

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Juraj Šebesta; Rudolf Zajac

Storočnica Nielsa Bohra. II. Cesta ku kvantovej mechanike

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 30 (1985), No. 4, 185--197

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/138873>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1985

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

Storočnica Nielsa Bohra

II. Cesta ku kvantovej mechanike

Rudolf Zajac a Juraj Šebesta, Bratislava

Niels Bohr vypracoval svoj model atómu v r. 1913 ako súkromný docent na katedre profesora Martina Knudsen*) na univerzite v Kodani. Toto miesto zastával v rokoch 1912–1914. Mal nemálo pedagogických povinností, z ktorých najatraktívnejšia preň bola prednáška o mechanických základoch termodynamiky. Vykonal aj povinnosti asistenta a mal na starosti poslucháčov medicíny. Preto o nejakej spolupráci s vyspelejšími študentami alebo mladými kolegami na riešení teoretických problémov nemohlo byť ani reči. V takejto situácii s radosťou prijal návrh, inšpirovaný profesorom Rutherfordom, aby na univerzite v Manchestri nahradil ako prednášateľ matematickej fyziky Charlesa Galtona Darwina**), ktorého povolali po vypuknutí prvej svetovej vojny do armády.

V Manchestri bol N. Bohr v sústavnom priamom kontakte s Rutherfordom a mohol sa oveľa viac venovať svojej problematike: štruktúre atómov. Roky 1914–1916, strávené v Manchestri, možno nazvať aj rokmi prelomu, v ktorých sa Bohrova koncepcia experimentálne potvrdila a slúžila za východisko ďalšieho teoretického výskumu.***)

Pod Bohrovou koncepciou rozumieme tieto idey:

1. Atómy sú stabilné systémy, zložené z kladne nabitého jadra, v ktorom je sústredená takmer celá jeho hmotnosť, a z elektrónového obalu.
2. Energia a veľkosť momentu hybnosti elektrónov, viazaných v atóme, môžu nadobúdať iba diskkrétne, kvantované hodnoty.****)

*) M. KNUDSEN (1871–1949) prevzal katedru po Christianovi Christiansenovi, ktorého sme spomenuli v [1].

***) CH. G. DARWIN (1887–1962) bol synom astronóma Georga Howarda Darwina a vnukom slávneho biológa Charlesa Roberta Darwina. Neskoršie (od r. 1923) bol profesorom prírodnej filozofie (t.j. fyziky) v Edinburghu. Katedru po ňom v r. 1936 prevzal MAX BORN.

****) Z Manchestru sa v r. 1916 Bohr vrátil do Kodane už ako vedec svetového formátu a prevzal vedenie novozaloženej Katedry teoretickej fyziky na tamajšej univerzite. V roku 1920 sa stal riaditeľom novozaloženého Ústavu teoretickej fyziky v Kodani.

*****) Neskoršie SOMMERFELD a DEBYE ukázali, že aj priemet momentu hybnosti elektrónov do význačného smeru je kvantovaný a napokon PAULI poukázal na akúsi dvojznačnosť elektrónov, čo vyústilo do KRONIGOVHO, UHLENBECKOVHO a GOUDSMITOVHO postulátu o vlastnom momente hybnosti elektrónu a jeho kvantovaní.

3. Atóm vyžiari elektromagnetické žiarenie ν_{nm} , keď elektrón „preskočí“ zo stacionárneho stavu s energiou E_m do stacionárneho stavu s nižšou energiou E_n , pričom platí Bohrova podmienka frekvencií

$$(1) \quad \nu_{nm} = \frac{E_m - E_n}{h},$$

kde h je Planckova konštanta.

Uvedené idey tvoria jadro Bohrových prác z roku 1913, ktoré prešlo nezmenené do kvantovej mechaniky. V ďalšom budeme sledovať vývin modernej fyziky z hľadiska upresnenia a teoretického zdôvodnenia Bohrovej koncepcie.

História by nebola históriou, keby pri tom nebolo veľa tápania, nepotvrdených hypotéz a blúdenia.

Experimentálne potvrdenie Bohrovej koncepcie

Antonius Johannes van den Broek (1870–1926) vo svojich prácach v r. 1911, 1913 a 1914 zaviedol atómové číslo Z a uviedol do súvisu Mendelejevovu tabuľku prvkov s týmto číslom (počtom elektrónov v atóme). Experimentálne dokázal, že náboj jadra je určený číslom Z a nie polovičnou hmotnosťou atómu, ako sa pôvodne predpokladalo. Manchesterské experimenty rozptylu častíc α v látke umožnili určiť náboj jadier prvkov a potvrdili van den Broekove údaje. Bohr v liste Carlovi Wilhelmovi Oseenovi z 5. februára 1913 práce van den Broeka privítal [2].

Veľký význam mali v tom čase Moseleyove experimenty. Henry Gwyn Jeffreys Moseley nadviazal na Barklove*) objavy a v lete r. 1913 skúmal charakteristické röntgenové žiarenie rôznych prvkov. 16. novembra 1913 v liste informoval Bohra o výsledkoch svojich meraní, ktoré sa týkali K -čiar prvkov od vápnika po zinok [3]. Každý prvok vytvára v röntgenovom spektre dve hlavné čiary K_α a K_β . Pre frekvencie ν_α čiar K_α získal Moseley jednoduchý vzťah

$$(2) \quad \nu_\alpha = \nu_0(Z - 1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right).$$

Obdobný vzorec uviedol pre L čiary, ktoré pozoroval u ťažších prvkov. Vo vzťahu (2) je ν_0 konštanta rovnaká pre všetky prvky (vlastne Rydbergova konštanta). Podľa Moseleyho chemické vlastnosti prvku neurčuje atómová hmotnosť, ale jeho atómové číslo Z , čo je v súlade so základnými Rutherfordovými a Bohrovými predstavami. Moseley**) tým tiež odôvodnil, prečo v Mendelejevovej tabuľke za železom nenasleduje nikel a kobalt, ako by vyplývalo z ich atómových hmotností, ale najprv kobalt a potom nikel.

*) CHARLES GLOVER BARKLA (1877–1944) spolu s CHARLESOM A. SADLEROM ukázal, že pri absorpcii röntgenových lúčov vysielajú atómy sekundárne žiarenie charakteristické pre daný prvok.

***) MOSELEY — vari najmilší Rutherfordov spolupracovník — sa narodil vo Weymonthe v Anglicku 23. novembra 1887. Padol v Dardanelách v prvej svetovej vojne 10. augusta 1915.

Interpretáciu vzťahu (2) podal v r. 1914 nemecký fyzik Walther Ludwig Julius Kossel (1888–1956) v stati *Zur Absorption homogener Röntgenstrahlen II*, Ver. d. Deutsch. Phys. Ges. 16 (1914), s. 953–963. Kossel v tom čase spolupracoval v Mníchove s Conradom Röntgenom a Maxom von Lauem. Predpokladal, že charakteristické röntgenové čiary prvkov vzniknú v dôsledku toho, že primárne tvrdé žiarenie vyrazí elektrón z niektorej vnútornej Bohrovej dráhy. Na jeho miesto „preskočí“ elektrón vzdialenejší od jadra, pričom atóm vyžiari elektromagnetické žiarenie podľa Bohrovej podmienky frekvencií (1). Konkrétne čiara o frekvencii ν_α podľa (2) vznikne, keď na miesto jedného z dvoch elektrónov v najnižšej vrstve *K* preskočí elektrón z najbližšej vrstvy *L*. (Čiara K_β vznikne „preskokom“ elektrónu z ďalšej vrstvy *M* na najnižšiu hladinu).

Moseleyho mravčia práca a Kosselova interpretácia boli veľmi povzbudivé pre teóriu Nielsa Bohra. Priame potvrdenie Bohrovej podmienky frekvencií (1) pre optické spektrá prišlo z Berlína. Tu pôsobili v r. 1911–1914 James Franck (1882–1964) ako docent a Gustav Ludwig Hertz (1887–1975) ako asistent profesora Heinricha Rubensa (1865 až 1922), ktorý stál už v r. 1900 pri kolíske kvantovej teórie.

História Franckovho a Hertzovho pokusu je zaujímavou ukážkou toho, aké sú často kľukaté cesty v dejinách fyziky. Franck a Hertz od r. 1911 študovali vzťah medzi ionizačnými potenciálmi plynov a kvantovou teóriou. Najvýznamnejšie boli ich experimenty v roku 1914, keď skúmali zrážky elektrónov s ortuťovými parami.*) Ich aparátúra bola pomerne jednoduchá. V kremíkovej banke, sčasti naplnenej ortuťou, sa tvorili ortuťové pary pri tlaku 1 mm Hg (133,3 Pa) a teplote 150 °C. Za zdroj katódových lúčov slúžil rozžeravený platínový drôt. Platínová anóda bola spojená cez galvanometer so Zemou. Pri napätí 4,9 V sa popri čiarach od rozžeravenej platínovej katódy objavila v spektroskope jediná ortuťová čiara o vlnovej dĺžke 253,6 nm.

Franck a Hertz podali túto interpretáciu svojho experimentu: Kým urýchléné elektróny nedosiahnu energiu $h\nu$, odrážajú sa pružne od atómov ortuti. Len čo dosiahnu energiu $h\nu$, časť elektrónov spôsobuje ionizáciu ortuťových pár a časť pritom vyvolá vyžiarenie svetla o vlnovej dĺžke 253,6 nm, ktorá korešponduje s energiou $E = 4,9$ eV podľa vzťahu $E = h\nu$. Vychádzali pritom z názoru Johanna Starka (1874–1957) z roku 1908, podľa ktorého čiarové spektrá vznikajú pri ionizácii atómov a molekúl, pričom ich frekvencia súvisí s ionizačnou energiou U podľa vzťahu

$$(3) \quad h\nu = U.$$

N. Bohr bol od začiatku presvedčený, že Franckov a Hertzov pokus potvrdzuje jeho podmienku frekvencií (1). Kinetická energia elektrónu 4,9 eV je práve energia potrebná na excitáciu optického elektrónu v atóme ortuti pri nepružnej zrážke s voľným elektrónom. Pri návrate do základného stavu vyžiari atóm podľa vzťahu (1) svetlo o vlnovej dĺžke 253,6 nm. Vyžiarené svetlo v dôsledku fotoelektrického efektu vyrazí elektróny z platínovej elektródy.

Tento podružný efekt interpretoval Franck a Hertz ako ionizáciu v zmysle vzťahu (3).

*) Ich správa o týchto pokusoch aj s originálnym náčrtom experimentu je reprodukováaná v [4]. Náčrt experimentu je prevzatý do [5].

Podľa Bohrových výpočtov vyplýva zo spektroskopických údajov pre ionizačnú energiu ortuti 10,5 eV [6]. Bohr pripravil v Manchestri aj projekt experimentu, ktorým by svoje úvahy potvrdil, ale pokus sa nerealizoval, lebo univerzitný fúkač skla bol ako Nemeč počas vojny internovaný. Až v r. 1917 americkí experimentátori Davis a Goucher v New Yorku ukázali, že ionizácia vo Franckovom-Hertzovom pokuse je podružným efektom [7]. V článku *Die Bestätigung der Bohrschen Atomtheorie im optischen Spektrum durch Untersuchung der unelastischen Zusammenstöße langsamer Elektronen mit Gasmolekülen* (Physikalische Zeitschrift 20, 1919, s. 132–134) sa Franck a Hertz stotožnili s Bohrovým stanoviskom*) [8].

Bohrova-Sommerfeldova teória

Spomenuli sme už, že Arnold Sommerfeld bol medzi prvými, čo privítali Bohrov model atómu. Na korešpondenčnom lístku, ktorý poslal Bohrovi 4. septembra 1913, označil jeho prácu za mimoriadne zaujímavú, najmä preto, že sa v nej teoreticky určila hodnota Rydbergovej-Ritzovej konštanty. Sommerfeld potom pokračoval: „Aj keď som predbežne ešte trochu skeptický voči modelom atómu vôbec, nepochybne je výpočet spomínaných konštant veľkým výkonom...“ [10]. História zase vyprodukovala paradox: práve skeptik Sommerfeld zmobilizoval svoje veľké matematické znalosti a fyzikálnu invenciu, aby zdokonalil Bohrov názorný model. Zaviedol namiesto kruhových eliptické dráhy elektrónov a relativistické korekcie, ktorými vysvetlil jemnú štruktúru spektrálnych čiar vodíkového atómu, normálny Zeemanov efekt a niektoré iné javy.

Sommerfeld nadviazal na Planckovu myšlienku o univerzálnosti elementárneho objemu fázového priestoru**) a Bohrovo kvantovanie veľkosti momentu hybnosti rozšíril na systémy s viacerými stupňami voľnosti, keď v decembri 1915 postuloval kvantovú podmienku pre násobne periodické pohyby

$$(4) \quad I_k = \int p_k dq_k = n_k h ,$$

kde p_k je zovšeobecnená hybnosť, q_k zovšeobecnená súradnica, h Planckova konštant a n_k celé kladné číslo ($n_k = 1, 2, 3, \dots$). V prípade eliptických dráh elektrónov zovšeobecnými súradnicami q_k sú sférické súradnice r, ϑ, φ a p_k sú príslušné kánonicky združené zovšeobecné hybnosti $p_r, p_\vartheta, p_\varphi$. Sommerfeld publikoval svoj vzťah (4) a dôsledky

*) FRANCK a HERTZ dostali v r. 1926 Nobelovu cenu za fyziku (za rok 1925) za objav zákonov zrážok elektrónov s atómami. G. Hertz svoju prednášku pri prevzatí Nobelovej ceny 11. decembra 1926 začal slovami: „Význam výskumu ionizácie atómov pri zrážkach s elektrónmi spočíva v skutočnosti, že poskytol priamy experimentálny dôkaz základných predpokladov Bohrovej atómovej teórie [9].“

**) Planck ukázal v r. 1906 v prvom vydaní knihy *Vorlesungen über die Theorie der Wärmestrahlung*, Leipzig, J. A. Barth (pozri tiež [11]), že elementárny objem dvojrozmerného fázového priestoru má veľkosť konštanty h . Neskôr sa pre systémy o f stupňoch voľnosti v kvaziklasickom priblížení zaviedol elementárny objem fázového priestoru h^f .

z neho vyplývajúce, až keď ho Einstein ubezpečil, že výsledky pripravovanej všeobecnej teórie relativity nijako neovplyvnia teóriu atómov. Tak sa stalo, že podobný článok uverejnil William Wilson (1875–1965) nezávisle od Sommerfelda vo *Philosophical Magazine* už v júni 1915. Japonský fyzik Jun Ishiwara (1881–1947) uverejnil v trochu inej forme vzťah (4) už v máji 1915 v časopise *Tokyo Sugaku Buturigakkakiwi Kizi*. Sommerfeld, ktorý svoju teóriu prednášal na seminároch už v r. 1914, tieto práce v r. 1915 ešte nepoznal.*)

Vzťah (4) zohral významnú úlohu pri vzniku Heisenbergovej maticovej mechaniky v r. 1925 a Schrödingerovej vlnovej mechaniky v r. 1926. Napokon v kvaziklasickom priblížení sa tento vzťah (BKW aproximácia) doteraz používa.

Uvedli sme, že vzťah (4) získali takmer súčasne a nezávisle traja autori, ako sa to konečne môžeme dočítať v prístupnej citovanej Sommerfeldovej knihe [12]. Menej známe už je, že vzťah (4) a dôsledky z neho vyplývajúce uviedol Bohr v obsiahlom článku, ktorý mal vyjsť začiatkom roku 1916 vo *Philosophical Magazine*. Bohr už dostal korektúry článku, keď mu Sommerfeld poslal svoju prácu. Vtedy sa Bohr rozhodol článok stiahnuť. Korektúry však zostali zachované a ich fotokópie vyšli v jeho zobrazených spisoch v r. 1981 [13].

Princíp korešpondencie

Bohrov model atómu mal nedostatky, ktoré si sám Bohr jasne uvedomoval už od r. 1914. Stabilitu atómov v najnižšom energetickom stave neodôvodňoval, ale postuloval. Kvantovanie energie a iných fyzikálnych veličín nevyplývalo z teórie, ale sa vzťahom (4) postulovalo. Elektróny konali po dráhach klasický pohyb, ale v stacionárnych stavoch sa atómu udeľovala výnimka z klasickej teórie, pričom sa postulovala bez hlbšieho teoretického odôvodnenia. Po začiatočnej eufórii, podmienenej Franckovým-Hertzovým pokusom, vysvetlením normálneho Zeemanovho efektu a do istej miery aj Starkovho efektu (rozštiepenie spektrálnych čiar v magnetickom, resp. elektrickom poli) sa začali hromadiť neprekonateľné prekážky: Bohrovej-Sommerfeldovej teórii tvrdošijne odolával atóm hélia (a samozrejme aj ťažšie atómy), molekula vodíka a problém chemickej väzby vôbec. Pomocou starej teórie nevedeli vysvetliť intenzitu a polarizáciu spektrálnych čiar, nebolo nijakého vysvetlenia pre anomálny Zeemanov efekt.

V tejto situácii sa Bohrove a Sommerfeldove cesty do istej miery rozchádzali. Sommerfeld zotrval na názornom modeli a riešenie hľadal v „kabale celých čísiel“, t.j. v zavádzaní nových kvantových čísiel. Bohr hľadal riešenie v princípe korešpondencie, ktorý úspešne uplatnil už v r. 1913. Ako to vyplýva z Heisenbergovho svedectva [14], Bohr nelipol na názornosti svojho modelu. Tým sa vysvetľuje nadšenie, s akým prijal v r. 1925 Heisenbergovu nenázornú maticovú mechaniku, prečo sa stal jej zástancom a akýmsi ideovým vodcom.

*) Po výmene listov s Wilsonom a Bohrom v druhom vydaní svojej knihy *Atombau und Spektrallinien* v r. 1920 Sommerfeld priznal prvenstvo obom spomínaným autorom. Túto poznámku nachádzame aj v ďalších vydaniach, napr. v ruskom vydaní z r. 1956 na str. 78 [12].

V súvislosti s otázkou názornosti a nenázornosti modelov sa v histórii opäť stretávame s paradoxom. Prvý nenázorný model atómu pochádza vlastne od Alberta Einsteina, ktorý súčasne ukázal, že akt spontánnej emisie elektromagnetického žiarenia je náhodný proces, pokiaľ ide o časový okamih a smer vyžiareného kvanta elektromagnetického žiarenia. Napriek tomu Einstein neskôr vytrvale brojil proti štatistickej interpretácii kvantovej mechaniky. O Einsteinovej teórii absorpcie a spontánnej a stimulovanej emisie sme v PMFA už písali [15]. Na tomto mieste pripomenieme iba Einsteinove východiská a niektoré závery, ku ktorým dospel.

Einstein vo viacerých prácach z obdobia rokov 1905 – 1916 skúmal detailnú rovnováhu dutinového (čierneho) žiarenia s klasickými aj kvantovanými sústavami. Ak by žiarenie bolo v rovnováhe s klasickým systémom (s nekvantovanou energiou), musel by pre spektrálnu hustotu energie žiarenia platiť Rayleighov-Jeansov zákon. Výsledom Einsteinovej analýzy rovnováhy žiarenia so systémom s kvantovanými energetickými hladinami v prácach z rokov 1916 a 1917 bolo odvodenie Planckovho rozdeľovacieho zákona. Navyše Einstein prišiel k záveru, že výmena energie so žiarením s energiou E musí byť sprevádzaná aj výmenou hybnosti E/c (c je rýchlosť svetla), pričom smer vyžiarenej hybnosti je rovnobežný so smerom, spájajúcim emitujúci a absorbujúci atóm. Navyše Einstein získal Bohrovu podmienku frekvencií (1) bez akýchkoľvek názorných predstáv o pohybe elektrónov v atómoch [16].

Pre lepšiu prehľadnosť napíšeme na ľavej strane rovnosti Planckov zákon žiarenia pomocou Einsteinových koeficientov A , B , charakterizujúcich pravdepodobnosť spontánnej emisie a absorpcie a indukovanej emisie, a energetických hladín atómu E_m , E_n . Na pravej strane rovnosti je Planckov zákon žiarenia, napísaný pomocou bežného označenia.

$$(5) \quad \frac{A_m^n/B_m^n}{\exp((E_m - E_n)/kT) - 1} = \frac{\alpha \nu^3}{\exp(h\nu/kT) - 1},$$

kde A_m^n je koeficient spontánnej emisie, $B_m^n = B_n^n$ je koeficient indukovanej emisie, resp. absorpcie, E_m , E_n sú energie atómu vo vzbudenom a nižšom energetickom stave, α je konštanta, ktorú možno ľahko určiť, ν je frekvencia žiarenia, k Boltzmannova konštanta a T absolútna teplota.

Einsteinova teória spočívala na zavedení diskretných častíc žiarenia a na solídnych zákonoch zachovania energie a hybnosti, platných aj pre tieto častice (čo vynikajúcim spôsobom neskoršie využil A. H. Compton).

Bohr tiež cítil, že sú nevyhnutné radikálne zmeny vo fyzike mikrosveta, jeho úvahy však vyústili iným smerom. Práve v roku 1917, keď Einstein uverejnil v časopise *Physikalische Zeitschrift*, 18, s. 121 – 128, svoj článok *Zur Quantentheorie der Strahlung* [16], napísal Bohr Rutherfordovi list, v ktorom načrtnol svoj program využitia princípu korešpondencie na vyriešenie otvorených problémov kvantovej teórie.

Bohr zotrúval vlastne na pôvodných Planckových názoroch, podľa ktorých látka vyžaruje energiu po kvantách, ale svetlo je elektromagnetickým vlnením v Maxwellovom zmysle. V novembri 1917 napísal úvod k štvordielnej práci *On the quantum theory of line spectra* a spolu s prvou časťou ju odoslal do časopisu *Mémoires de l'Académie Royale des Sciences et des Lettres de Danemark Copenhague, Section des Sciences*.

Úvod a prvá časť pod nadpisom *On the general theory* vyšla v apríli 1918, druhá časť *On the hydrogen spectrum* v decembri 1918 a tretia časť *On the spectra of elements of higher atomic number* 30. novembra 1922 [17]. Štvrtá časť nevyšla.*) V tejto obsiahlej práci naznačuje cestu, ako by sa pomocou princípu korešpondencie dali vyriešiť pálčivé problémy atómovej fyziky. Naznačuje tu dve aplikácie princípu korešpondencie: Po prvé, hodnoty energie v stacionárnych stavoch atómov podľa (1) musia byť takého typu, aby pre vysoké kvantové čísla sa frekvencie len málo odlišovali od klasických.***) Po druhé, aby sme dostali vhodný vzťah k obyčajnej (t.j. klasickej, pozn. R. Z. a J. Š.) teórii žiarenia v medzných prípadoch pomalých oscilácií, musíme urobiť určité uzávery o pravdepodobnostiach prechodu medzi dvoma stacionárnymi stavmi v tejto limite.

Pre názornosť vysvetlenia Bohrovej koncepcie princípu korešpondencie uvažujme atóm vodíka (v pôvodnom Bohrovom modeli) v stave s vysokým hlavným kvantovým číslom n . V tomto stave sa elektrón pohybuje po určitej klasickej kruhovej dráhe, pričom frekvencia tohto periodického pohybu je $v_{\text{klas}}^n = v(E_n)$. Podľa klasickej elektrodynamiky by pri takomto pohybe elektrón musel vyžarovať elektromagnetické vlny s frekvenciou v_n a vyššie harmonické s frekvenciami τv_n , kde $\tau = 2, 3, \dots$.

Podľa kvantovej teórie atóm môže uskutočňovať preskoky do stavov s nižším kvantovým číslom. Bohrov princíp korešpondencie žiada, aby

- frekvencia preskoku zo stavu n do stavu $(n - 1)$, počítaná podľa kvantovej i podľa klasickej teórie, viedla k rovnakej číselnej hodnote pre veľmi veľké n ; keďže kvantová hodnota je $E_n - E_{n-1} = h\nu$, musí platiť

$$(6) \quad v_{\text{klas}}^n = \frac{1}{h}(E_n - E_{n-1}),$$

- atóm ale môže prechádzať zo stavu n aj do stavov $(n - 1)$, $(n - 2)$, ..., $(n - \tau)$.

Ak je splnená predchádzajúca podmienka, potom klasické frekvencie vyšších harmonických v rozklade klasickeho pohybu elektrónu budú zhruba rovné prechodom $n \rightarrow (n - \tau)$, teda

$$\tau v_{\text{klas}}^n = \frac{1}{h}(E_n - E_{n-\tau}).$$

Bohr ale žiada, aby aj intenzity jednotlivých prechodov mali klasický analóg. Ak totiž súradnica, povedzme x -ová, sa mení s časom podľa vzťahu

$$(7) \quad x(t) = \sum_{\tau=1}^{\infty} C_{\tau} \cos 2\pi(\tau v_{\text{klas}} t + c_{\tau}),$$

potom intenzity kvantových prechodov $n \rightarrow (n - \tau)$ majú byť úmerné výrazom $|C_{\tau}|^2$.

Medzi klasickým a kvantovým prípadom emisie žiarenia sú isté rozdiely a isté podobnosti. Rozdiel je v tom, že v kvantovej teórii sa vždy vyžiari iba jedna frekvencia, zatiaľ

*) Termín princíp korešpondencie prvý raz použil Bohr v článku *Über die Serienspektren der Elemente*, Zeitschrift für Physik 2, (1920) s. 423–469. Anglický preklad je uverejnený v [18].

**) Tento postup použil Bohr už vo svojom prvom článku v r. 1913, ako sme uviedli v [1].

čo v klasickej sa zároveň vyžaruje viacero frekvencií s rôznymi amplitúdami. Podobnosť je v tom, že pri skutočne pravidelnej kruhovej dráhe budú vyššie harmonické malé a klasickej a kvantový obraz emisie žiarenia budú blízke.

Pre Planckov lineárny harmonický oscilátor sú v (7) všetky C_r rovné nule s výnimkou $\tau = 1$. Teda sú možné iba prechody, pre ktoré $m - n = 1$. Takéto prechody Planck apriórne predpokladal a boli potvrdené vzťahom pre tepelnú kapacitu tuhých látok. Vzhľadom na Ehrenfestovu adiabatickú hypotézu [19] postuloval Bohr tieto výberové pravidlá pre ľubovoľné systémy o jednom stupni voľnosti.*) Bohr v uvedenom článku síce spomenul Einsteinovu teóriu spontánnej a indukovanej emisie, ale do svojich úvah a výpočtov ju nezakalkuloval. D. ter Haar ukázal [20], ako pomocou Einsteinových koeficientov a princípu korešpondencie možno ľahko určiť bez odvolania sa na experiment výberové pravidlá pre lineárny harmonický oscilátor $\Delta n = \pm 1$, ako aj výberové pravidlá pre násobne periodické pohyby (eliptické dráhy).

Bohr bol povzbudený tým, že sa mu podarilo určiť výberové pravidlá (aj pre eliptické dráhy) pre prechody elektrónov medzi stacionárnymi stavmi. V ďalších prácach rozvíjal princíp korešpondencie v snahe vyriešiť aj iné problémy kvantovej fyziky. V tomto článku uvedieme iba aplikáciu princípu korešpondencie na určenie intenzity spektrálnych čiar pre prípad anharmonického oscilátora, a to v pozmenenom zápise.**)

Súradnice a hybnosti anharmonického oscilátora sa periodicky s časom menia s uhlovou frekvenciou $\omega = 2\pi/T$, kde T je čas jednej periódy. Súradnice q , hybnosti p a ľubovoľné jednoznačné funkcie $F(p, q)$ možno rozvinúť do Fourierovho radu

$$(8) \quad F(p, q) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} F_{\alpha}(I) e^{i\alpha\omega(t-\tau)}.$$

Vo vzťahu (8) zovšeobecnená hybnosť I je účinková premenná a $\omega(t - \tau) = w$ je k nej kánonicky združená zovšeobecnená súradnica (uhlová premenná).

Energia, vyžiarená z Hertzovho dipólu za jednotku času, je***)

$$(9) \quad \varepsilon = \frac{2e^2}{3c^3} |\ddot{q}|^2 = \frac{4e^2}{3c^3} \sum_{\alpha=1}^{\infty} |q_{\alpha}(I)|^2 |\alpha\omega|^4.$$

Teda vyžiarená energia sa aditívne skladá z príspevkov

$$(10) \quad \varepsilon_{\alpha} = \frac{4e^2}{3c^3} |q_{\alpha}(I)|^2 (\alpha\omega)^4.$$

Tieto klasické výsledky pretransformoval N. Bohr pomocou princípu korešpondencie

*) Pri pomalejšom zmene vonkajších podmienok sa podľa Ehrenfesta zachováva vzťah (4), aj keď sa zmení charakter periodicity (napr. z lineárnych oscilácií na rotáciu v rovine), pokiaľ sa nemení násobnosť periodického pohybu.

**) Tento špeciálny prípad sme vybrali preto, lebo Heisenberg naň nadviazal pri formulovaní kvantovej mechaniky [21]. Bohrove práce (uverejnené aj neuverejnené) o princípe korešpondencie v r. 1918–1923 zaberajú celý tretí zväzok jeho zobrazených spisov, t.j. 704 strán veľkého formátu.

***) Pozri napr. [22]

do kvantovej teórie obdobne ako pri určení výberových pravidiel tým, že urobil tieto zámeny

$$\alpha\omega \rightarrow \omega_{nm}$$

$$\alpha \rightarrow m - n$$

$$(11) \quad I = \oint p \, dq = n \frac{h}{2\pi} \rightarrow n' \frac{h}{2\pi},$$

pričom n' leží niekde medzi n a m ($h/2\pi$ píšeme namiesto h , lebo sme použili $\omega_{\text{klas}} = 2\pi\nu_{\text{klas}}$ a $\omega_{nm} = 2\pi\nu_{nm}$).

Ako vidno, vzťah (11) je iba kvalitatívny. V roku 1925 naň nadviazal Heisenberg v snahe dôslednejšie aplikovať princíp korešpondencie [21].

Vzorec (10) prepísal do tvaru

$$\varepsilon_{nm} = \frac{4e^2}{3c^3} |q_{mn}|^2 \omega_{nm}^4.$$

Heisenberg nahradil Fourierove amplitúdy q_α kvantovoteoretickými amplitúdami q_{mn} . Tieto dvojindexové veličiny sa stali zárodkom Heisenbergovej-Bornovej-Jordanovej maticovej mechaniky.

Štruktúra atómov

V období od r. 1913 do r. 1925 sa Niels Bohr sústavne venoval dvom problémom: štruktúre atómov a kvantovej teórii. Opis štruktúry atómov bol vlastne jeho prvotným záujmom už v r. 1913. Bohrove názory o tejto otázke dozreli začiatkom dvadsiatych rokov. V roku 1922 mal 7 prednášok o svojej teórii v Göttingene za účasti popredných fyzikov z celého Nemecka aj z iných krajín. Poslucháreň pre 150 poslucháčov bola na všetkých jeho prednáškach preplnená. V spomienkach fyzikov vystupuje táto udalosť ako „Bohrove slávnostné hry v Göttingene“. V týchto prednáškach [23], rovnako ako vo svojej prednáške pri prevzatí Nobelovej ceny v tom istom roku [24], venoval veľkú pozornosť štruktúre atómov v súvislosti s Mendelejevovou periodickou sústavou prvkov. Jeho teória slávila úspech práve v r. 1922, keď po Bohrových göttingenských prednáškach Hevesy v Kodani objavil 72. prvok, ktorý nazval hafniom (podľa Hafniae, latinského názvu Kodane). História tohto objavu bola dramatická, lebo Bohr neprijal Dauvillierove a Urbainove experimentálne výsledky, podľa ktorých 72. prvok je vzácna zemina celtium. Vo svojej šiestej göttingenskej prednáške zdôraznil, že hľadaný prvok musí mať podobné vlastnosti ako zirkonium, „ak sú naše koncepcie o štruktúre atómov korektné“. Mal na mysli pravidlo, podľa ktorého valencia vzrastá o jednotku pri prechode k nasledujúcemu prvku v periodickej tabuľke. Bohr potom v závere svojej prednášky pri prevzatí Nobelovej ceny 11. decembra 1922 mohol oznámiť, že Coster a Hevesy našli prítomnosť 72. prvku v rôznych mineráloch zirkónia.*)

*) Názov hafnium sa objavil po prvý raz v Hevesyho článku v časopise Nature 20. januára 1923.

Bohr vychádzal vo svojej teórii štruktúry atómov z týchto princípov:

1. Každý atóm s viacerými elektrónmi sa vyznačuje invariantným charakterom stavov elektrónov a ich vzájomného pôsobenia. Kvantové čísla, určujúce stavy elektrónov, determinujú vlastnosti atómov. (Postulát invariantnosti a permanentnosti kvantových čísiel.)

2. Výstavbu atómov treba sledovať postupným zaplňaním atómových obalov elektrónmi. Bohr uvažoval dve kvantové čísla n, k , pričom $n = 1, 2, 3, \dots$ a $k \leq n$. Hlavné kvantové číslo n určovalo energetickú hladinu a vedľajšie kvantové číslo k určovalo stavy s pre $k = 1$, stavy p pre $k = 2$, stavy d pre $k = 3$ atď.

V jednotlivých energetických hladinách zadelil rovnomerne elektróny do stavov s, p, d, \dots , takže napr. neón mal dva elektróny v základnej hladine 1_1 a v hladine $2_1, 2_2$ po štyroch elektrónoch. Argón mal 18 elektrónov. Prvé dve hladiny boli zaplnené ako pri neóne, v tretej boli obsadené po 4 elektrónoch stavy 3_1 a 3_2 . Konfigurácia elektrónov v kryptóne bola 2; 4, 4; 6, 6, 6; 4, 4. Rovnomerné obsadzovanie stavov s, p, d, \dots v jednotlivých energetických hladinách, pravda, nebolo odôvodnené. Pomocou ďalších kvantových čísiel potom Stoner (1889–1973) zadelil elektróny do jednotlivých stavov podľa schémy dodnes platnej. W. Pauli v r. 1924/1925 formuloval v súlade so Stonerovou schémou svoj vylučovací princíp.*)

Bohrova cesta k prehodnoteniu pojmov

Z podnetu J. C. Slatera, ktorý nadviazal na Ladenburgove myšlienky, vznikla v rokoch 1923–1924 kvantovoteoretická teória disperzie svetla. V r. 1924 vyšiel spoločný Bohrov, Kramersov a Slaterov**) článok, v ktorom vyslovili hypotézu, že atómy v stacionárnom stave vytvárajú virtuálne žiarivé pole, ekvivalentné s poľom virtuálnych klasických harmonických oscilátorov. Tie korešpondujú s rozličnými možnými prechodmi podľa vzťahu (1). Procesy prechodov z jednej energetickej hladiny do druhej sú týmto mechanizmom spojené pravdepodobnostnými zákonmi. H. A. Kramers rozvinul túto teóriu aj pre stavy s vysokými kvantovými číslami. (Pôvodne sa uvažovala iba absorpcia svetla atómom v základnom stave.) Kramersova práca mala tiež veľký význam pre Heisenberga pri formulovaní maticovej mechaniky [21].

Pôvodná Bohrova, Kramersova a Slaterova práca bola pre Bohra, a teda aj pre ďalší vývin kvantovej teórie významná aj z iného hľadiska. V tejto práci pod Bohrovým

*) W. Pauli spolupracoval aj na pôvodnej Bohrovej schéme výstavby atómov.

**) HENDRIK ANTHONY KRAMERS sa narodil 17. decembra 1894 v Rotterdame. V r. 1912–1916 študoval teoretickú fyziku v Leydene pod vedením P. Ehrenfesta. V r. 1916 sa stal prvým Bohrovým spolupracovníkom v Kodani. Zotrval tam do r. 1926. V r. 1926–1934 bol vedúcim Katedry teoretickej fyziky v Utrechte, potom pôsobil v Leydene ako Ehrenfestov nástupca. Zomrel 24. apríla 1952 v Oegstgeeste.

JOHN CLARKE SLATER sa narodil 22. decembra 1900 v Oak Park v štáte Illinois v USA. Od septembra 1923 pôsobil v Cavendishovom laboratóriu v Cambridgei. Odtiaľ odišiel do Kodane a v r. 1924 späť do USA. Naposledy bol profesorom Floridskej univerzity v Gainesville (1966–1976). Zomrel 25. júla 1976 v Sanibel Islande na Floride.

vplyvom sa autori vzdali zákona zachovania energie a hybnosti pri jednotlivých aktoch vzájomného pôsobenia. Ale Botheho a Geigerove pokusy a tiež Comptonove a Simonove experimenty potvrdili zákony zachovania*). Z tejto skutočnosti vyvodil Bohr ďalekosiahle dôsledky, lebo potvrdzovala reálnu existenciu svetelných kvánt, pričom nebolo možné „odškriepiť“ vlnové vlastnosti svetla. Týmto konštatovaním sa skončila prvá časť diskusií medzi Einsteinom a Bohrom o zmysle kvantovej teórie.

V uvedenom období boli písomné a osobné styky Einsteina a Bohra iba sporadické. Ich stanoviská ku kvantovej teórii sa však už vtedy značne rozchádzali.

Prvá časť diskusií medzi Einsteinom a Bohrom

Pokúsime sa ešte stručne sformulovať v čom spočívala prvá časť – ešte latentných – diskusií medzi Einsteinom a Bohrom o zmysle kvantovej teórie. Ako sme už uviedli, podľa Einsteina boli svetelné kvantá reálne existujúcimi objektami. Pri takomto pohľade na svetlo sa pochopiteľne vynára problém interferencie. Ale Einstein tento problém nevidel tragicky: „... interferenčné javy by asi nebolo tak ťažké zahrnúť do kvantovej teórie, a to z týchto dôvodov: nedá sa predpokladať, že by sa žiarenie skladalo z neinteragujúcich kvánt, to by totiž nedovolilo vysvetliť interferenčné javy. Predstavujem si kvantum ako singularitu, obkolesenú silným vektorovým poľom. Z veľkého počtu kvánt by sa dalo zostrojiť vektorové pole, ktoré by sa len málo odlišovalo od toho poľa, ktoré považujeme za svetlo... Nepredpokladám, že musíme podstatne zmeniť názory na interferenčné javy v porovnaní s tými, ktorých sa doteraz pridŕžame...“ [25]

Slater prišiel do Kodane s návrhom, ktorý vlastne odpovedal interpretácii svetelných kvánt v duchu neskoršie navrhnutých vln – pilótov. Kvantá žiarenia reálne existovali a elektromagnetické žiarenie, počítané z Maxwellových rovníc pre „virtuálne oscilátory“ jednotlivých atómov, ich len „navádzalo“ – kde bola amplitúda poľa veľká, tam sa kvantá vyskytovali častejšie. Slater ale túto ideu nerozpracoval do podrobností.

Pre Bohra kvantá neboli akceptovateľné ani v jednej forme. Preňho elektromagnetické pole bolo reálnym poľom (v tomto štádiu vývoja jeho názorov). Inak by totiž princíp korešpondencie stál na neistých základoch. Pole dané obiehajúcim elektrónom v atóme bolo reálnym poľom a pole, ku ktorému situácia atómov viedla pri vysokom n a pri prechodoch $n \rightarrow (n - 1)$, bolo v tejto limite tiež reálnym poľom. Keby ním nebolo, potom by elektrón obiehajúci okolo atómu budil reálne pole, zatiaľ čo pri kvantovom preskoku by vznikalo niečo iné a princíp korešpondencie by spájal dve veci principiálne odlišnej povahy, teda strácal by jasný zmysel.

Ak by ale pole vznikajúce pri atomárnych prechodoch bolo reálne, potom zachovanie energie a hybnosti pri elementárnych procesoch emisie a absorpcie by bolo neudržateľné. Vidno to z nasledujúceho: Nech sa atóm rozpadá a uvoľňuje energiu 3 eV. Tento atóm je uprostred gule pokrytej tenkou vrstvou cézia, pričom povrch gule je 1 m^2 . Na povrchu je okolo 10^{20} atómov. Okolo každého z atómov preletí asi $3 \cdot 10^{-20}$ eV energie, ktorá určite nestačí na vyrazenie fotoelektrónu. V skutočnosti takéto javy

*) Napokon aj Heisenbergova kvantová mechanika potvrdila zákon zachovania energie [21].

nastávajú. Zákon zachovania v elementárnom akte nemôže platiť. Zákony zachovania musia ale platiť v *priemere*, inak by sme ľahko prišli k tomu, že neplatia ani v makroskopických situáciach (a tam sú v skutočnosti dobre verifikované). Podľa Bohrovej koncepcie z roku 1923 bolo pole *reálne* a potom nevyhnutne musela štatistika vstúpiť do hry v zákonoch zachovania energie a hybnosti v interakcii žiarenia s atómom. Podľa súčasnej kvantovej elektrodynamiky zákony zachovania v elementárnych aktoch platia presne, ale štatistika vstúpi do hry pri opise elektromagnetického poľa. Rozloženie tohoto poľa v priestore udáva pravdepodobnosti toho, že v určitej lokalizovanej oblasti priestoru sa uplatní celá jeho energia.

Experimenty r. 1925 dali za pravdu Einsteinovi v otázke zákona zachovania. Z ďalšej perspektívy sa ale ani jeho názory neukázali udržateľné – interferencia totiž nezávisí od intenzity svetelného zväzku, čo protirečí jeho predstave citovanej vyššie.

Pre rozvoj kvantovej teórie malo veľký význam Bohrovo presvedčenie o nevyhnutnosti radikálnej zmeny v pojmových základoch kvantovej teórie. A ako napísal M. Klein [26] „pri budovaní pojmového aparátu kvantovej mechaniky od r. 1925 bol Einstein trvalým Bohrovým duchovným sparring partnerom.“

(Pokračovanie)

Literatura

- [1] ZAJAC, R., ŠEBESTA, J.: Pokroky matematiky, fyziky a astronomie 30/3, 1985 s. 121.
- [2] BOHR, N.: *Collected Works*, ed. L. ROSENFELD, Amsterdam, New York, Oxford, North-Holland Publishing Company, Volume 2, 1981, s. 551. V ďalšom citujeme Bohrove zobraňované spisy ako Works 1, Works 2, Works 3, Works 4.
- [3] *Works 2*, s. 544.
- [4] FRANCK, J., HERTZ G.: *Über die Erregung der 2536-Å-Quecksilberresonanzlinie durch Elektronenstöße*. In HAAR, D. TER: *Quantentheorie*, Berlin, Oxford, Braunschweig, Akademie-Verlag, Pergamon Press, Vieweg und Sohn, 1970, s. 201–208.
- [5] ZAJAC, R.: Rozhledy matematicko-fyzikální 62, 1983/84, s. 355–356.
- [6] *Works 2*, s. 389–413.
- [7] FRANCK, J.: *Transformations of kinetic energy of free electrons into excitation energy of atoms by impacts*. In: Nobel Lectures-Physics, Amsterdam—London—New York, Elsevier Publishing Company, 1965, s. 98–108
- [8] MEHRA, J., RECHENBERG, H.: *The Historical Development of Quantum Theory I/1*. New York, Heidelberg, Berlin, Springer 1982, s. 200.
- [9] HERTZ, G.: *The results of the electron-impact tests in the light of Bohr's theory of atoms*. In Nobel Lectures — Physics, Amsterdam—London—New York, Elsevier Publishing Company, 1965, s. 112–129.
- [10] *Works 2*, s. 603.
- [11] PLANCK, M.: *Theorie der Wärmestrahlung*. Leipzig, J. A. Barth, 1966, s. 131–132.
- [12] SOMMERFELD, A.: *Stroenie atoma i spektry*. Moskva, Gosudarstvennoe izdatel'stvo tekhniko-teoretičeskoj literatury, 1956.
- [13] *Works 2*, s. 336–342, 431–461, 603–604
- [14] HEISENBERG, W.: *Der Teil und das Ganze*. München, R. Piper und Co., 1969, s. 60.
- [15] ZAJAC, R.: Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, 24, 1979, s. 61–77.
- [16] EINSTEIN, A.: *Sobranie naučnych trudov III*. Moskva, Nauka, 1966, s. 128–406.
- [17] *Works 3*, s. 65–200.
- [18] *Works 3*, s. 241–260.

- [19] POZRI EHRENFEST, P.: *Adiabatic invariants and the theory of quanta*, in *Sources of Quantum mechanics*. Ed. B. L. VAN DER WAERDEN, Amsterdam, North Holland, 1967.
- [20] HAAR, D. TER: *Quantentheorie*. Berlin, Oxford, Braunschweig, Akademie Verlag, Pergamon Press, Vieweg und Sohn, 1970, s. 95—96
- [21] HEISENBERG, W.: *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*. In LUDWIG, G.: *Wellenmechanik*, Berlin, Oxford, Braunschweig, Akademie Verlag 1969, s. 193—210.
- [22] POZRI LANDAU, L. D., LIFŠIČ, E. M.: *Úvod do teoretickej fyziky I*. Bratislava—Moskva, Alfa-Mir 1980. s. 270.
- [23] *Works 4*, s. 341—419.
- [24] *Works 4*, s. 425—482.
- [25] POZRI 16. s. 194.
- [26] KLEIN, M. J.: *The first phase of the Bohr-Einstein dialogue*. *Historical Studies in the Physical Sciences* 2, 1—39.

Japonský projekt piatej generácie počítačov

Ivan Plander, Bratislava

1. Úvod

Rozvoj mikroelektroniky, najmä však technológie veľmi veľkej integrácie (VLSI), vytvára reálne predpoklady počítačového riešenia zložitých problémov ľudskej činnosti na najvyššej úrovni ekonomicky prijateľným spôsobom. Nástupom technológie VLSI, umožňujúcej realizovať už v najbližšom čase až milión tranzistorov na čipe, polovodičový priemysel privádza ľudstvo na prah jednej z najvýznamnejších vývojových etáp tohto storočia, a to etapy rozširovania ľudských intelektuálnych schopností pomocou počítačových systémov nových generácií.

Túto skutočnosť si najlepšie uvedomilo Japonsko, ktorého súčasná ekonomika je poznačená nedostatkom vlastných zdrojov energie, surovín a potravín. V tejto situácii Japonci pripisujú veľkú dôležitosť spracovaniu a využitiu informácií a formovaniu informačne orientovanej spoločnosti. Spracovanie informácií na vyšších úrovniach však vyžaduje vyvinutie počítačových systémov nových generácií.

Na základe úspechov dosiahnutých v mikroelektronike japonský počítačový priemysel si vytýčil za cieľ dosiahnúť USA vo výrobe počítačov vrátane superpočítačov. Zatiaľčo USA majú najnovšie superpočítače CRAY X-MP s výkonom 630 Mflops (milión operácií v pohyblivej rádovej čiarky za sekundu) a CDC CYBER 205 so 792 Mflops, v Japonsku sú dokonca tri firmy vyrábajúce superpočítače na komerčnej báze. Sú to: počítače Fujitsu VP 200 (500 Mflops), Hitachi S 810—20 (630 Mflops) a NEC SX-2