget eller født i løbet af 9 måneder. Man kan med nogen ret sige, at det derimod skete i løbet af en lang udvikling, der startede med Thomsons opdagelse af elektronen i 1897 og sluttede med Diracs ligning og Paulings beskrivelse af den kemiske binding omkring 1930. Præcist midt i denne periode ligger Niels Bohr's afgørende kvante-baserede beskrivelse af brintatomet.

I denne artikel vil jeg kort beskrive, hvordan de forskellige afgørende elementer i den samlede naturbeskrivelse vi kalder kvantemekanikken kom til verden. Kvanteteoriens grundelementer lå færdige i 1930 og siden er det område af fysikken, hvor teorien finder anvendelse — fra sorte huller over superledere og makromolekyler til Higgspartikler og superstrengene — udvidet enormt. Men de grundlæggende principper har ingen for alvor været i stand til at stille spørgsmåltegn ved.

Lys, atomer og elektroner

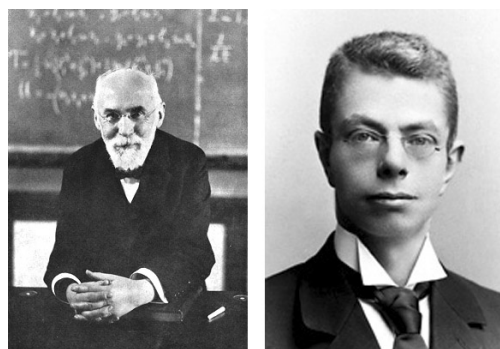
Før den revolutionerende udvikling for alvor kunne tage fart, var det nødvendigt at hovedrolleindehaverne i den tidlige kvanteverden — elektroner og fotoner — var erkendte fysiske realiteter. Hele historien om kvantemekanikken er en blanding af problemer med at finde ud af på den ene side, hvad vores verden er opbygget af (atomer, elektroner, lys, osv), og på den anden side, hvilke naturlove der bestemmer stoffets opførsel. Det sker med J.J. Thomsons opdagelse af elektronen i 1897. Før da havde mange vidst, at der var noget galt med den klassiske beskrivelse af verden. Fx var Maxwell i 1870'erne meget bekymret over varmfylden af visse gasser, og varmestrålingen fra opvarmede legemer passer heller ikke med den klassiske termodynamik og elektromagnetisme. Også før Thomsons forsøg tydede flere ting på eksistensen af en negativt ladet elektrisk partikel.



Figur 1. J.C. Maxwell (1831-1879) og J.J. Thomson (1856-1940).

I 1896 opdagede Zeeman effekten opkaldt efter ham. Ifølge den vil det udsendte lysspektrum fra forskellige atomer kunne ændres, hvis atomet bliver udsat for et magnetfelt. En spektrallinie splitter i mange tilfælde op

i tre linier (med en adskillelse, der er proportional med magnetfeltet). Denne effekt passede fint med en teori, som den store hollandske teoretiske fysiker Lorentz nogle få år før havde fremført. Ifølge Lorentz består stoffet bl.a. af nogle små ladede partikler, elektroner, som kan udføre svingninger omkring ligevægtspunkter og derved påvirke lys, der løber igennem stoffet. Ved at benytte den af ham indførte Lorentz-kraft, kunne Lorentz også vise, at disse små oscillatorer (eller "antenner" om man vil) vil få bevægelser med tre forskellige frekvenser når de bliver udsat for et stærkt magnetfelt. Endvidere ville disse frekvenser afhænge af forholdet mellem elektronernes ladning og deres masse, e/m . Lorentz og Zeeman fik Nobelprisen i 1902 (den anden uddelte overhovedet). Der var dog såkaldte 'anormale' Zeeman-effekter, hvor en spektrallinie kun opdeles i to linier når stoffet udsættes for et magnetfelt. Dette kunne Lorentz teori ikke forklare. I Thomsons eksperimenter fra 1897 lykkedes det Thomson at løsrive elektroner fra stoffet og måle fx deres e/m direkte. Han finder en værdi, der passer med den Lorentz og Zeeman finder, og det vel og mærke en værdi, der er meget stor, hvilket tyder på, at elektroner er flere tusinde gange lettere end atomet.



Figur 2. H.A. Lorentz (1853-1928) og P. Zeeman (1865-1943).

Næste kapitel i kvantehistorien er Planck's forklaring fra år 1900 på varmestrålingens spektrum. Ud fra en klassisk betragtning vil mængden af stråling udsendt fra et varmt legeme vokse med frekvensen i 4. potens. Dette havde lord Rayleigh vist samme år. Planck finder først en simpel interpolationsformel mellem Rayleighs klassiske og en empirisk formel for tidligere målinger (der af tekniske grunde kun gælder for høje frekvenser).

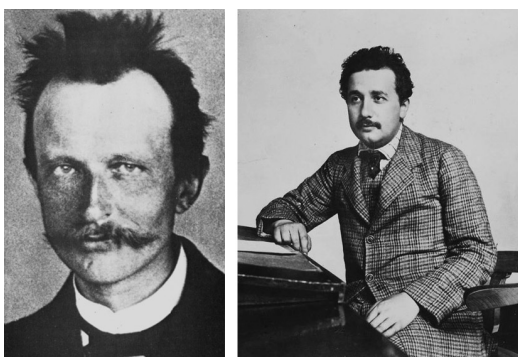
Plancks formel siger at strålingsintensiteten er proportional med:

$$B(\nu) = \frac{2h\nu^3/c^2}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (1)$$

Her er ν strålingens frekvens, T er legemets temperatur og h er en ny konstant, som Planck indfører. Planck benytter den simple matematiske formel:

$$\frac{1}{1 - e^{h\nu/kT}} = 1 + e^{-1 \cdot h\nu/kT} + e^{-2 \cdot h\nu/kT} + \dots, \quad (2)$$

til at slutte, at energien er kvantiseret i enheder af $h\nu$. Faktisk er det lidt uklart hvilken energi, der er kvantiseret. Planck synes at mene, at det er energien af de uspecificerede oscillatorer som udsender lys med den givne frekvens, der er kvantiseret. Hvorom alting er, Planck's konstant har set dagens lys, og den 1. november 1900 sættes ofte som kvantemekanikkens fødselsdag.

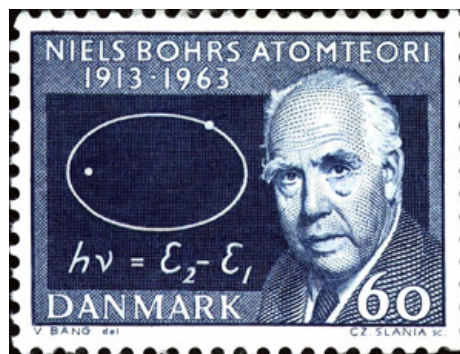


Figur 3. M. Planck (1858-1947) og A. Einstein (1879-1955).

Einstein og Bohr, energikvanter

Herefter sker der ikke meget på kvantefronten. Man ved ikke rigtigt, hvordan Planck's nye konstant manifesterer sig konkret. Det er først Einstein, der med to arbejder — et i 1905 om fotoelektrisk effekt, og et i 1907 om stoffernes varmfylde — bringer historien videre. I begge tilfælde opererer Einstein med energikvanter. Hertz havde i 1887 iagttaget at lys, der rammer et stykke materiale resulterer i, at der udsendes elektroner fra materialet, og elektronerne har en energi, der er direkte relateret til frekvensen af lyset, og ikke lysets intensitet, som man måske kunne forestille sig. Det skyldes, siger Einstein, at lyset består af korpuskler, hvis energi er direkte proportional med lysets frekvens: $E = h\nu$, og det med Plancks konstant som faktor. Einstein genopliver dermed Newtons gamle ide om, at lys er partikler, men benytter dog lysets frekvens — et begreb, der knytter sig til lysets bølgenatur — til at beskrive partiklerne. Meget mystisk! Einstein gentager tryllesnummeret et par år senere, hvor han forklarer, hvorfor varmfylden for visse faste stoffer, som fx diamant, ikke opfylder den klassiske lov, der siger, at varmfylden af et stof er direkte proportional med, hvor mange mol stof der er. Varmen i et stof består af svingninger af atomerne, og Einstein antager, at disse svingningers energi er kvantiseret, og kun kan antage værdier, der er et helt

antal gange $h\nu$, hvor ν er frekvensen af svingningerne. Denne antagelse fører til en simpel formel, som passer meget bedre med de på den tid nyeste målinger af varmfylden, og det især ved lave temperaturer.



Figur 4. N. Bohr (1885-1962).

Det næste store bidrag til kvantemekanikken kommer med Niels Bohr i 1913. Her skal vi ikke gå i detalje med Bohrs ide, det sker fyldigt andre steder i dette nummer af Kvant. Blot skal nævnes, at Bohr i sin ph.d.-afhandling fra 1911 i høj grad var klar over de mange problemer, der var med at beskrive stofferne, og især metallerne, ud fra antagelsen om, at deres egenskaber var styret af de mange elektroner, som man nu vidste var en vigtig bestanddel af atomerne. Fx konkluderer Bohr i sin sidste sætning i afhandlingen, at magnetisme er helt uforståelig fra et klassisk synspunkt: "Det synes ikke muligt, på Elektrontheoriens nuværende Standpunkt, ud fra denne Theori at forklare Legemernes magnetiske Egenskaber". Bohrs model og ide om stationære baner — orbitaler — tages hurtigt op andre steder i Europa. Især Arnold Sommerfeld i München, som laver en generel formel, der sammen med Bohrs $h\nu = E_1 - E_2$, skal blive den gamle kvanteoris hovedresultat. Formlen siger, at kun de klassiske baner er tilladte, som opfylder

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = nh \quad (3)$$

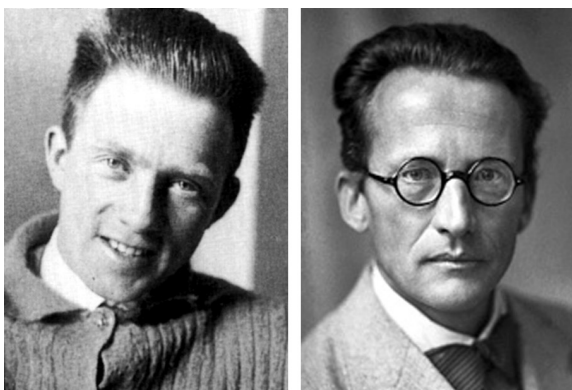
hvor \mathbf{p} er elektronens impuls og integralet er langs banen. n er et helt tal. Der er nu åbnet for muligheden af mere systematisk at beregne diverse spektre af mange atomer. Fx lykkes det Sommerfeld at forklare den såkaldte finstruktur ved at generalisere den klassiske Newtonske bevægelsesligning med Einsteins relativitetsteori og kombinere det med sin kvantiseringsbetingelse.



Figur 5. A. Sommerfeld (1868-1951) og L. de Broglie (1892-1987).

Partikler og bølger, Heisenberg og Schrödinger

Alt er dog ikke godt. Man har stadig problemet, som Einsteins arbejde understreger: Er lys bølger eller partikler? Snart skal det også vise sig, at det samme spørgsmål kan stilles når det drejer sig om elektronerne — er de bølger eller partikler? I Frankrig postulerer de Broglie, at elektroner er bølger, og sammenhængen mellem deres impuls og bølgelængden er givet ved $p = h/\lambda$. Hvis det er korrekt, så kan Bohr-Sommerfeld kvantiseringens betingelse fortolkes på den måde, at i et atom må elektronen danne en stående bølge, der har et helt antal bølgelængder rundt i atomet.



Figur 6. W. Heisenberg (1901-1976) og E. Schrödinger (1887-1961).

Det egentlige gennembrud kommer i høj grad fra den næste generation af fysikere. Det er unge mennesker midt i tyverne (med Schrödinger som en undtagelse — han er knap 40 år, da han skriver sin ligning). Werner Heisenberg og Erwin Schrödinger formulerer i 1925 hver sin version af en egentlig kvanteteori, som ender med at afklare partikel-bølge problematikken. Heisenberg er mest revolutionær. Han opgiver ethvert klassisk fysisk billede af den atomare virkelighed. Begreber som *sted* og *hastighed* er ikke direkte anvendelige for elektroner. I teorien bliver de til komplekse matricer i et uendelig dimensionalt vektorrum. Matricer, som opfylder betingelsen

$$xp - px = i\hbar. \quad (4)$$

Schrödinger er lidt mere “venlig”. Han formulerer sin — komplekse — bølgeligning, som fuldender de Broglies idé om at elektroner også er bølger. Det skal dog snart vise sig, at de to teorier er helt ækvivalente. Det viser Schrödinger faktisk selv i 1926.

Spin og statistik

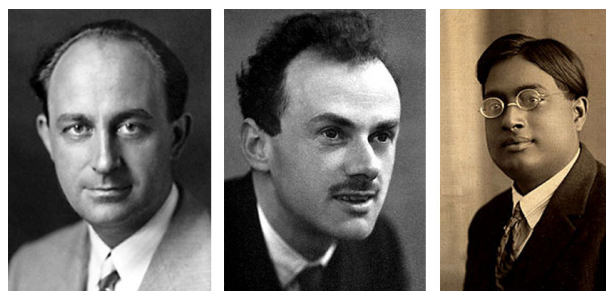
Kvanteteorien er dog ikke komplet med Schrödinger og Heisenberg. Der er stadig problemer med den anormale Zeeman-effekt, og man har ikke nogen egentlig forklaring på, hvordan elektronerne opfører sig i atomer med mange elektroner. En af de manglende ingredienser er *spin*. To meget unge fysikere, Goudsmit og Uhlenbeck, postulerer, at elektronen har en indre frihedsgrad — den spinner om sin egen akse. Og dette spin kan beskrives med et impulsmoment, hvis værdi er præcis $\frac{1}{2}\hbar$. På

trods af en oprindelig skepsis — farten på elektronens “ækvator” lader til at være større end lysets hastighed — tager Wolfgang Pauli ideen op. Pauli er Heisenbergs jævnaldrende studiekammerat fra München, hvor de studerede hos Sommerfeld. Han ser to konsekvenser af spinnets. Dels kan det forklare den anormale Zeeman effekt, dels kan det benyttes til at forklare atomernes opbygning med flere atomer. Spinnets bidrager til Zeeman-effekten, idet en ladet snurrende partikel vil skifte frekvens når den udsættes for et magnetfelt. Vigtigst, så formulerer Pauli sit princip: Der kan højst være en elektron i hver kvantetilstand. Spinnets er afgørende når det drejer sig om atomernes opbygning: en kvantetilstand inkluderer en beskrivelse af spinnets tilstand. Indtil da havde man baggrunden for fx det periodiske system været meget dunkel, hvilket Pauli levende beskriver i sin Nobelforelæsning fra 1945.



Figur 7. S. Goudsmit (1902-1978), G.E. Uhlenbeck (1900-1988) og W. Pauli (1900-1958).

Paulis idé har mange meget vidtrækkende konsekvenser. Heisenberg og den ligeledes unge engelske fysiker Paul Dirac giver en præcis matematisk version af Paulis princip: Den komplette kvantetilstand for flere elektroner skal skifte fortegn, hvis man bytter om på to af elektronerne! Denne version af princippet er meget generelt. Det lader sig nemlig også anvende i situationer, hvor elektronernes indbyrdes vekselvirkning er betydningsfuld og Paulis simple princip ikke kan bruges. Dernæst er den af afgørende betydning for hele faststoffysikken. Det havde nemlig længe været en gåde, hvorfor elektronerne ikke bidrager til varmfylden i fx metallerne. I Italien sidder en ung studerende, Enrico Fermi, og han har læst Paulis arbejde, og bliver inspireret til at benytte Pauli-princippet i beskrivelsen af en gas af elektroner, som man må forestille sig den i et metal. Han viser, at der kommer en helt naturlig forklaring på den manglende varmfylde, og desuden viser det sig, at selv ved lave temperaturer vil en elektrongas have et meget stort tryk. Den såkaldte Fermi-Dirac statistik er født.



Figur 8. E. Fermi (1901-1954), P.A.M. Dirac (1902-1984) og S.N. Bose (1894-1974).

Alle disse udviklinger drejer sig om elektroner. På lysfronten er der tilsvarende problemer. Her afklares problemerne med et bidrag fra en uventet side: Den unge indiske fysiker, Satyendra Nath Bose, skriver et brev til Einstein i 1924. Heri beder han Einstein om at kigge på en artikel, som Bose har skrevet igennem, og om muligt sørge for at den bliver publiceret. Einstein er meget begejstret for Boses ide. Bose forestiller sig nemlig, at lys er en gas af identiske partikler. Den statistiske beskrivelse af disse partikler er dog anderledes end den, som man benytter for klassiske partikler. Det postuleres, at to tilstande for gassen af lyspartikler, som blot afviger ved, at to af partiklerne er byttet om, skal opfattes som én tilstand. Med denne simple antagelse kan Bose fx let udlede Plancks formel for varmestråling. Den såkaldte Bose-Einstein statistik er født.

Siden 1929 har vi klassificeret elementarpartikler alt efter om de opfylder Fermi-Dirac eller Bose-Einstein statistik. Partikler, der opfylder Fermi-Dirac statistik (eller om man vil, Pauli princippet) klassificeres som *fermioner*, mens partikler, der opfylder Bose-Einstein statistik, er *bosoner*.

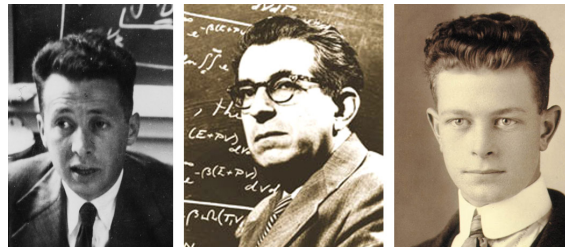
Exchange og Magnetisme

Kombinationen af spin og Pauli-princip skal i slutningen af 1920'erne vise sig at være nøglen til forståelsen af to meget store gåder: Hvorfor er stofferne magnetiske, og hvorfor binder atomer sig sammen i molekyler? Hvis en elektron spinner, så kan den opfattes som en lille strømførende spole, og en sådan har man vidst siden Ampere og Ørsted i 1820'erne vil opføre sig som en magnet med nordpol og sydpol. Men i en rigtig magnet lader det til, at de små elektroniske magneter har deres nordpoler pegende i samme retning. Klassisk set er det helt umuligt, det vil koste for meget energi. Heisenberg opdager imidlertid, at det kan være energetisk favorabelt for elektroner at have spin pegende i samme retning. I så fald er elektronerne nemlig identiske, og må ifølge Pauli princippet ikke være i samme tilstand, hvilket i praksis for visse atomer kan betyde, at elektroner må undgå at komme tæt på hinanden. Men da elektroner i forvejen frastøder hinanden, da de er negativt ladede, så er der herved opstået en måde at "spare" elektrisk energi ved at lade spindet pege i samme retning. Heisenberg kaldte denne subtile vekselvirkning mellem spin for *exchange*. Exchange forklarer altså eksistensen af makroskopiske ferromagneter. Tankegangen har imidlertid meget omfattende konsekvenser. Store dele af kernefysikken er domineret af exchange.

Exchange og kemiske bindinger

Men mest vigtigt er det ganske givet, at også forklaringen på den kemiske binding skyldes en form for exchange-vekselvirkning. To — naturligvis unge — tyske fysikere, Walter Heitler og Frits London, studerer i 1928 det simpleste molekyle, H_2 . Ved at benytte Heisenberg og Paulis principper lykkes det dem at vise, at de to brintatomer foretrækker at binde sig til hinanden, og denne gang som følge af en exchange vekselvirkning, hvor molekylets to elektroners spin

vinder energi ved at pege modsat hinanden. Denne ide påvirker den amerikanske kemiker Linus Pauling, som på denne tid i slutningen af 20'erne er post-doc på forskellige europæiske fysikinstitutter, bl.a. i København hos Bohr. Her lærer han den nye kvanteteori direkte fra dens "fædre", og han bliver så begejstret for Heitler og Londons ide, at han udvikler den til en meget omfattende teori for meget store klasser af molekyler. Mange af kemiens empiriske håndregler, om elektronpar, oktetretnen osv. finder med et slag en kvantefysisk forklaring.



Figur 9. W. Heitler (1904-1981), F. London (1900-1954) og L. Pauling (1901-1994).

Dirac: Spin og antipartikler

Det sidste afgørende bidrag til kvanteteorien giver Paul Dirac i 1929. Han sætter sig for at kombinere Einsteins relativitetsteori med kvanteteorien. Resultatet bliver en simpel ligning, Dirac-ligningen, der beskriver en enkelt relativistisk elektron. Den simple ligning har meget dybe konsekvenser: Elektronens spin "opstår" i ligningen og behøver ikke længere postuleres, det er en konsekvens af relativitetsteorien. Dernæst viser det sig, at ideen om *anti-partikler* følger naturligt fra ligningen. Det viser sig nemlig, at ligningen har løsninger med negativ energi. Dirac foreslår, at disse løsninger i almindelighed (altså i vakuum) er fyldt med elektroner (i stil med den Fermi-gas af elektroner, som Fermi beskrev for elektronerne i et metal). Skulle en af tilstandene ikke være fyldt, opstår et — positivt ladet — hul. Dette hul er elektronens anti-partikel, positronen.

Konklusion

I 1930 er alle de nævnte elementer i kvanteteorien på plads, og der har faktisk ikke siden været tilføjet noget. Al kvantefysik har siden drejet sig om at anvende disse principper og forklare alskens fysiske fænomener. Til dato er det lykkedes over al forventning, og der kendes stadig ingen fænomener, hvor man må formode, at kvanteteorien kommer til kort.



Per Hedegård, professor, Niels Bohr Institutet og Nano Science Center, KU. Per Hedegård er teoretisk faststoffysiker og beskæftiger sig fx med molekylær nanoelektronik. Nærværende artikel er baseret på et foredrag givet i anledningen af Niels Bohr-året.