

Pravijo, da ni teorije v naravoslovju, ki bi močnejše vplivala na mišljenje ljudi kot kvantna mehanika in pojasnila več različnih vrst pojavov. Slišali ste, kako deluje kvantna mehanika na majhnem odseku na fronti fizike. Širše gledano je kvantna mehanika tudi pripravna, da z njo osvetlimo razvoj fizike. Razvoj kvantne mehanike je dokaj zapleten. Lani smo se posvetili sevanju, letos pa so na vrsti delci z maso. Opisali bomo delo Johanna Jakoba Balmerja (1825 do 1898), objavljeno leta 1885, Nielsa Bohra (1885 do 1961), objavljeno leta 1913, Louisa de Brogliea (1892 do 1987), objavljeno v letih 1923 do 1925 in Erwina Schrödingerja (1887 do 1961), objavljeno 1926. Vodila nas bo misel, da hodi fizika po dveh nogah, eksperimentalni in teoretični. Po eni nogi ne bi prišla daleč, čeprav je res, da je mogoče "skakati po eni nogi".

J. J. BALMER

V razvoju kvantne mehanike je imela pomembno vlogo spektroskopija. S spektroskopom je Joseph Fraunhofer v letih 1814 in 1815 raziskal sončni spekter in opazil več kot štiristo temnih (absorpcijskih) črt ter jih uporabil kot znake za merjenje valovne dolžine. S spektralno analizo sta začela Robert Wilhelm Bunsen in Gustav Robert Kirchhoff 1859. Vsak element ima značilen spekter. Odkrila sta rubidij in cezij. S sončnim spektrom in zvezdnimi spektri je postalo mogoče raziskati sestavo snovi na Soncu in drugih zvezdah.

Ali je mogoče zaslediti urejenost v velikem številu črt v spektrih plinov, v katerih sevajo atomi? Spektri svetlobe so vsekakor bolj zapleteni kot spektri zvočil, na primer strune. Eleuthère Mascart je leta 1869 zapisal: "[...] podobne skupine črt so harmoniki, povezani z molekulsko zgradbo sevajočega plina."

Anders Jonas Ångström je že leta 1866 izmeril valovno dolžino štirih črt v vidnem delu vodikovega spektra: rdeče, modre in dveh vijo"ličastih.

Johnstone Stoney je leta 1871 izrazil valovne dolžine treh od teh črt kot $\lambda = \lambda_S/N$ s skupnim faktorjem $\lambda_S = 13127,714 \text{ nm}$ in $N = 32, 27$. Arthur Schuster je leta 1882 menil, da bi bile take enačbe smiselne le, če bi natančno poznali valovne dolžine.

J. J. Balmer, učitelj na baselski dekliški srednji šoli in predavatelj geometrije na baselski univerzi, je od profesorja fizike na tej univerzi zvedel za štiri Ångströvodikove valovne dolžine.

Balmer je nastavljal enačbo

$$\lambda = \lambda_0 f(n), \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

s skupnim faktorjem λ_0 in funkcijo $f(n)$ celega števila n . Najprej je z deljenjem izračunal razmerje, ga izrazil z ulomkom celih števil in ta razstavil na prafaktorje:

$$656,21/486,074 = 1,350 = 27/20 = 3^3/(2^2 \cdot 5)$$

$$656,21/434,01 = 1,512 = 189/125 = 7 \cdot 3^3/(5^3)$$

$$656,21/410,12 = 1,600 = 8/5 = (2^3/5)(3^3/3^3)$$

Tako je dobil skupni faktor:

$$656,21 \text{ nm} \cdot 5/3^2 = 434,0 \text{ nm} \cdot 7 \cdot 3/5^2 =$$

$$= 486,074 \text{ nm} \cdot 3/2^2 = 410,12 \text{ nm} \cdot 2^4/3^2 = 364,56 \text{ nm} = \lambda_0.$$

Zapisal je: “Valovne dolžine štirih vodikovih črt dobimo, če osnovno dolžino 364,56 nm po vrsti pomnožimo s koeficienti 9/5, 4/3, 25/21 in 9/8. Štirje koeficienti očitno ne sestavljajo pravilne vrste, brž ko pa drugi in četrti koeficient razširiš s 4, postane vrsta pravilna: koeficienti imajo v števcu števila $3^2, 4^2, 5^2, 6^2$ in v imenovalcu ustrezna števila, zmanjšana za 4.”

Tako je prišel do Balmerjeve enačbe:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 2^2}, \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{4}{\lambda_0} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, \dots$$

Dobro ujemanje je dobil še za peto Ångströmovo črto z $n = 7$. Nekoliko slabše je bilo

Ime	$\lambda_{\text{Ångstr}}^\circ$	λ_{Balmer}	razlika	n
H $_{\alpha}$	656,210 nm	656,208 nm	+0,002 nm	3
H $_{\beta}$	486,074	486,08	-0,006	4
H $_{\gamma}$	434,01	434,0	+0,01	5
H $_{\delta}$	410,12	410,13	-0,01	6
	396,81	396,97	-0,16	7

ujemanje za štiri nadaljnje črte z $n = 8$ do $n = 11$, ki sta jih izmerila H. W. Vogel in William Huggins neodvisno drug od drugega v ultravijoličnem delu spektra “belih zvezd”. Leta 1880 jima je prvič uspelo fotografirati spekter zvezde.

Balmer je imel kar nekaj dela, o čemer priča neobjavljen neuspešen poskus z manjšim skupnim faktorjem $\lambda'_0 = 3,038 \text{ nm}$

$$6^3 \lambda'_0 = 686,2 \text{ nm}$$

$$\frac{5}{2} \cdot 4^3 \lambda'_0 = 481 \text{ nm}$$

$$\frac{1}{7} \cdot 10^3 \lambda'_0 = 434 \text{ nm}$$

$$3^3 \cdot 5 \lambda'_0 = 410,1 \text{ nm}.$$

S svojo enačbo je Balmer poleg Balmerjeve serije napovedal še druge serije. Namesto 2^2 je postavil n'^2 $n' = 1, 3, 4, 5, \dots$ in izbiral $n > n'$. Pozneje so odkrili serije:

Theodore Lyman v letih 1906-1914 za $n' = 1$, na ultravijoličnem delu spektra,

Friedrich Paschen 1908 za $n' = 3$, vse na infrardečem delu spektra,

Frederick Summer Brackett leta 1922 za $n' = 4$,

August Hermann Pfundt leta 1923 za $n' = 5$,

Curtis J. Humphreys leta 1953 za $n' = 6$.

Johannes Robert Rydberg 1890 je opisal vodikov spekter z enačbo:

$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

z Rydbergovo konstanto $R_y = 4/\lambda_0 = 1,097216 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, zdajšnja vrednost je $1,0967758 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$.

N. BOHR

Na kopenhavnsko univerzo se je vpisal leta 1903, magistriral leta 1909 in doktoriral leta 1911 o elektronih v kovini. Leta 1911 se je odpravil s štipendijo k Josephu Johnu Thomsonu v Cambridge. Ker se z njim ni najbolje razumel, je nadaljeval izpopolnjevanje na inštitutu Ernesta Rutherforda v Manchestru. Opustil je eksperimentalno delo in se začel ukvarjati s teorijo o zgradbi atomov in molekul.

Elektron z maso m in nabojem $-e_0$ kroži po krogu s polmerom r okoli mirujočega jedra.

Centripetalna sila je električna sila:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}.$$

$$\text{Kinetična energija } W_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{e_0^2}{8\pi\epsilon_0 r}.$$

$$\text{Potencialna energija } W_p = -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -2W_k.$$

$$\text{Polna energija } W = W_k + W_p = W_k - 2W_k = -W_k = \frac{1}{2}W_p.$$

$$\text{Frekvenca kroženja } \nu_{kr} = \frac{v}{3\pi r} = \sqrt{\frac{32\pi^2\epsilon_0^2 W_k^3}{\pi^2 m e_0^4}}.$$

Po Planckovem zgledu je privzel zvezo $W_k = K\nu_{kr}$, ki je klasično ni bilo mogoče pojasniti. Mislil je le na osnovno stanje. Spektri, ki nastanejo pri prehodih med vzbujenimi stanji in osnovnim stanjem, so se mu zdeli preveč zapleteni, da bi po njih bilo mogoče sklepati na zgradbo atomov. Pisanje članka se mu je ustavilo. Na začetku leta 1913 se je vrnil v København in srečal znanca. Hans Marius Hansen, ki je prej v Göttingenu raziskoval spektre, ga je opozoril na Rydbergovo delo, ki ga Bohr ni poznal. Bohr je povedal: "Brž ko sem videl Balmerjevo enačbo, mi je bilo vse jasno."

$$K = \frac{1}{2}nh, \quad -W = W_k = \frac{1}{2}h\nu_{kr}$$

Polovico v zvezi je pojasnil takole: na začetku je elektron zelo daleč od jedra in mu ustreza frekvenca 0, na koncu pa frekvenca ν_{kr} , povprečje je $\frac{1}{2}\nu_{kr}$.

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = R_y \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right).$$

Pri prehodu med stanjema prevzame razliko energij kvant: $h\nu = W_n - W_{n'}$. $h\nu = \frac{hcR_y}{n'^2} - \frac{hcR_y}{n^2}$.

$$W_n = -W_k = \frac{W_1}{n^2}, \quad |W_1| = \frac{me_0^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = \frac{me_0^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 h^2} = 13,6 \text{ eV}.$$

$$r = n^2 r_B, \quad r_B = \frac{e_0^2}{8\pi\epsilon_0 W_k} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me_0^2} = 0,055 \text{ nm}.$$

$$cR_y = \frac{me_0^4}{8\varepsilon_0^2\hbar^3} = \frac{me_0^4}{64\pi^3\varepsilon_0^2\hbar^3}, \text{ izmerjeno: } 3,29 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}, \text{ izračunano s tedanjimi podatki: } 3,1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}.$$

Zasnoval je načela korespondence: prehod iz stanja $n' = n + 1$ v stanje n : $\nu \propto \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} = \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n^3} \propto \nu_{kr} = \frac{q^2}{3W_k} \propto W_k^{3/2} \propto 1/n^3$. Pri velikih n se frekvenca izsevane svetlobe približa frekvenci kroženja. V klasični elektrodinamiki seva delec valovanje s frekvenco kroženja.

Bohrov privzetek $W_k = N = \nu_{kr}$ je prešel v enačbo za vrtilno količino: $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}nh\frac{v}{2\pi r}$, $mvr = n\frac{h}{2\pi}$.

Evan Evans je leta 1913 na Bohrovo prošnjo izmeril valovno dolžino črt v helijevem spektru. Bohrove enačbe so uporabne za helijev ion, v katerem elektron kroži okoli jedra z nabojem $2e_0$. (V enačbah je treba $e_0^2 \cdot e^2$ nadomestiti z $(2e_0)^2 \cdot e_0^2 = 4e_0^4$. Črte, ki jih je Bohr priredil ioniziranemu heliju, sta Pickering in Alfred Fowler imela za vodikove črte. V razpravi s Fowlerjem je Bohr uvidel, da mora upoštevati reducirano maso, ker se jedro in elektron gibljeta okoli skupnega težišča $m \rightarrow m/(1 + m/m_j)$ in $R_y \rightarrow R_{y\infty}/(1 + m/m_j)$. Fowler je sprejel izboljšano Bohrovo razlago.

James Frank in Gustav Hertz sta leta 1914 opazovala trke elektronov z atomi živega srebra v pari. Ugotovila sta, da so trki prožni, dokler napetost ne preseže 4,9 V, potem postanejo neprožni in začne para sevati ultravijolično svetlobo z valovno dolžino 253 nm.

Henry Moseley je leta 1915 raziskoval rentgenske spektre in ugotovil, da za valovne dolžine črt K_α velja enačba $\frac{1}{\lambda_{K\alpha}} = \frac{(Z-1)^2}{\lambda_M}$, $\lambda_M = \frac{4}{3R_y} = 121,6 \text{ nm}$.

Našteta merjenja so podprla Bohrov model in prispevala k temu, da so ga s časom sprejeli.

L. DE BROGLIE

Zagovarjal je osnovno misel, da imajo kvanti maso $< 10^{-53} \text{ kg}$ in jih je treba v posebni teoriji relativnosti obravnavati podobno kot elektrone. Na drugi strani je elektronom treba prirediti valovanje – fazno valovanje.

$$W^2 = c^2p^2 + m^2c^4, \quad W = \hbar\omega, p = \hbar k, \omega^2 = c^2(k^2 + m^2c^2/\hbar^2).$$

Privzel je, da je faza valovanja enaka v vseh koordinatnih sistemih: $kx - \omega t = k'x' - \omega't'$. Iz tega izhaja, da se $(\omega/c, k)$ transformira po Lorentzevo kot (ct, x) .

V lastnem opazovalnem sistemu delca z maso imejmo valovanje s krožno frekvenco $\omega' = mc^2/\hbar$ in z neskončno valovno dolžino: $k' = 0$. V opazovalnem sistemu, v katerem se delec giblje s hitrostjo v po osi x , pa je $\omega = \gamma\omega'$, $k = \gamma v\omega'/c^2$.

Tako dobimo fazno hitrost $c_f = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{v} > c$ in skupinsko hitrost $c_g = \frac{d\omega}{dk} = c^2\frac{k}{\omega} = v$. Hitrost faznega valovanja je večja od c , kar pomeni, da tega valovanja ni mogoče neposredno opazovati in je dvomljivo zahtevati invariantnost faze, drugi rezultat pa je smiseln.

Nerelativistični približek: $k\hbar = mv$, $\omega = \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m}$ da fazno hitrost $c_f = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{v} + \frac{1}{2}v$ in $c_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar\hbar k}{m} = v$. V tem približku je $\lambda_B = \frac{2\pi}{k} = \frac{\hbar}{mv}$.

Valovanje, ki ustreza elektronu na Bohrovemu tiru, ne sme samo sebe oslabiti: $n\lambda_B = 2\pi r$, $nh = 2\pi mvr$, $mvr = n\frac{\hbar}{2\pi}$. To pojasnilo Bohrove enačbe za vrtilno količino je bil glavni uspeh de Brogliejevega premisleka.

Sam je zapisal: "Fazno valovanje, periodični pojav in svetlobne kvante sem namenoma pustil dokaj nedoločene [...] V predloženi tezi je boljše videti shemo, ki še nima popolnoma določene fizikalne vsebine kot dokončno sprejeto doktrino."

E. SCHRÖDINGER

E. Schrödingerja je Peter Debye, ki je vodil skupni kollokvij fizikov z univerze in ETH v Zürichu, prosil, naj poroča o de Broglievem privzatu, ki da je zbudil precej zanimanja. Schrödinger je to storil na način, ki se ni razlikoval od de Broglievega. Po seminarju je Debye izjavil – tako je poročal Felix Bloch, – da je to otročje. Njihov učitelj Arnold Sommerfeld jih je vendar učil, da je treba valovanje obravnavati z valovno enačbo. Schrödinger ni odgovoril, a čez čas je izjavil, da je našel valovno enačbo za "fazno" valovanje. O njej je poročal na enem od prihodnih seminarjev. Najprej je v posebni teoriji relativnosti izpeljal enačbo, ki jo zdaj poznamo kot Klein-Gordonovo enačbo. Uvidel je, da ta enačba ni prava in da mora izhajati iz Newtonove mehanike.

Vzemimo valovno enačbo za elektromagnetno valovanje $\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 E}{c^2 \partial t^2}$ in jo z nastavkom $E(x, t) = \mathcal{E}(x) \cos \omega t$ prevedimo v amplitudno enačbo $\frac{d^2 \mathcal{E}}{dx^2} + k^2 \mathcal{E} = 0$, $k = \omega/c$.

Preidemo v mehaniko: $k^2 = p^2/\hbar^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{p^2}{2m} = \frac{2m}{\hbar^2} W_k = \frac{2m}{\hbar^2} (W - W_p)$
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi^2}{dx^2} + V\psi = W\psi$

To posplošimo na tri razsežnosti in dobimo parcialno diferencialno enačbo $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(r)\psi = W\psi$. Rešimo jo z robnim pogojem $\psi(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ in z zahtevo, da je ψ – Schrödinger ga je imenoval valovni skalar – povsod končen.

Za vodikov atom vstavimo $V = -e_0^2/(4\pi\epsilon_0)$ in dobimo po daljšem računanju za lastne energije $W'_n = -\frac{me_0^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2}$. Schrödingerjeva lastna vrednost energije se sklada z Bohrovo energijo! V slednjo sta vgrajeni Bohrova enačba za vrtilno količino $mvr = n_B\hbar$, ki jo pojasni de Broglieva enačba $n_B\lambda_B = 2\pi r$.

Walter Elsasser je leta 1925 naredil pregled pojavov, ki utegnejo podpirati de Brogliev privzetek in navedel merjenja Davissona in Kunsmana pri odboju elektronov na kovinah in Ramsauerjev pojav pri sipanju elektronov v žlahtnih plinih.

Prvi interferenčni poskusi z elektroni so uspeli Clintonu J. Davissonu in Lestru H. Germerju leta 1927 z elektroni z majhno energijo na nikljevem monokristalu in Georgeu Pagetu Thomsonu (sinu J. J. Thomsona) v letih 1927 in 1928 z elektroni z veliko kinetično energijo na tankih kovinskih lističih.

V enačbi za Bohrovo energijo moramo, če jo primerjamo s Schrödingerjevo lastno energijo, kvantnemu številu n dati nov pomen: $n = n_r + l + 1$. n_r je radialno kvantno število $n_r = 0, 1, 2, \dots$, ki šteje vozle (krogelno simetrične) radialne valovne funkcije, obhodno kvantno število $l = 0, 1, 2, \dots$ podaja kvadrat velikosti vrtilne količine, magnetno obhodno kvantno število – v energiji se neposredno ne pojavi – $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $|m_l| \leq l$ pa komponento vrtilne količine.

Taka sprememba pomena ali reinterpreteracija je neizogna, saj bi se sicer rezultat širše teorije (Schrödingerjeve kvantne mehanike) ne razlikoval od ožje teorije (Bohrovega modela).

Ali je to naključje? Namesto odgovora ugotovimo, da obveljajo lahko le trditve, ki so se skladale s tedanjimi opazovanji. Bohrov model in de Brogliev privzetek sta se skladala z Balmerjevo enačbo. To skladanje je osnovni pogoj, da je mogoče nekatere količine reinterpreterirati.

Ali sta s stališča Schrödingerjeve kvantne mehanike Bohrova in de Broglieva izpeljava zgrešeni? Po tedanjih kriterijih sta bili uporabna opisa pojavov v naravi: “pojasnjevalna približna resnica”, explanatory approximate truth EAT. Ko je staro kvantno mehaniko nadomestila Schrödingerjeva kvantna mehanika, so se kriteriji spremenili.

Pojmov iz niza

domneva, privzetek (predpostavka, postulat), načelo (princip), model, izrek, zakon, teorija ne uporabljamo vedno dosledno.

A. Einstein je menil: “Teorija naredi tem globlji vtis, čim bolj so njene predpostavke preproste, čim več različnih stvari zajame in čim večje je območje njene uporabnosti”.

Bohrov model in de Brogliev privzetek sta pri začetku tega niza, nerelativistična kvantna mehanika pa na koncu.

Fizika ne prihaja le do novih spoznanj o naravi, ampak naravo opisuje z vse širšega stališča.

Literatura

Balmerjeva enačba (neobjavljeno)

Atomski model Nielsa Bohra, Obzornik mat. fiz. **33** (1985) 109,

De Brogliejevo valovanje, Obzornik mat. fiz. **31** (1984),

Razvoj fizike DZS, Ljubljana 1996, str. 367-371,

Fizika. Tretji del, DMFA - Založništvo, Ljubljana 2002, str. 187-196.

Dodatek 1: Balmerjeve objave

J. J. Balmer, *Notiz über die Spektrallinien des Wasserstoffs*, Verhandlungen der Naturforschenden Gesellschaft in Basel **7** (1884) 548; *Annalen de Physik und Chemie* **25** (1885) 80,

Zweite Notiz über die Spektrallinien des Wasserstoffs, Verhandlungen der Naturforschenden Gesellschaft in Basel **8** (1885) 750

Eine neue Formel für Spektralwellen, Verhandlungen der Naturforschenden Gesellschaft in Basel **11** (1896) 448; Annalen der Physik und Chemie **60** (1897) 380

Dodatek 2: Bohrove objave

On the constitution of atoms and molecules, Phil. Mag. **26** (1913) 1-25; 476-502; 857-875

Dodatek 3: Nekateri de Broglie objave v letih od 1923 do 1925

Ondes et quanta, Comptes rendus (Zbrana dela akademije znanosti) (1923);

Quanta de lumière, diffraction at interférences

Les quanta, la théorie cinétique des gaz et le principe de Fermat

Recherche sur la théorie des quanta, Annales de Physique (1925) (objavljeno doktorsko delo iz leta 1924)

Dodatek 4: Schrödingerjeve objave v *Schrödingerjevem čudovitem letu 1926*

Quantisierung als Eigenwertaufgabe (Erste Mitteilung), Ann. d. Phys. **79** (1926) 95

Quantisierung als Eigenwertaufgabe (Zweite Mitteilung), Ann. d. Phys. **79** (1926) 489

Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen, Ann. d. Phys. **79** (1926) 734

Quantisierung als Eigenwertaufgabe (Dritte Mitteilung), Störungstheorie mit Anwendung auf den Starkeffekt der Balmerlinien, Ann. d. Phys. **80** (1926) 637

Quantisierung als Eigenwertaufgabe (Vierte Mitteilung), Ann. d. Phys. **81** (1926) 109

Der stetige Übergang von der Mikro- zu der Makromechanik, Naturwissenschaften **14** (1926) 664