

Korrespondensprincippet – Bohrs tryllestav

Af Helge Kragh, Center for Videnskabsstudier, Aarhus Universitet

I Niels Bohrs udvikling af kvante- og atomteorien spillede generelle principper en vigtig rolle. Fra omkring 1918 var korrespondensprincippet ledestjernen for den videre udvikling. Dette berømte princip, der var Bohrs i en næsten personlig forstand, kan forstås på flere måder. Uanset dets nuværende status, så er dets historiske betydning uomtvistelig.

Et mangesidigt princip

Det analogi- eller korrespondensprincip som Bohr i udfoldet form indførte i 1918, men hvis rødder allerede kan findes i hans arbejder fra 1913, har været genstand for megen diskussion. Hvor originalt var det egentligt? Var der tale om et alment filosofisk princip eller et teknisk værktøj til at løse problemer i kvanteteorien? Flere filosoffer har foreslået generaliserede versioner af princippet i forbindelse med udviklingen af teorier. Man kan i den videnskabsteoretiske litteratur finde korrespondensprincippet omtalt som et krav om, at når en ny teori T_2 afløser en tidligere teori T_1 , da må T_2 indeholde de bekræftede resultater af T_1 som særtilfælde.

Einsteins specielle relativitetsteori opfylder dette krav i relation til den klassiske mekanik, idet formlerne for sidstnævnte (T_1) svarer til relativitetsteoriens (T_2) for små hastigheder: $T_2 \rightarrow T_1$ for $v/c \rightarrow 0$. Tilsvarende var det, allerede før Bohr, klart, at kvanteteorien resultater må konvergere mod den klassiske elektrodynamiks resultater i grænsen $\hbar \rightarrow 0$, sådan at Plancks strålingslov giver den klassiske Rayleigh-Jeans lov for små værdier af $h\nu/kT$. Hvis der ikke er andet i korrespondensprincippet end en korrespondens eller konvergens af denne art, da kan Bohrs formalisering og navngivning af princippet synes at være ret trivial. Det er endda blevet hævdet, at man kan finde en form for korrespondensprincip helt tilbage til Newton, og at det siden da har optrådt regelmæssigt i fysikhistorien [1].

Bohrs korrespondensprincip var dog af en ganske anden og mere sofistikeret art. Der var ikke tale om en generel metodologisk regel, men om et heuristisk princip netop knyttet til forholdet mellem kvanteteori og klassisk fysik. Ud fra dette princip kunne den klassiske fysik vejlede udviklingen af den nye kvanteteori siden derved at formindske den uundgåelige kontrast der ifølge Bohr måtte være mellem kvanteverdenen og den klassiske verden [2].

Det begrænsede korrespondensprincip

Man kan finde de første spirer til korrespondensprincippet for frekvenser i Bohrs monumentale afhandling "On the Constitution of Atoms and Molecules" fra 1913. Han argumenterede heri, at for at sikre stabiliteten af Rutherford's kerneatom måtte man antage to postulater, der begge stred mod den etablerede fysik [3]. Det første var postulatet om stationære tilstande

eller elektronbaner, hvori de accelererede elektroner var fredet fra elektrodynamikkens krav om at afgive stråling, mens det andet var postulatet om diskrete kvantespring. En elektron i en anslået energitilstand E' ville spontant overgå til en lavere tilstand E'' under udsendelse af en lysbølge (ikke en foton!) med frekvens $\nu = (E' - E'')/h$. Det var et centralt såvel som provokerende element i Bohrs teori, at lysets frekvens ν ikke svarede til den omkredsende elektrons mekaniske frekvens, sådan som det ellers måtte være ifølge den klassiske fysik.

I sin store afhandling fra 1913 udledte Bohr energien for et brintatom på hele tre måder, hvoraf den ene gjorde brug af den korrespondens, der måtte være til den klassiske strålingsteori for store værdier af kvantetallet n . I et foredrag i København for Fysisk Forening af 20. december 1913 gjorde han tilsvarende brug af korrespondensargumenter i udledningen af Rydbergs spektroskopiske konstant R . Det væsentlige i Bohrs argument var at betragte kvanteovergange fra tilstand n' til tilstand n'' , hvor frekvensen af den udsendte stråling kan udtrykkes som:

$$\nu = Rc \left(\frac{1}{n''^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \quad (1)$$

Ved at betragte tilfældet $n' - n'' \ll n'$ og sammenholde ν med den mekaniske omløbsfrekvens kunne han på simpel vis udlede det udtryk for Rydbergs konstant R , som han på anden vis var nået frem til i sin afhandling. I moderne enheder (SI) skrives Rydbergkonstanten:

$$R = \frac{m_e e^4}{8h^3 c \epsilon_0^2} \quad (2)$$

Se forklaring på symboler i boksen på næste side.

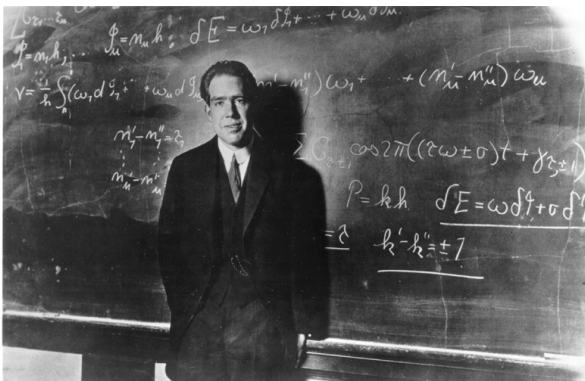
Bohr viste i sin afhandling, at i samme tilnærmelse ville man finde, at ν var et helt multiplum af omløbsfrekvensen, om hvilket han kommenterede:

Muligheden for udsendelse af stråling med en sådan frekvens kan også fortolkes i analogi med den almindelige elektrodynamik, da en elektron, der kredser omkring kernen i en elliptisk bane, vil udsende stråling, der ifølge Fouriers sætning kan opløses i homogene komponenter, hvis frekvenser er $n\omega$, hvis ω er elektronens omløbsfrekvens.

I sit foredrag i Fysisk Forening udtrykte han tilsvarende, at “udsendelsen af *langsomme* (lavfrekvente) elektromagnetiske svingninger kan beregnes i overensstemmelse med den klassiske elektrodynamik” [4]. I denne første og begrænsede version vedrørte korrespondensen kun frekvenser og havde derfor ikke konsekvenser, der gik ud over den elementære teori selv.

Symboler

v – hastighed i det betragtede inertialsystem
 c – lyshastigheden
 h – Plancks konstant
 ν – lysfrekvens
 k – Boltzmanns konstant
 T – temperatur (den absolutte)
 E' – energi i den stationære tilstand n'
 n – (hoved)kvantetal. Heltal
 R – Rydberg-konstanten
 e – elektronladningen
 m_e – elektronens masse
 ϵ_0 – vakuumpermittiviteten
 a_i – Fourierkoefficienter
 ω – vinkelfrekvens. I Bohr-citatet på foregående side betyder ω dog omløbsfrekvens.
 t – tid
 ΔX – usikkerhed i størrelsen X . Tilvækst i X
 k – kvantetal for baneimpulsmoment.

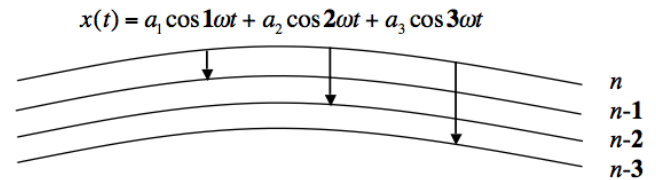


Figur 1. Bohr forelæser over korrespondensprincippet ved Yale University i 1923.

Om linjespektres kvanteteori

I starten af 1918 færdiggjorde Bohr en stor og svært læselig afhandling med titlen “On the Quantum Theory of Line-Spectra”, der udkom i skriftrækken fra Videnskabernes Selskab. I denne afhandling gav han en ny fremstilling af kvanteteoriens grundlag baseret på en udvidet version af korrespondensprincippet, om end han endnu ikke benyttede dette navn [5]. Det skete først i foråret 1920, da han var inviteret til Berlin af det tyske fysiske selskab for at give en højt profileret forelæsnings. Ved denne lejlighed traf han mange af de ledende tyske fysikere, herunder Alfred Landé, Max Planck og Max Born. Af særlig betydning for ham var mødet med Einstein, som han her traf for første gang.

I afhandlingen fra 1918 talte Bohr om “analogien mellem kvanteteorien og den sædvanlige strålingsteori”, som han nu brugte til at skaffe indblik i intensiteten for det lys, atomer udsender. Denne udvidelse var afgørende, for hvis ikke intensiteten kunne bestemmes teoretisk, var der kun ringe mulighed for at sammenligne teorien med spektroskopiske eksperimenter.



Figur 2. En klassisk baneurve opløst i Fourierkomponenter [2]. Ifølge korrespondensprincippet svarer enhver tilladt overgang mellem stationære baner til en af den klassiske bevægelses harmoniske komponenter.

Elektronens banebevægelse kan, set “fra kanten”, betragtes som en endimensional bevægelse med Fourieropløsningen

$$x(t) = a_1 \cos \omega t + a_2 \cos 2\omega t + a_3 \cos 3\omega t + \dots \quad (3)$$

Systemet vil udsende spektrallinjer svarende til grundtonen ω og overtonerne 2ω , 3ω , osv., og det vil ske med en intensitet proportional med kvadratet på amplituderne. Den kvanteteoretiske mekanisme er ganske vist helt anderledes, men ifølge Bohr var der for store kvantetal n alligevel en nær analogi. “Vi må forvente,” skrev han, “at for store værdier af n vil disse koefficienter [$a_1, a_2, \dots$] efter kvanteteorien bestemme sandsynligheden for en spontan overgang fra en bestemt stationær tilstand $n = n'$ til en nabotilstand.”

Bohrs nye indsigt var, at en elektron i sin bane vil have en vis sandsynlighed for at overgå til en anden stationær tilstand, og at denne sandsynlighed kunne udtrykkes ved de koefficienter, Einstein et par år tidligere havde indført i sin strålingsteori. Ifølge Bohr kunne Einsteins koefficienter skrives i form af de klassiske Fourierkoefficienter a_i , hvilket gjorde det muligt at estimere intensiteten for en spektrallinje hidrørende fra en bestemt kvanteovergang. Selv om Bohrs korrespondensprincip således stod i kritisk gæld til Einsteins probabilistiske strålingsteori, så var der stor forskel mellem de to fysikeres opfattelse af strålingsprocessen. Einstein så sin teori som et stærkt argument for den endnu uortodokse hypotese om fotoner, mens Bohr ganske afviste denne fortolkning. Når han så hårdnakket holdt fast ved lysets bølgenatur, så skyldtes det især, at han opfattede fotoner som værende i modstrid med korrespondensprincippet.

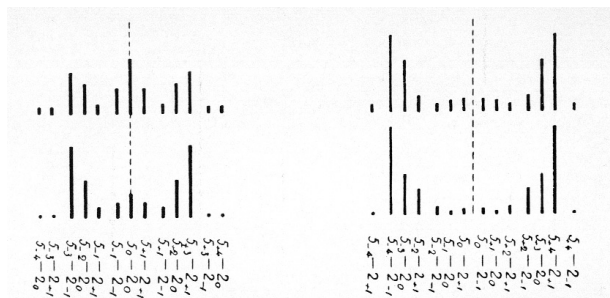
I nærmest en bisætning brugte Bohr sit korrespondensprincip til at argumentere for, at en anslået stationær bane i et atom ikke kan være skarpt defineret; men energien må være “udtværet” over et lille interval ΔE omkring E . Som han viste i sit foredrag i Berlin, så følger begrebet om en “naturlig linjebredde” heraf, idet alle spektrallinjer må have en udtværing selv

under optimale fysiske omstændigheder. Der kan ikke findes absolut monokromatisk stråling. Umuligheden heraf fulgte senere af Heisenbergs ubestemthedsprincip $\Delta E \Delta t \geq h/2\pi$, men omtrent samme konklusion blev altså allerede draget på grundlag af den gamle kvante-teori.

Udvalgsregler

I årene efter 1918 formulerede Bohr korrespondensprincippet på flere forskellige måder, der ikke alle var lige klare eller indbyrdes konsistente. Ved nogle lejligheder betegnede han princippet som en "lov" der var gyldig for alle kvanteovergange, også selv om de involverede kvantetal var små. I en mere praktisk forstand fremhævede han den heuristiske værdi af princippet, som en vejledning i fysikernes forsøg på at forstå spektrene. En af korrespondensprincippet's vigtigste funktioner var at levere udvalgsregler for kvanteovergange. Man var klar over, at langt fra alle mulige overgange mellem stationære tilstande var aktive og gav anledning til spektrallinjer. Nogle overgange var tilsyneladende forbudte, men hvorfor? Dette var især et problem for det angulære eller azimutale kvantetal k , der angav værdien for elektronens impulsmoment.

Det første forsøg på at begrunde en udvalgsregel for k fremkom i 1918, da den polsk-tyske fysiker Adalbert Rubinowicz, nåede frem til udvalgsreglen $\Delta k = \pm 1$ og $\Delta k = 0$ for tilladte overgange. Bohr angreb det samme problem med korrespondensprincippet som våben, og hans resultat var $\Delta k = \pm 1$, således at overgange med uændret k altså var forbudte. Det viste sig snart, at Bohrs resultat stemte bedre med spektroskopiske data end Rubinowicz's, hvilket forståeligt nok styrkede korrespondensprincippet's status som et effektivt kvanteværktøj.



Figur 3. Starkeffekten for brint (H_γ) som Bohr præsenterede den i sin Nobelforelæsning [7]. De øverste linjer viser eksperimentelle data, mens de nederste er de af Kramers beregnede.

Denne status blev yderligere underbygget af de detaljerede beregninger af brintspektret som Hendrik Kramers, Bohrs unge hollandske assistent, udførte i forbindelse med sin doktordisputats fra 1919. Ved en snedig anvendelse af korrespondensprincippet lykkedes det Kramers at beregne intensiteten af brints finstruktur-linjer og også af de linjer, den elektriske Starkeffekt gav anledning til [6]. Kramers' meget omfattende beregninger resulterede i relative intensiteter for komponenterne i Starkspektret der næsten stemte perfekt overens med

de målte. Ikke blot kunne han redegøre for alle kendte data, han kunne også forudsige nye. Således beregnede han den elektriske opsplitning af den svage brintlinje H_ϵ , der svarer til en overgang fra $n = 7$ til $n = 2$. Starkeffekten for denne linje var ikke kendt i 1919, men nogle år senere bekræftede eksperimenter de beregnede intensiteter.

I starten af 1920'erne var korrespondensprincippet anerkendt som en vigtig del af kvanteteorien. Det var en væsentlig årsag til at Bohr blev tildelt Nobelprisen i 1922, og i sin Nobelforelæsning lagde han da også stor vægt på korrespondensprincippet og dets mange-sidige anvendelser [7]. Ikke alle fysikere var lige så begejstrede for princippet, som man var i København, men der var generel enighed om dets værdi til at forstå atomets hemmeligheder. Så at sige alle de lærebøger og sammenfatninger af atom- og kvanteteorien, der blev udgivet mellem 1920 og 1925, indeholdt omhyggelige beskrivelser af korrespondensprincippet.

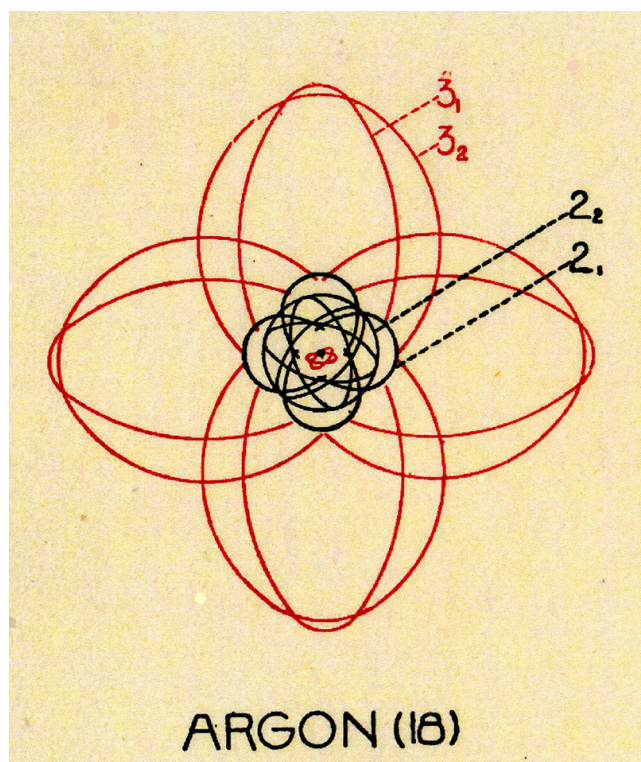
En københavnsk tryllestav

Den måde Bohr og hans nærmeste kolleger brugte korrespondensprincippet på, vakte af og til undren blandt udenlandske fysikere. Princippet blev opfattet som "en noget mystisk tryllestav, der ikke virkede uden for København," som Kramers senere udtrykte det [8]. Man havde en fornemmelse af, at kun Bohr og dem, der var indviet i mesterens magi, kunne gøre brug af tryllestaven. Når Einstein beskrev Bohrs fysik som "intuitiv" og "emotionel," havde han især korrespondensprincippet i tankerne. Han skrev om Bohrs teori for atomernes struktur, at den var et "mirakel" og udtryk for "den højeste form for musikalitet i tankernes verden."

Denne musikalitet nåede sit crescendo i den reviderede atomteori, Bohr foreslog i starten af 1920'erne og som omfattede strukturen af samtlige grundstoffer i det periodiske system. I den nye teori var elektronernes elliptiske bevægelser styret af to kvantetal, hovedkvantetallet n og det azimutale kvantetal k , og de ydre elektroner ville af og til dykke ind i de indre elektronstrukturer. Bohrs metode til at bestemme atomernes arkitektur var udpræget eklektisk, idet den byggede på en blanding af generelle kvanteprincipper og empirisk viden om grundstoffernes fysisk-kemiske egenskaber. Blandt de generelle principper spillede korrespondensprincippet en afgørende men også noget tåget rolle. Bohr selv antydede, at hans teori var vejledt af overvejelser baseret på korrespondensprincippet, men uden klart at redegøre for disse overvejelser. Alligevel lykkedes det ham ved hjælp af denne eklektiske metode at angive elektronstrukturen for samtlige grundstoffer og på denne måde at rekonstruere det periodiske system.

Bohrs nye teori blev entusiastisk modtaget af de fleste fysikere, der var fascinerede af den magi, der stammede fra troldmanden fra Blegdamsvej. Men de undrede sig også over teoriens logiske opbygning og især over den rolle, korrespondensprincippet spillede. I et brev fra Cambridge skrev Rutherford: "Alle her brænder efter at vide, om du kan fastsætte 'elektron-

ringene' ud fra korrespondensprincippet eller om du er nødt til at forlade dig på kemiske data for at gøre det" [5]. Den unge Wolfgang Pauli indså, at de kemiske data spillede en større rolle end korrespondensprincippet, der efter hans mening slet ikke kunne bruges til at forstå atomernes struktur. Man vidste at antallet af grundstoffer i perioderne var givet ved formlen $2n^2$ (2, 8, 18, ...), men hvad var forklaringen herpå? Ifølge Pauli var korrespondensprincippet ikke til nogen hjælp i dette spørgsmål, der måtte besvares på anden vis. I Paulis berømte teori for det periodiske system fra foråret 1925, hvori udelukkelsesprincippet først optræder (før elektronens spin var kendt!), spillede korrespondensprincippet ingen rolle.



Figur 4. Det smukt symmetriske argonatom som Bohr opfattede det i 1922.

Fra kvanteteori til kvantemekanik

Den gamle kvanteteori, baseret på forestillingen om elektroner i baner omkring atomkernen, viste sig at være uholdbar. Bohrs teori var forkert, men ikke mere forkert end at den i 1925 kunne omformes til den nye kvantemekanik, hvori banebegrebet var opgivet. I den komplicerede proces, der førte til Heisenbergs nye og abstrakte teori, spillede korrespondensprincippet – der ikke afhænger af banebegrebet – en afgørende rolle. Det var en central del af den dispersionsteori som Kramers og Heisenberg formulerede i foråret 1925 og som var den umiddelbare forløber for kvantemekanikken. Overgangen fra den gamle til den nye teori var af radikal natur, men den var ikke revolutionær i ordets stærke betydning. Blandt de elementer fra den gamle kvanteteori,

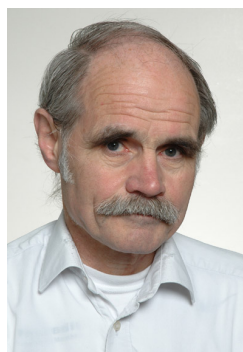
der forårsagede overgangen og levede videre i den nye teori, var korrespondensprincippet. I det mindste var det sådan, mange af samtidens fysikere opfattede det.

I en metodologisk forstand byggede kvantemekanikken i væsentlig grad på korrespondensprincippet, der så at sige blev løftet op på et højere plan. I sin banebrydende artikel fra sommeren 1925 gik Heisenberg så vidt, at han omtalte sin teori som "en matematisk generalisering af Bohrs korrespondensprincip." Ifølge Bohr selv gjorde kvantemekanikken på ingen måde korrespondensprincippet overflødigt, det udgjorde tværtimod en kontinuitet i udviklingen fra den gamle til den nye teori. I en artikel fra slutningen af 1925, hvori Bohr så tilbage på den stormende udvikling i kvantefysikken, skrev han [9]:

Korrespondensprincippet udtrykker tendensen til at bruge ethvert træk i de klassiske teorier i den systematiske udvikling af kvanteteorien, for derved at give en rationel transskription der passer med den grundlæggende modsætning der er mellem kvantepostulaterne og de klassiske teorier. ... Hele kvantemekanikkens apparat kan ses som en præcis formulering af de tendenser, der er indeholdt i korrespondensprincippet.

Litteratur

- [1] W. Fadner (1985), The generalized correspondence principle, *American Journal of Physics* **53**, 829-838.
- [2] A. Bokulich (2010), <http://plato.stanford.edu/entries/-bohr-correspondence>.
- [3] H. Kragh (1973), Atomteoriens Historie. Gyldendal København.
- [4] N. Bohr (1914), Om brintspektret, *Fysisk Tidsskrift* **12**, 97-110.
- [5] H. Kragh (2012), Niels Bohr and the Quantum Atom. Oxford University Press.
- [6] M. Dresden (1987), H.A. Kramers: Between Tradition and Revolution. Springer Berlin.
- [7] N. Bohr (1923), Om Atomernes Bygning, Jul. Gjellerup, København.
- [8] H. Kramers (1935), Atom- og kvanteteoriens udvikling i årene 1913-1925, *Fysisk Tidsskrift* **33**, 82-96.
- [9] N. Bohr (1925), Atomic theory and mechanics, *Nature* **116**, 845-852.



Helge Kragh er professor i videnskabshistorie ved Center for Videnskabsstudier, Aarhus Universitet, og arbejder især med de fysiske videnskabers nyere historie. I forbindelse med 100-året for Bohrs atommodel har han udgivet bogen "Niels Bohr and the Quantum Atom" [5].