

Història de la Física Quàntica a través dels experiments

semestre de tardor, curs 2017-2018

Apunts provisionals

Enric Pérez Canals

Apunts en procés de redacció. S'agrairan comentaris, crítiques, suggeriments, etc.



Índex

1	La Física de l'electró	1
1.1	Introducció a la Història de la Física Moderna	1
1.1.1	Algunes precaucions historiogràfiques	3
1.2	L'experiment de J.J. Thomson	4
1.2.1	Física del segle XX	4
1.2.2	Èter i electromagnetisme de Maxwell	5
1.2.3	Raigs catòdics	7
1.2.3.1	<i>Cathode Rays</i> , de J.J. Thomson	7
1.2.4	Descobriments i Positivisme	10
1.2.4.1	L'experiment de Thomson i l'atomisme	11
1.2.5	Anàlisi	11
1.3	L'experiment de Millikan	12
1.3.1	De <i>corpuscles</i> a <i>electrons</i>	12
1.3.2	L'atomisme químic	13
1.3.2.1	Mesures (relatives) de la massa. Pesos atòmics	13
1.3.2.2	Mesures (relatives) de la càrrega. Electròlisi	15
1.3.3	Les <i>mesures</i> absolutes	16
1.3.4	L'experiment de la gota d'oli	17
1.3.5	Anàlisi	19
	Apèndixs	20
1.A	L'aparició de la quantització	20
1.B	L'aïllament de l'electró (i de l'àtom)	20
1.C	Metàfores	21
	Bibliografia	21
2	Els quanta de llum	25
2.1	La llei de radiació de Planck	25
2.1.1	Calor radiant: la radiació del Sol	25
2.1.2	La llei de radiació	28
2.1.2.1	La llei de Planck i els elements d'energia de Planck, 1900	31
2.1.3	Anàlisi	34
2.2	L'efecte fotoelèctric	35
2.2.1	Reaccions a la llei de Planck	35
2.2.1.1	Els <i>quanta</i> d'energia d'Einstein	35
2.2.1.2	Recepció	39
2.2.2	L'efecte fotoelèctric	40

2.2.3	Anàlisi	41
Apèndixs		42
2.A	Nombre de modes propis	42
2.B	El concepte de fotó	42
2.C	Temperatura de la radiació	43
2.D	Hipòtesis sobre la dependència de l'entropia	43
2.E	Hipòtesis quàntiques	43
	Bibliografia	44
3	Models atòmics	47
3.1	L'experiment de Rutherford	47
3.1.1	Models atòmics	48
3.1.1.1	El model de Thomson	48
3.1.2	Rutherford	51
3.1.2.1	La distribució nuclear de la matèria	51
3.1.2.2	Impacte	55
3.1.3	Anàlisi	55
3.2	Sèrie de Balmer de l'hidrogen atòmic	56
3.2.1	El Congrés Solvay	56
3.2.2	Models planetaris: de Haas i Nicholson	57
3.2.3	Espectres atòmics	59
3.2.4	Bohr	60
3.2.5	Anàlisi	62
3.3	Experiment de Franck-Hertz	63
3.3.1	Recepció del model de Bohr	63
3.3.2	Noves evidències del model de Bohr	63
3.3.2.1	La llei de Moseley	64
3.3.2.2	Efectes d camps elèctrics i magnètics	66
3.3.2.3	L'experiment de Franck-Hertz	66
3.3.2.4	Les regles de quantització de Sommerfeld	67
3.3.2.5	Les probabilitats de transició d'Einstein	68
3.3.3	La nova teoria de Bohr	69
3.3.3.1	<i>On the Quantum Theory of Line Spectra</i> , 1918	69
3.3.4	Anàlisi	70
Apèndixs		71
3.A	Models	71
3.B	Probabilitats de transició	71
	Bibliografia	72
4	Difracció d'electrons	75
4.1	Primeres aparicions de la dualitat	75
4.1.1	Aplicació de la teoria quàntica al gas ideal (matèria)	79
4.2	La teoria quàntica del gas ideal	81
4.2.1	La hipòtesi de De Broglie	83
4.2.2	La difracció d'electrons	84
4.3	Anàlisi	84

Apèndixs	84
4.A Partícules i teoria quàntica de camps	84
Bibliografia	85

Capítol 3

Models atòmics

A continuació tractarem tres experiments relacionats amb la construcció de models atòmics. L'experiment de Rutherford, l'anàlisi espectral de la sèrie de Balmer, i l'experiment de Franck-Hertz. Sobre models atòmics, vegeu els articles de O. Darrigol i C. Bailly [3.1, 3.5].

Quedi clar d'entrada que tot això no té res a veure amb la via estadística (o termodinàmica) iniciada per Planck i Einstein (independentment l'un de l'altre), i que principalment tenia com a objectiu definir la temperatura de la radiació. En la via de Thomson i Rutherford la calor no intervé, i, de fet, la quàntica tampoc, almenys abans de l'entrada en escena de Bohr; el concepte clau és el de partícula elemental.

3.1 L'experiment de Rutherford

Tornem ara a la història que vem deixar penjada amb J.J. Thomson i el descobriment de l'electró. En aquella ocasió vem fer un salt fins el primer experiment de Millikan per mesurar la càrrega de l'electró, el 1910. Avui, haurem de rependre aquesta via, iniciada –recordem– pels descobriments dels RX, dels raigos catòdics, de la radioactivitat, per què és aquest el context on naixerà el impròpiament anomenat *model atòmic* de Rutherford (1911), que serà important principalment perquè antecedeix al de Bohr (1913). De fet, històricament podríem dir que és el model de Bohr el que crea el de Rutherford. Explicarem això en detall més avall.

Ara, però, passem d'estudiar radiacions en sí mateixes a estudiar la constitució de la matèria. La part novedosa és el tipus d'experiment. Consisteix en enviar radiació contra una làmina i veure què passa. El primer que ho fa és J.J. Thomson amb radiació β . Per Heilbron, aquest experiment seminal de Thomson és un dels més importants de la física atòmica [3.19]. Serà el que després farà Rutherford. El primer troba que el nombre d'electrons és aproximadament la meitat del número màssic,

$$n_{el} \approx \frac{A}{2}. \quad (3.1)$$

El segon, que el nombre de càrregues positives és aproximadament aquest mateix nombre,¹

¹Veurem que en realitat Rutherford no determina la càrrega del nucli.

$$n_{q^+} \approx \frac{A}{2}. \quad (3.2)$$

3.1.1 Models atòmics

Ja vem comentar al capítol 2 com després de 1897 Thomson va anar identificant els *corpuscles* en diferents fenòmens. Només després de 1900 comença a tenir la impressió que els corpuscles estan acceptats. Publica el llibre *Conduction of Electricity through Gases* el 1903 [3.41], i el 1906 li donen el Nobel.

Està clar que són un component de l'àtom, potser el vertader àtom (indivisible). Però aleshores aquest tema no despertava massa interès. Per exemple, al *Congrés Internacional de Física*, celebrat a París el 1900 només la ponència de Thomson (sobre 92) tocava la qüestió de l'estructura/composició de la matèria. Fins aleshores, es pensava que l'àtom era lo mínim. Tot i així, ja hi havia indicis de què la cosa potser era més sofisticada. Per exemple:

- *Radiacions.* α , β , raigs catòdics, i radioactivitat en general. D'on sortien? Què les provocava?
- *Espectres.* Ja vem veure que les mesures espectroscòpiques venien adquirint una rellevància cada cop major des de la segona meitat del s. XIX. La seva estructura multicolor feia difícil pensar que els àtoms no tinguessin estructura interna. En aquest sentit cal sumar-hi el desobriment, el 1896, de l'efecte Zeeman o desdoblament d'algunes d'aquestes línies sota l'acció d'un camp magnètic.
- *Problema de les calors específiques.* Cap el 1860 Maxwell senyala que la teoria cinètica té un problema greu amb el càlcul de les calors específiques. Seguint els raonaments que s'havien emprat per als graus de llibertat de translació, s'obtenien unes contribucions que no coincidien ni de lluny amb els experiments. Cal tenir present que encara no se sabia ben bé si les molècules eren diatòmiques o no (es comença a saber aleshores). Se'ls hi afegeix graus de vibració, rotació, etc. Fins que aparegui la quàntica l'explicació queda molt oberta. La precarietat dels *models* de Thomson i Rutherford, que veurem més avall, fa que aquests autors no esmentin aquest problema. Tant lluny estaven de poder-lo explicar.

3.1.1.1 El model de Thomson

Tot i que hi ha alguns antecedents de models atòmics decimonònics, per exemple, en l'estudi de Maxwell dels anells de Saturn (1859), en estudis dels vòrtex de l'èter (1882), o també en models amb agulles immantades (1897). És interessant veure com el disseny dels àtoms no era una prioritat. El propi Thomson no es va preocupar d'aquest tema fins a finals de 1899. En una comunicació llegida a la trobada de la *British Association for the Advancement of Science* diu ([3.40], p. 565):

I regard the atom as containing a large number of smaller bodies which I will call corpuscles;... In the normal atom, this assemblage of corpuscles forms a system which is electrically neutral. Though the individual corpuscles behave like negative ions, yet when they are assembled in a neutral atom the negative effect is balanced by something which causes the space through which the corpuscles are spread to act as if it had a

charge of positive electricity equal in amount to the sum of the negative charges on the corpuscles.

Notem que no proposa que hi hagi partícules petites carregades positivament. Thomson ja portava 20 anys treballant amb aquest tipus d'experiments i aparells, i sembla que tenia assumida certa asimetria entre les electricitats positiva i negativa. En una xerrada a la *Royal Institution* de 1901 proposa que els corpuscles portin la càrrega negativa, i que la càrrega positiva no sigui més que l'absència de l'altra. Es presenta així com el successor de Franklin, amb una novetat: unifica matèria i electricitat. L'atomisme esdevé crucial: la càrrega estaria transportada pels petits corpuscles que, a més, són els últims constituents de la matèria. Thomson recupera inclús una vella idea seva de 20 anys enrere: el fonament de la massa és electromagnètic. El 1903 fa el seu segon viatge als Estats Units el 1903, on presenta una primera versió del seu model a una sèrie de cursos que imparteix a Yale: els electrons fan òrbites concèntriques; estan, doncs, en moviment constant. Ell mai fa anar res semblant a un plum-pudding [3.24].² L'espai d'entremig es comporta "com si" fos càrrega positiva. La seva disposició explica qualitativament (no aspira a més), dona certa idea de per on aniran els trets de:

- La valència.
- Propietats periòdiques dels àtoms.
- La inestabilitat que s'evidencia en l'emissió radioactiva.

El seu model no explica (ni sembla que ho intenti) les mesures espectrogràfiques ni les propietats tèrmiques dels elements; només les químiques. El presenta a Londres a la sessió semanal de la *Royal Institution* el març de 1905 [3.44]: *The Structure of the Atom*. En un article de l'any anterior publicat a *Philosophical Magazine* llegim ([3.43], p. 237):

The view that the atoms of the elements consist of a number of negative electrified corpuscles enclosed in a sphere of uniform positive electrification, suggests, among other interesting mathematical problems, the one discussed in this paper, that of the motion of a ring of n negatively electrified particles placed inside a uniformly electrified sphere.

Hi ha centenars de cercles de corpuscles en moviments estacionaris. La massa de l'àtom és deguda només als corpuscles, per tant, n'hi ha d'haver milers. J. Larmor havia demostrat que la potència radiada per partícules carregades disminueix amb N , de manera que amb molts electrons les pèrdues arribaven a no ser problemàtiques. A més, el 1904 Thomson havia mostrat que hi ha moviments isòtrops que cancel·len la emissió. Busca la manera en què poden organitzar-se els electrons. Fa models emprant l'analogia amb agulles magnètiques flotants en una cubeta amb aigua i troba estructures d'ordre divers. S'inspira en uns càlculs de Kelvin, però els fa més dinàmics per explicar les radiacions [3.1].

En definitiva, no s'ha d'entendre que Thomson presentés mai un model reeixit, amb pretensió de retre compte de totes les observacions. Aquestes idees apareixen a uns llibrets: *Electricity and matter* [3.42] i *The corpuscular theory of matter* [3.45]. És un model que ha tingut més èxit en les històries dels models atòmics i la divulgació de

²Sobre el mite del model del pastís de panses, vegeu l'article de G. Hon i B.R. Goldstein [3.24].

l'àtom de Bohr que en el seu moment, però entre 1906 i 1910 és el que es considerava millor. A més, no hi ha dubte que va influir tant en Rutherford com en Bohr.

El 1905, a *The Structure of the Atom* ([3.44]) Thomson idea fins a 3 experiments per comptar quants electrons hi ha a cada àtom:³

-
- Dispersió de llum per gasos,
- dispersió de raigs X, i
- absorció de raigs β .

Aquest seria l'inici de les experiments de bombardeig. Thomson argumenta que cap mesura és concloent, però com són molt diferents entre sí i donen, més o menys, el mateix sí aporten informació rellevant. El resultat és que li surten molt pocs electrons per àtom: 1 a l'hidrogen, 6 al carboni, 8 a l'oxigen...: el nombre d'electrons és igual (o comparable) al nombre atòmic (3.1). Abans havia especulat amb què l'fcs de l'ordre de 1000 cops el nombre màssic. De manera que amb el seu model no pot retre compte de la massa dels àtoms, i tot el seu muntatge es ve abaix. Els problemes principals són:

- *Massa*. La massa ha de tenir l'origen en un altre lloc. De fet, hauria d'estar associada a la càrrega positiva.
- *Estabilitat*. Amb tant pocs electrons ($n_e \approx A/2$) no hi ha forma que l'àtom sigui estable.

A partir d'aleshores Thomson comença a estudiar quin pot ser aquest component positiu i quina és la natura de la càrrega. Fins el 1913 no torna a publicar res sobre models atòmics. Comença a estudiar els raigos canal el 1907, una radiació similar als raigos catòdics però en positiu. Havien estat observats per primer cop per E. Goldstein el 1886 en tubs de Crookes –*Kanalstrahlen*, també coneguts com a raigos anòdics perquè són raigos que van en direcció contrària als catòdics. Si es perfora el càtode, es veuen traces de llum darrera del càtode (no en la línia d'unió amb l'ànode); suposadament són cations que provenen del gas que hi ha al tub. Ja el 1899 Wien havia observat que es deflectien amb camps elèctrics i magnètics. Inicialment, Thomson creu que es tracta d'àtoms d'hidrogen, però en successius experiments veu que aquesta conclusió era deguda a la influència d'impureses. Finalment posa de manifest que el tipus de radiació depèn del gas que hi hagi dins el tub. L'alumne de Thomson F.W. Aston, del Cavendish, li suggereix idear una aplicació pràctica d'aquesta investigació amb raigos canal: l'*espectrògraf de masses*. Dissenyen un aparell per mesurar la relació q/m en gasos de natura desconeguda sota l'acció de camps elèctrics i magnètics en tubs de descàrrega: observen ions amb càrrega múltiple, combinacions moleculars desconegudes, com els radicals CH, CH₂, CH₃ o l'ió hidroxil OH⁺. Aquest invent tindrà molta importància en la física atòmica i nuclear venidera. Thomson i Aston escriuen molts articles sobre nous ions observats. Uns dels descobriments més importants són els isòtops del Neó (1912); perquè són els primers isòtops no radioactius. Aston rebrà el premi Nobel de química de 1922 “for his discovery, by means of his mass spectrograph, of isotopes, in a large number of non-radioactive elements, and for his enunciation of the whole-number rule” (regla que estableix que les masses dels isòtops són múltiples sencers de la massa de l'àtom d'hidrogen).

³Sobre aquest episodi vegeu l'article ja citat de J. Heilbron [3.19].

3.1.2 Rutherford

Ernst Rutherford (1871-1937) va nèixer a Nova Zelanda. Allí va estudiar i va aconseguir una beca per anar al Cavendish, a treballar amb J.J. Thomson (1895-1898). Ja com a professor va anar a Montreal (1898-1907), Canadà i finalment a Manchester, on es va fer catedràtic de física i va establir un laboratori per estudiar la radioactivitat. De seguida es va convertir en un dels experts mundials en radioactivitat.

El seu primer article en aquest tema és de 1899: “Naturaleza compleja de la radiación de uranio”. Hi ha raigs β i α , uns són molt penetrants i els altres fàcilment absorbits. El 1900-1901 Becquerel i Kaufmann (per separat) mostren que la radiació β consisteix en electrons. També alsehores Paul Villard, estudiant els raigs catòdics a l'École Normale de Paris troba la radiació γ (no amb aquest nom!) i determina que és 160 cops més penetrant que la β . Interpreta que el Radi emet una mena de raigs X molt penetrants. Rutherford va ser un dels que més va contribuir a aclarir la natura d'aquesta radiació. El 1902 també els troba en Urani, Tori i Radi i els bateja el 1903. Els caracteritza com a “raigs X més penetrants”. Deuy anys després, ell i Edward Neville da Costa (físic anglès) estenen el descobriment de la difracció de RX per posar de manifest que els raigs γ són de natura similar.

Però, com dèiem, Rutherford va destacar, sobretot, en radioactivitat. Havia estat descoberta per Henri Becquerel el 1896 en el marc dels seus estudis de RX. Poc després, el 1898, els Curie aïllen el Radi. A partir de 1900 Rutherford estudia la radioactivitat induïda. Els Curie ja havien vist que hi havia materials que es comportaven de forma erràtica; cossos que no eren radioactius però que de sobte passaven a ser-ho. El 1902-1903 Rutherford –a Montreal– juntament amb Frederick Soddy desenvolupa la idea de *transformació radioactiva*. El seu article conjunt “Radioactive change”, de 1903 [3.35], vé a ser un resum d'aquestes investigacions, on sobretot han treballat amb compostos de Tori. Estudiant l'energia dissipada per les fonts, mostren que les radiacions sempre venen acompanyades de canvis químics en les substàncies que les han emès: es creen nous elements. Rutherford i Soddy presenten els primers *esquemes radioactius*. També dedueixen que els canvis han de ser de natura subatòmica i donen la llei del decaïment:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N,$$

on N és el nombre d'elements radioactius i λ la constant de desintegració (la seva inversa es defineix la vida mitjana de l'element)

Val a dir que aquestes especulacions radioactives no van ser especialment ben rebudes. A Rutherford inclús li demanen a la Universitat de Montreal que retrassi alguna de les seves publicacions per actuar amb més prudència. Nous treballs –per exemple, de Soddy i Ramsey a Londres– confirmen els resultats i la disciplina de seguida s'institucionalitza. El 1904 apareixen els primers llibres i revistes sobre el tema. A Alemanya van una mica endarrerits; així com a Gran Bretanya (Cambridge, Oxford) inicialment no fan gairebé res de teoria quàntica, en radioactivitat els alemanys no estan inicialment molt posats. Però poc a poc va entrant a centreuropa: Hans Geiger, Otto Hahn, Lise Meitner, etc.

3.1.2.1 La distribució nuclear de la matèria

Li donen el Premi Nobel de Química de 1908 “for his investigations into the disintegration of the elements, and the chemistry of radioactive substances”, i molts altres

reconeixements. Amb el prestigi adquirit, el 1908 li ofereixen anar a Yale, i refusa. L'any anterior havia acceptat anar a la Universitat de Manchester a substituir Schuster com a *Langworthy Professor*.

Ja a Manchester, inicia la col·laboració amb el jove alemany Hans Geiger i es centra en la radiació α . El 1904, al Congrés de Saint Louis, Rutherford havia considerat públicament la possibilitat que les partícules α fossin àtoms d'Heli, doncs tenen una relació càrrega/massa que és la meitat de la de l'hidrogen:

$$\frac{q}{m} = \frac{1}{2} \frac{q_H}{m_H} \quad (3.3)$$

Si tenen la càrrega de l'àtom d'hidrogen, tenen 2 cops la seva massa. Però d'això no n'estarà "segur" fins el 1908. Avui diríem que l'hidrogen té un 1 protó, i per tant, si la partícula α té una càrrega $2q_H$, aleshores té una massa $4m_H$: 2 protons + 2 neutrons.

Amb Geiger busquen un mètode per a comptar partícules α . Fins aleshores comptaven sumant la càrrega total acumulada i dividint per e . Cal saber quan val la càrrega d'una sola partícula perquè, segons (3.3), si la càrrega és $2e$ poder la massa és major. Millor comptar les partícules directament. Comencen amb un comptador de centelleig amb sulfur de zinc fosforescent (obra de William Crookes, i també de Julius Elster i Hans Geitel). Però aquest mètode té molts inconvenients:

- Depèn de la disciplina de l'observador.
- Per contatges superiors a 150/min no és fiable.
- I si no tota partícula α produeix un centelleig?

Geiger idea un comptador elèctric basat en ionitzacions de l'aire que creen ionitzacions en cascada i acaben donant un pols en un galvanòmetre. El perfeccionarà el 1928 amb el seu (primer) estudiant Walter Müller. D'altra banda, Erich Regener, a Alemanya, mostra amb un comptador elèctric que cada α contribueix amb un centelleig, i Rutherford torna a fer anar el mètode antic. En qualsevol cas, ara ja mesuren Q total i N total, i veuen que $Q = 2e$. Per tant, fan una nova mesura de e . En donen la seva estimació i Rutherford cita els *Vorlesungen* de Planck, on es dona una e molt semblant a la seva ($4,65 \cdot 10^{-10}$ u.e.). Aquesta és la única referència a la teoria quàntica; com veiem, és molt perifèrica.

Aquest mateix any 1908 Rutherford i Geiger comencen a veure que hi ha algun problema amb aquestes partícules quan estudien el seu poder de penetració: de vegades surt una dispersió desmesurada. Rutherford decideix investigar el fenomen. Ernest Marsden (anglès, nascut el 1889 i recentment incorporat al grup) i Geiger fan l'experiment proposat per Rutherford. El 1909 escriuen "On diffuse reflection of the α -particles" [3.14]. Aleshores ja s'havien observat desviacions de partícules β , i ells estudien les desviacions de partícules α en diferents metalls. Troben que hi ha una petita porció de partícules α que pràcticament reboten en arribar a la làmina metàl·lica. La relació és de 1/8000, però observen que depèn de l'espessor de la làmina. El mateix any, juntament amb el seu estudiant Thomas Royds, Rutherford havia publicat "The nature of the α particle from radioactive substances", on discuteix la natura de les partícules α [3.34]: definitivament, són nuclis d'Heli carregats.

Inicialment, Rutherford interpreta l'experiment de Geiger i Marsden com un efecte de col·lisions múltiples. Però de seguida veu, fent càlculs, que l'explicació no és consistent, que si així fos les desviacions observades serien diferents. Conclou que l'àtom no és tant uniforme com es pensava. El 7 de març de 1911, a la *Manchester*

Literary and Philosophical Society, presenta l'article "The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom" [3.32]. Mostra que els rebots han de ser deguts a un únic xoc degut a una mena de camp elèctric molt i molt intens i descarta el model del plum-cake.

Per calcular la deflexió deguda al model de plum-cake remet a un article de Thomson (que no he consultat) ([3.46]; vegeu [3.19], p. 277 i ss.). El que farem nosaltres és seguir un tractament modern de P. M. Mejías que trobem a [3.37] (pp. 106-107). Per començar, podem estimar que, quan una partícula α xoca elàsticament amb un electró inicialment en repòs, la variació del seu moment és:⁴

$$\frac{p_f}{p_i} = \frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_e} \cos \theta \pm \left[\left(\frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_e} \right)^2 \cos^2 \theta - \frac{m_\alpha - m_e}{m_\alpha + m_e} \right]^{1/2}.$$

Com $m_\alpha \gg m_e$ la desviació màxima serà de l'ordre de 10^{-4} radians. Això pels electrons. Pel que fa a l'efecte del fons de càrrega positiva, que en el model de Thomson se suposa uniformement distribuïda (és igual si en moviment o no), es pot suposar que la força coulombiana serà, com a molt:

$$|\vec{F}| \approx \frac{Ze^2}{R^2},$$

on R és el radi de l'àtom. Si aquesta força actua durant un cert interval de temps Δt , la variació de moment és:

$$\Delta p \approx \frac{Ze^2 \Delta t}{R^2} = \frac{Ze^2}{Rv},$$

on v és la velocitat de la partícula α . Per fer una estimació de l'angle de desviació suposarem que l'àtom es desplaça en la direcció perpendicular a la línia d'incidència de les partícules α ; d'aquesta manera la variació de moment de la partícula α serà tot en la direcció perpendicular. Per tant podrem aproximar que:

$$\tan \theta_{\max} \approx \frac{\Delta p}{p} \approx \frac{Ze^2}{Rm_\alpha v^2}.$$

Per les velocitats habituals, de l'orde de 10^7 m/s i àtoms de $Z = 50$, per exemple, posant un radi d'1 Å l'ordre de magnitud torna ser, igual que en el cas de les desviacions provocades pels electrons, 10^{-4} radians.

La deflexió observada és major. Això pot ser degut a que la partícula α pateix moltes col·lisions. La mitjana d'una sola col·lisió és zero i la varianza $\overline{\theta^2}$. Per moltes col·lisions la mitjana de l'angle final Θ segueix sent zero, però la varianza:⁵

$$\overline{\Theta^2} = N \overline{\theta^2}. \quad (3.4)$$

Per tant, cal estimar el nombre de xocs a partir del nombre d'àtoms que es trobarà la partícula α en el camí. Si suposem que les deflexions són petites, com és el cas, l'angle final es pot suposar que es distribuirà segons una gaussiana en l'eix X , i una gaussiana en l'eix Z .⁶ Si ens calculem la gaussiana corresponent al mòdul de la dispersió Θ (el

⁴Només cal imposar conservació del moment

⁵La varianza és $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, i la desviació típica l'arrel quadrada d'això.

⁶A l'Eisberg-Resnick trobem aquest càlcul ([3.9], p. 118).

radi en coordenades polars) el nombre de partícules α dispersades entre Θ i $\Theta + d\Theta$ quedarà:⁷

$$N(\Theta)d\Theta = \frac{2I\Theta}{\Theta^2} e^{-\frac{\Theta^2}{\Theta^2}} d\Theta, \quad (3.5)$$

on I és la intensitat de partícules α que travessa la làmina. Si tenim una làmina de 10^{-6} m de gruix i estimem la mida de l'àtom com $1 \text{ \AA}$, el nombre de col·lisions és:

$$N \approx \frac{10^{-6}}{10^{-10}} = 10000.$$

Geiger i Marsden van obtenir una desviació típica de

$$\overline{\Theta^2} \approx 1^\circ \approx 2 \cdot 10^{-2} \text{ rad.}$$

Segons (3.4) la desviació per col·lisió serà:

$$\sqrt{\overline{\theta^2}} = 2 \cdot 10^{-2} \text{ rad,}$$

que concordaria amb el model de Thomson. Però també es va veure que la dependència de la variança amb N era lineal, i no com $\sqrt{N}$. A més, Geiger i Marsden també van trobar que la fracció de partícules dispersades a angles majors de 90° era 10^{-4} , i a partir de (3.5) el que sí obtenim és:

$$\frac{N(\Theta > 90^\circ)}{I} = \frac{\int_{90^\circ}^{180^\circ} N(\Theta)d\Theta}{I} = e^{-(90^\circ)^2} = 10^{-3500},$$

o sigui, molt menor. L'àtom de Thomson no pot explicar aquestes deflexions. En definitiva, Rutherford va suposar que hi havia centres amb càrrega $\pm Ze$ i núvols carregats amb $\mp Ze$. Fent anar camps centrals, trajectòries hiperbòliques, etc. tot li quadra força bé amb els resultats de Geiger i Marsden. Estima que el nucli mesura 10^{-12} cm. Presenta la fórmula que dóna la fracció de partícules que són desviades entre ϕ_1 i ϕ_2 :

$$\rho = \frac{\pi}{4} n t b^2 \left(\cotan^2 \frac{\phi_1}{2} - \cotan^2 \frac{\phi_2}{2} \right),$$

on n és la densitat d'àtoms per volum, t el gruix del feix α i b la distància mínima a què s'aproparia si el paràmetre d'impacte fos nul:

$$b = \frac{2NeE}{mv^2}$$

(m és la massa d'una partícula, v la velocitat i E la càrrega). I el nombre d'escintil·lacions en una mateixa àrea és:

$$y = \frac{ntb^2 Q \csc^4 \phi / 2}{16r^2}$$

⁷ Això vé de

$$f(x, y) dx dy = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} e^{-\left\{ \frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2} + \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2} \right\}} dx dy$$

i passar a coordenades polars, amb $r^2 = x^2 + y^2$, $\overline{r^2} = \overline{x^2} + \overline{y^2}$ i $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = 2\sigma_r^2$. El factor numèric vé de la normalització.

(Q és el nombre total de partícules que cauen al material i r la distància al punt d'incidència).

3.1.2.2 Impacte

El 1913 Geiger i Marsden publiquen un nou article on confirmen totes aquestes dades. Rutherford, el 1914, recull tots aquests resultats i conseqüències en l'article "The structure of the atom" [3.33].

Cal emfatitzar que el problema de la estabilitat no preocupa a Rutherford: dependrà de l'estructura íntima de l'àtom, que ara per ara és massa poc coneguda. Fa una referència al model planetari de Hantano Nagaoka (1904), qui havia demostrat que un model saturnià podia arribar a ser estable si la força atractiva era molt gran. No sembla que hi hagués relació/influència entre ambdós descobriments. I és que Rutherford no presenta un model atòmic, sinó una distribució massica. Ni tant sols la càrrega del nucli està clara: les desviacions són compatibles amb càrregues positives o negatives (no se sap per on passen).

La recepció és més aviat tèbia. La importància històrica és a posteriori. No es troba cap referència al suposat model de Rutherford a les revistes de *prestigi*. Ni tan sols se'n parla a Solvay (on acudeix el propi Rutherford!). O, per exemple, en una conferència que fa J.J. Thomson a la *Royal Institution* el 1913, titulada "L'estructura de l'àtom", ni el menciona. Tampoc al segon congrés Solvay celebrat a Brusel·les entre el 27 i el 31 d'octubre és protagonista, tot i que porta per títol *L'estructura de la matèria*; en rèplica a la xerrada de Thomson sobre el seu model diu []:

Les expériences sur les grands angles de diffusion de particules α par la matière, examinées en détail par Geiger, Marsden et d'autres, conduisent à la conclusion que l'atome consiste en un noyau positif, entouré d'une collection d'électrons dont le nombre est égal à la moitié du poids atomique.

Bohr, estudiant de física a la Universitat de Copenhagen, va anar al Cavendish a treballar amb Thomson amb una beca de la fundació *Carlsberg* a la tardor de 1911. Però Thomson no tenia massa temps per dedicar-li, i després de 2 trimestres, Bohr va decidir anar a Manchester a treballar amb Rutherford. Suposadament van congeniar molt bé tot i ser antagònics: Bohr era especulatiu, filosòfic, teòric; Rutherford pràctic, pragmàtic, experimental. Bohr estava interessat en els darrers debats sobre els quanta que havien tingut lloc a Brusel·les i, a més, li havia cridat molt l'atenció el descobriment de Rutherford, Geiger i Marsden: el nucli atòmic. Serà Bohr qui, en presentar el seu model el 1913 otorgui una importància històrica que el model de Rutherford mai va tenir. És en aquest sentit que el model de Rutherford és posterior al de Bohr.

3.1.3 Anàlisi

- L'experiment de Rutherford (Geiger-Marsden), fet abans per J.J. Thomson és el paradigma d'experiment de *scattering*. Consisteix en bombardejar un sistema per conèixer la seva estructura interna. En essència, és el que es fa en els acceleradors de partícules. Notem la hipòtesi subjacent: una interacció forta i abrupte com aquesta ens permet estudiar el funcionament d'allò que modifiquem. És a dir, suposem que la nostra intervenció i la reacció del sistema permet treure conclusions del sistema sense la nostra influència.

Tot i ser un experiment extrem (bombardejar) encaixa perfectament en la idea d'experiment científic, en contraposició a la mera observació (laboratori vs. natura).

- És un model atòmic? Rutherford no sap la càrrega, no explica cap fenomen conegut... només la distribució de matèria. Històricament té poc impacte però pedagògicament moltíssim. No admetem els ressonadors de Planck però sí el model de Rutherford.

3.2 Sèrie de Balmer de l'hidrogen atòmic

En la última sessió ens vam quedar, més o menys, al 1911. En arribar a aquest any, cal fer una parada i fer una al·lusió al Congrés Solvay que va tenir lloc a la tardor, per què ve a ser una cloenda de la primera fase de la història que estem explicant. El 1911 acabaria la “presa de consciència” de que a nivell atòmic les lleis conegudes no funcionaven.

A partir d'aleshores la teoria quàntica esdevé una disciplina cada cop més estesa i establerta, amb un nombre creixent de físics participant-hi i fenòmens incloent-s'hi. En aquest segon període entra en joc Bohr, que com se sap hi tindrà un paper central. Ja més endavant, cap els anys 20, els estudiants de doctorat dels Bohr, Born, Sommerfeld, Ehrenfest, etc. intervindran decisivament, desencadenant el que seria la 3a part de la història (que no explicarem aquí): Heisenberg, Dirac, Pauli, Gamow, etc., junt amb Schrödinger, que era més gran que ells, però s'incorpora a les discussions els anys 20.

3.2.1 El Congrés Solvay

La rellevància de la primera extensió de la hipòtesi de Planck a sistemes cristal·lins (càlcul de la calor específica dels sòlids) de cop va involucrar en les discussions quàntiques científiques que fins el moment s'havien mantingut al marge. Especialment important va ser l'aparició en escena de Walther Nernst, un experimental interessat en el comportament de la calor específica. El 1909 va citar per primer cop un article d'Einstein, i des d'aleshores va dedicar molts esforços en el seu prestigiós laboratori de Berlin a proporcionar dades –i també explicacions teòriques– a les investigacions quàntiques en curs. El seu paper també va ser molt important per un altre motiu: es va convertir en promotor del primer Congrés Solvay, en convèncer a l'empresari belga Ernst Solvay –qui s'havia enriquit gràcies a una patent per sintetitzar sosa– que assumís totes les despeses de la convenció que va tenir lloc a Brusel·les entre el 30 d'octubre i el 3 de novembre de 1911. Es tracta de la primera trobada dedicada exclusivament a debatre la hipòtesi quàntica.

Planck va presentar el que s'acostuma a denominar la seva *segona teoria* (que ja havia presentat anteriorment en altres llocs): quantitza l'emissió. Per primer cop introdueix la quantització de l'energia a consciència. Einstein va exposar la seva teoria de la calor específica dels sòlids i no va parlar dels quanta de llum. Nernst mateix també va proposar una fórmula empírica per ajustar les dades (no serà fins l'any següent que Debye, Born i Von Kármán faran les seves contribucions a aquesta qüestió). Langevin va explicar les seves recerques sobre teoria cinètica del magnetisme, en les quals havia incorporat la constant de Planck h . També van acudir al Congrés experimentals com Emil Warburg, Heinrich Rubens, i Heike Kamerlingh-Onnes. El físic

holandès va parlar del fenomen de la superconductivitat, fent una lleu al·lusió a la quantització. La resta de ponents van ser: Jean Perrin (que presenta arguments en favor de la concepció corpuscular de la matèria), Martin Knudsen (expert en teoria cinètica dels gasos ordinària), Lorentz i Jeans. Aquests últims es van dedicar a treure totes les conseqüències i implicacions possibles de les teories establertes fins aleshores (el que avui anomenaríem *física clàssica*). Així com el primer feia menys de dos anys que havia manifestat la seva claudicació davant els elements d'energia planckians, Jeans encara no s'havia decidit totalment a fer-ho; no obstant, ja no defensava la llei de radiació de Rayleigh-Jeans com l'única acceptable.

Henri Poincaré, convidat il·lustre, es va enterar en aquesta trobada de la vigència d'aquestes qüestions, doncs sembla ser que fins aleshores se n'havia mantingut aliè. Se'l va convidar per la seva fama com a físic i matemàtic. Poc després, el gener de 1912, va publicar al *Journal de Physique* una demostració de la inevitabilitat de la discontinuïtat, tancant així per a molts la primera etapa del naixement de la teoria quàntica [3.28]: quedava demostrat que la llei de Planck no es podria obtenir sense introduir algun tipus de discontinuïtat. L'octubre de 1911, Ehrenfest també havia publicat un article amb aquests i altres resultats (per exemple, la justificació del valor del quanta, $h\nu$) [3.7]. Tot i haver-se publicat unes setmanes abans de la celebració del congrés, i en la revista alemana de més prestigi aleshores (*Annalen der Physik*), gairebé no va captar l'atenció dels seus col·legues.

Com hem dit, la teoria quàntica, després Solvay, es va convertir en una de les preocupacions principals dels físics teòrics i experimentals, i el sistema de la cavitat radiant va deixar de ser l'únic terreny en què tenien lloc els primers assajos amb la discontinuïtat. De fet, el 1911, el nombre d'articles relacionats amb la teoria quàntica no dedicats al cos negre ja superava als que sí ho estaven. La discontinuïtat es començava a enredar entre les diverses branques de la física.

Solvay va aportar fons per establir un congrés amb periodicitat trianual a partir de 1913, però la Gran Guerra ho va impedir [3.29]. Al 2n Congrés Solvay (octubre 1913) es va parlar –i molt– dels experiments fets amb raigs X a Munic. El tema era *l'estructura de la matèria*: la difracció dels raigs X il·luminava un camp vastíssima amb observacions precises encara per fer, que podrien aportar informació inaudita de les intimitats de la matèria. Aquesta qüestió va monopolitzar els temes de les ponències presentades pels Bragg (William Henry i William Lawrence, especialistes en experiments amb sòlids cristal·lins), Marie Curie, Joseph J. Thomson –que va exposar àmpliament el seu model atòmic (només Ernst Rutherford va fer referència al descobriment del *nucli* atòmic)– i Max von Laue, entre d'altres. L'estructura atòmica practicament no es va discutir. Recordem que l'atomisme tot just s'acabava d'establir.

D'entre tots els temes a què es va transmetre la teoria quàntica, ens fixarem ara en els models atòmics.

3.2.2 Models planetaris: de Haas i Nicholson

Del model de Haas sí s'en va parlar al primer congrés Solvay, i sembla que va inspirar l'astrònom anglès John William Nicholson, els articles del qual van induir Bohr a interessar-se pels espectres atòmics. Quins altres models s'havien fet fins aleshores?

- Lorentz, 1896; electró lligat elàsticament.
- Lenard, 1902; concepte “dynamid” (una mena de dipols).

- Thomson, 1903; el més convincent però clarament incomplet, de caràcter heurístic.
- Nagaoka, 1903; model saturnià.
- Ritz, 1908; model magnètic amb què va intentar explicar els espectres (vegeu la secció 3.2.3).
- Rutherford, 1911; no és ben bé un model.

Cap s'estableix com a bo. Es desconeix massa del funcionament intern de l'àtom.

Després de llicenciar-se a la Facultat de Filosofia de Viena, l'austriac Athur Eric Haas busca un tema per la tesi. Presenta l'assaig "Història de l'Energia", però li exigeixen una tesi que vagi pròpiament de física. Es llegeix les coses que es fan i s'interessa per Planck, Wien, Einstein, i el tema quàntic en general. Haas nota que h no té fonament. Einstein, el 1909, havia volgut lligar h i e mitjançant una relació del tipus: $h = e^2/c$, doncs almenys en ordre de magnitud era correcta. Abans del primer Congrés Solvay, el febrer de 1910, Haas publica l'article: "Sobre el significat electrodinàmic de la llei de radiació de Planck i sobre una nova determinació del quàntum elemental d'electricitat i les dimensions de l'àtom d'hidrogen" [3.16]. Presenta un tractament semiclàssic –diríem avui– i proporciona un fonament electromagnètic per h . Pren, com a directriu, el model de Thomson, i bàsicament el que fa és igualar:

$$m \frac{v^2}{R} = \frac{e^2}{R^2}$$

(R és el radi de l'àtom) i aplicar la quantització a l'energia potencial:⁸

$$\frac{e^2}{R} = h\nu = h \frac{v}{2\pi R}.$$

Fa anar el model de Thomson i obté:

$$h = 2\pi e \sqrt{Rm} \Rightarrow R = \frac{h^2}{4\pi^2 e^2 m} \quad (3.6)$$

a és el radi de l'àtom. Haas obté el mateix que Bohr per a $n = 1$, però no parla d'estats excitats. Fa anar la fórmula de Balmer però –crec– no arriba a deduir les línies. Fent altres suposicions arbitràries també obté, per a la constant de Rydberg,

$$R = 16\pi^2 \frac{me^4}{ch^3},$$

que coincideix amb l'experimental en ordre de magnitud (és 8 cops superior al valor de Bohr).

A Viena alguns membres del tribunal se'n riuen d'ell: com ho presenta el febrer, un professor inclús li diu que sembla que el seu model formi part del Carnestoltes. Altres, però, en veure que Einstein i Stark portaven temps fent coses semblants (barrejant òptica, termodinàmica, radiació, quàntica, etc.), s'ho miren amb més atenció. Lorentz el cita a les Wolfskehl Lectures de 1910, a Göttingen. Planck a Karlsruhe, el 1911, i Planck i Sommerfeld a Solvay. No és que els hi sembli perfecte ni molt menys, però la similitud de l'ordre de magnitud i la idea fa que no es pugui descartar. Planck, per

⁸No confondre velocitat (v) amb freqüència (ν).

exemple, prefereix invertir l'ordre per interpretar la relació (3.6): que h fonamenti l'àtom i no al revés.

Arthur Schidloff, des de Ginebra, intenta millorar-lo afegint-li la capacitat d'emetre i absorbir: per a que es conservi l'energia interna de l'àtom emet i absorbeix electrons. Però segueix sense tenir la contraposició d'estat fonamental i estat excitat, o més clarament, sense la idea d'estat intern. També Hasenhörl, a Karlsruhe, intenta deduir la fórmula de Balmer amb el model de Haas, però identifica línies amb ressonadors, no amb diferències d'energies. Es pot dir que en aquests mesos els ressonadors planckians estaven adquirint realitat física.

El 1912 l'astrofísic John William Nicholson ataca la constitució atòmica per mirar d'explicar uns espectres que venen de nebuloses i de la corona solar i que no es coneixen. S'inventa –creu que ningú els havia descobert encara– 3 elements: nebulium, coronium i protofluorine. Fa models amb 4 electrons col·locats en diferents disposicions. En el tercer article que publica se li acut que el moment angular d'un àtom hagi de ser múltiple de $h/2\pi$. Segurament ho va treure de les actes Solvay, on això ja es comenta com a possibilitat. Argumenta que per això hi ha ratlles. Però lo primer que diu és que

$$\frac{E}{\omega} = n$$

(E és l'energia de rotació de l'anell i ω la freqüència de rotació). Obté una bona correspondència amb els espectres.

3.2.3 Espectres atòmics

Els inicis de la història dels espectres es remonten als inicis del segle XIX, i més concretament a l'estudi de l'espectre del Sol (cfr. secció 2.1.1). Poc després, però, s'estudien altres flames. Newton –que jo sàpiga– va ser el primer en fer anar un prisma per descomposar la llum. Cap el 1860 Bunsen i Kirchhoff perfeccionen els espectrògrafs fent anar xarxes i es posen a estudiar de manera sistemàtica els espectres de diferents substàncies: clorurs, bromurs, iodurs, etc. Ells s'inventen els aparells que encara es fan anar ara.

Durant la segona meitat del s. XIX augmenta l'interès pels espectres i per tractar d'explicar-los. Primer es troben certes relacions numèriques entre les línies d'un mateix element i entre línies d'elements diferents. El primer èxit sonat en aquest sentit és el de Johann Jakob Balmer (1825-1898). El 1884 troba, per l'hidrogen:

$$\lambda = \text{const.} \left(\frac{m^2}{m^2 - n^2} \right)$$

($m = 2, 3, 4, \dots; n = 1, 2, 3, \dots$). Més o menys a la mateixa època sorgeixen altres intents exitosos, extensions de la fórmula de Balmer: Herschel, Deslandres, etc. Destaca el treball que fa, des de 1880, el suec Johannes Robert Rydberg, i que publica el 1890 a les actes de l'Acadèmia Sueca [3.36]. Igual que Balmer, intenta fer anar nombres sencers. Estudia molts elements: Zn, Ca, Mg, K, Na, etc. i descobreix més regularitats. També l'alemany Schuster, independentment, i l'astronom E.C. Pickering. Cal tenir molt present que durant aquests anys les tècniques experimentals anaven millorant molt, tant a λ llargues com curtes.

El primer intent seriós de justificar teòricament les fórmules espectrals el va fer Walther Ritz (1903 i 1907). Obté fórmules més generals i formula el principi de

combinació de Ritz (“lleis nova de les sèries espectrals”): cada línia espectral d’un element es pot expressar com una diferència de 2 termes espectrals, cadascun dels quals depèn d’un nombre sencer m , apart de constants. Aquest principi ajudà molt als experimentals a ordenar les seves dades. Ritz parteix de que l’àtom es fa de magnets, però no ho sap posar en relació amb el nucli i els electrons.

3.2.4 Bohr

Niels Bohr (1885-1962) fa una estada a Manchester entre març i juliol de 1912⁹. Allí es convenç del *model* (distribució de massa i càrrega) de Rutherford. No sembla que conegués el treball de Haas. Si el va conèixer ja devia ser en el tram final de 1913, llegint bibliografia relacionada amb el seu propi model. Al contrari de Nicholson, Bohr no planteja els seus models com a prototipus, sinó com a àtoms reals.

En línies generals es pot dir que a finals de 1912 Bohr està convençut de:

1. *Model planetari*. Assigna 1, 2, 3... electrons a cada element. Això encara no estava massa estès, però ell recull la tradició de Thomson i Rutherford (abans d’anar a Manchester havia passat un trimestre infructuós al Cavendish amb J.J. Thomson).
2. Diferencia els fenòmens atòmics i els nuclears. És dels primers en fer-ho, per exemple per explicar radiació β ràpida o lenta.
3. h proporciona estabilitat. Georg von Hevesy, per exemple, es torna boig tractant de justificar l’estabilitat; Nicholson també la busca inspirant-se en Larmor: que la suma de les acceleracions dels electrons sigui zero. La proposta de Bohr és que no cal explicar h , no cal donar-li una fonamentació mecànica.
4. *Estat intern*: diferencia entre l’estat fonamental, permanent, natural, i l’excitat, momentani. Cal esmentar la influència en aquest sentit del llibre de Stark *Prinzipien der Atomdynamik. Die Elementare Strahlung*, de 1908. Stark aplica la quàntica a retre compte dels espectres de bandes: l’electró de valència és l’únic responsable de l’espectre.
5. Cap el gener de 1913, un cop ha llegit els articles de Nicholson, sembla que Bohr comença a parar atenció en els *espectres*: o sigui, que, curiosament, el resultat més conegut i la prova més contundent del seu model no el troba fins el final. La motivació inicial de Bohr no és, doncs, retre compte dels espectres, com tampoc ho havia estat la de Thomson ni la de Rutherford.

El 1913 apareix publicada la trilogia de Bohr “On the Constitution of atoms and molecules” [3.2]. Conté:

- Part I [Principis Generals] 1. Com lliguen els electrons els àtoms positius. 2. Consideracions generals. 3. Emissió d’espectres. 4. Continuació de les consideracions generals. 5. Absorció de radiació. 6. L’estat permanent d’un sistema atòmic.

⁹Sobre la relació de l’àtom de Thomson amb el de Bohr, vegeu [3.21]. Sobre el naixement de l’àtom de Bohr [3.4, 3.20, 3.22, 3.27]

- Part II. [Sistemes que només tenen 1 electró] 1. Suposicions generals. 2. Configuració i estabilitat dels sistemes. 3. Constitució d'àtoms que contenen molt pocs electrons: Hidrogen, Heli, Liti, Beril·li. 4. Àtoms que contenen més electrons. 5. Raigs X característics. 6. Fenòmens radioactius.
- Part III. [Sistemes que contenen molts nuclis] 1. Preliminars. 2. Configuracions i estabilitat dels sistemes. 3. Sistemes que contenen pocs electrons. 4. La molècula d'hidrogen. 5. Formació de sistemes. 6. Sistemes que contenen un nombre més gran d'electrons. 7. Observacions finals.

Només comentarem una mica els principis generals. Bohr deixa clar de bon principi que, tot i fer anar el que ell anomena model de Rutherford, no es pot fer anar l'electrodinàmica clàssica. Ja s'ha vist que no serveix (ni tampoc la mecànica) a aquest nivell de descripció. Cal introduir quelcom aliè: la constant de Planck. Bohr ho fa igualant la força centrípeta i coulombiana (e és la càrrega de l'electró i E la del nucli):

$$\frac{Ee}{r^2} = \frac{mv^2}{r}. \quad (3.7)$$

Bohr no descarta que hi hagi òrbites el·líptiques, però com que no aporten nous nivells energètics, treballa amb òrbites circulars. Prescindint ara de la radiació, l'energia W necessària per portar l'electró des de la seva òrbita fins a l'infinit donarà la mesura del radi:

$$W = -\left(\frac{1}{2}mv^2 - \frac{eE}{r}\right). \quad (3.8)$$

Això és l'energia de l'electró en òrbita. Finalment, de (3.7) i (3.8):

$$r = \frac{eE}{2W}.$$

I la freqüència:

$$\omega = \frac{2^{1/2}}{\pi} \frac{W^{3/2}}{eE\sqrt{m}} = \frac{1}{T} = \frac{\nu}{2\pi r}.$$

L'energia no pot tenir qualsevol valor, sinó que ha de ser (cita Nicholson):

$$W = \frac{1}{2}\tau h\omega,$$

on τ és un nombre sencer positiu. Quan l'electró ve de l'infinit (amb $\nu = 0$ i interacció inexistent) emet una freqüència $\omega = \omega_0/2$. Aquesta serà la freqüència de revolució a l'òrbita final. De manera que ω és una mena de valor mig entre la ω final i la ω original. Això pot estar relacionat amb la segona teoria de Planck, que feia anar múltiples de $h\nu/2$ enlloc de $h\nu$. A partir del valor d'aquesta freqüència, emprant relacions newtonianes d'equilibri de forces, Bohr dedueix la resta de magnituds:

$$W = \frac{2\pi^2 me^2 E^2}{\tau^2 h^2} \quad 2r = \frac{\tau^2 h^2}{2\pi^2 me^2 E^2} \quad \omega = \frac{4\pi^2 me^2 E^2}{\tau^3 h^3} \quad (3.9)$$

O sigui, que W , r , i ω només poden prendre certs valors. A partir d'això obté mides de l'àtom, potencials de ionització i freqüències òptiques de l'ordre de magnitud de les conegudes. Queden així definits els estats estacionaris.

A continuació tracta els processos d'emissió i adsorció i introdueix el tema dels espectres. Bohr creu que, ja posats a fer anar la hipòtesi de Planck, podem suposar que la radiació està emesa en paquets d'energia: sinó, la freqüència variaria contínuament i res no quadraria. Cita la teoria de Nicholson, però notant que no explica ni la llei de Balmer ni la de Rydberg. Per arreglar-ho cal fer dues suposicions:

1. La dinàmica del sistema en equilibri es pot tractar en termes de la mecànica ordinària, però no el pas dels sistemes entre diferents estats estacionaris.
2. El pas d'un estat estacionari a un altre produeix radiació homogènia monocromàtica [no *quanta*], la freqüència de la qual ve donada per la relació de Planck $\epsilon = h\nu$.

Manipulant les equacions (3.9) arriba a la freqüència emesa en una transició de l'estat 2 a l'1:

$$\nu = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3} \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3 c} \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right) = R \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right).$$

Bohr mostra a continuació com amb això pot explicar les línies de l'hidrogen. Dedueix la sèrie de Balmer i la de Paschen (infraroig), ja predita per Ritz, i també les ultraviolades. Encara més, dedueix la constant comú a totes les sèries:

$$R_o = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3}.$$

Per la resta d'elements Bohr no obté la sèrie, però creu que és qüestió de temps i paciència. Es limita a justificar que la constant ha de ser la mateixa: la dedueix per a τ 's grans. Hi ha qui veu aquí una forma primitiva del *principi de correspondència*: per a nombres quàntics grans s'han de recuperar els resultat clàssics.

Bohr presenta un model que pretén explicar-ho tot. És una primera versió, però no ha de deixar cap fenomen atòmic fora de les seves atribucions. En els altres 2 articles de la trilogia discuteix com deuen estar fets els successius elements de la taula periòdica, com explicar els fenòmens radioactius, etc. En la tercera part parla de molècules. L'espectroscopia ja no surt gaire més: tracta de les especulacions a què s'havia dedicat a Manchester.

3.2.5 Anàlisi

- Aquest és un cas curiós i molt il·lustratiu de la diferència entre el *context del descobriment* i el *context de la justificació*. La prova més exitosa, la sèrie de Balmer, és la última que obté Bohr. Ell pensava que el seu model era útil i atinat abans d'obtenir-la, però difícilment la comunitat l'hagués acceptat sense ella.
- L'àtom de Bohr ja implica certa pèrdua de visualització: la seva forma de garantir l'estabilitat és manu militari. Els electrons, en estats estacionaris, no radien. Clàssicament això és inconcebible. El mateix passa amb els salts electrònics: perquè emeten amb la freqüència que diu Bohr? Quin és el mecanisme? Ja saben on aniran a parar abans d'arribar-hi? L'oscil·lador harmònic quàntic en dóna un exemple: què és? Com es pot definir? Quin sentit té la seva freqüència?

- Com descriu la Mecànica Quàntica les línies espectrals? Podem imaginar un electró desexcitant-se? I un àtom? Es pot donar una descripció del procés? O és només una descripció estadística? Es pot seguir parlant de salts electrònics? Recordem que els nivells de l'àtom corresponen a estats estacionaris i, per tant, si en coneixem l'energia, no en coneixem el moment en què hi ha el canvi d'estat. La vida mitjana es pot relacionar amb l'amplada de línia, però això no vol dir que es pugui determinar el mecanisme.

3.3 Experiment de Franck-Hertz

Avui parlarem una mica de la recepció del model de Bohr. Veurem que de seguida es troben proves a favor de les hipòtesis que havia fet el físic danès, però també va haver-hi objeccions serioses. Un dels experiments que trobem a la literatura és què van fer el 1914 Gustav Hertz i James Franck. Veurem que es va convertir en una de les proves més celebrades del model de Bohr malgrat les intencions dels autors.

3.3.1 Recepció del model de Bohr

Poc després de la publicació dels articles de Bohr de 1913 aparegueren proves confirmatòries: H, He^+ , espectre RX, Franck-Hertz.¹⁰ Però amb el temps es va veure que només funcionava bé per àtoms amb dos cossos: hidrogen atòmic, hidrogen molecular ionitzat, heli ionitzat. Per àtoms amb més electrons el model només donava resultats qualitius, i es pensava que era perquè les pertorbacions dels altres electrons (repulsió electrostàtica) no era negligible.

Va ser la deducció de la fórmula de Balmer i de la constant de Rydberg el que més va impressionar els seus col·legues. Tot i així, fins que no va aparèixer l'extensió de Sommerfeld a l'estructura fina, el 1916, no se li va fer massa cas (recordem que hi ha la Guerra entre mig). D'Ehrenfest, per exemple, llegim en una carta de 1913 que diu que el treball de Bohr li sembla repugnant, i que si això és física, millor tirar la física (i a ell mateix) a les escombraries ([3.31], p. 7). Encara el 1916, quan felicita Sommerfeld per carta (i als físics de Munich), diu que li sap greu que els seus èxits hagin ajudat el monstruós model de Bohr.

Què va dir Einstein? El 1913, segons Hevesy (que hi va parlar a Viena) estava sorprès positivament. Però, com molts dels seus col·legues, sembla que es va convèncer gràcies als treballs de Sommerfeld. Així ho diu en una carta de 1916, la primera conservada on es refereix a Bohr. Veurem més avall que el mateix any 1916 publica un article sobre teoria quàntica on, a més de dotar els quàntums de llum de moment, n'estableix una relació amb l'àtom de Bohr.

3.3.2 Noves evidències del model de Bohr

Abans de la reinterpretació de l'experiment de Franck i Hertz per part de Bohr, havien aparegut altres indicis favorables al model del danès. Bohr, per exemple, prediu que les sèries de l'anomenat hidrogen estel·lar d'Edward Pickering en realitat corresponen a Heli ionitzat (es confirma el 1914). Paral·lelament, ell i Antonius van den Broek identifiquen el nombre atòmic i la càrrega nuclear. Aquests resultats inspiren la recerca del britànic Henry G.J. Moseley.

¹⁰Sobre la recepció del model de Bohr es pot consultar [3.26, 3.27]

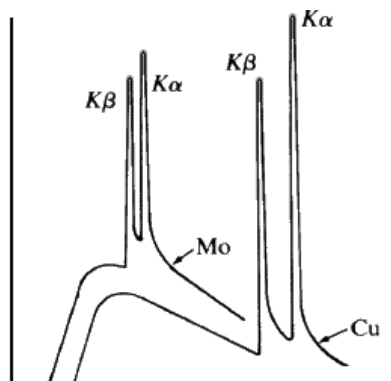


Figura 3.1: Espectres de raigs X pel molibdè i el coure. L'eix Y representa la intensitat; l'eix X la longitud d'ona.

3.3.2.1 La llei de Moseley

A principis de 1913 Henry Moseley (1887 - 1915, mort a la Gran Guerra amb 27 anys)¹¹ i Charles G. Darwin (net del naturalista) –ambdós a Manchester– demanen permís a Rutherford per a estudiar la difracció de raigs X, recentment descoberta pels investigadors de Munich. Els Bragg (W. Henry, anglès, i W. Lawrence, australià, pare i fill, ara ja els dos a Anglaterra) també els estan estudiant, perquè W. Henry creia que els raigs X eren corrents de partícules neutres. L'estiu de 1913 Moseley comença a estudiar sistemàticament aquestes emissions. La col·laboració amb Darwin no dura massa, però almenys (re)descobreixen aquesta radiació misteriosa es forma de dues contribucions: un fons homogeni, continu, i unes freqüències característiques ben definides (Fig. 3.1); el físic britànic Charles Glover Barkla (premi Nobel el 1917 per “his discovery of the characteristic Röntgen radiation of the elements”) ja ho havia notat en una sèrie de treballs iniciats el 1906.

Així com els Bragg desenvolupen, sobretot, tècniques de difracció per a analitzar estructures cristal·lines, Moseley es preocupa de fer l'anàlisi espectral dels raigs X. Tot i que els Bragg, en certa manera, van ser els pioners, es pot dir que Moseley consolida l'espectroscopia de raigs X com a disciplina.

Moseley troba, a part de l'espectre continu, dos grups de ratlles, que denomina K ($n_f = 1$) i L ($n_f = 2$); vegeu les figures 3.1 i 3.2. Dins de cada grup, hi ha 2 ratlles més intenses, que denomina α i β (forta i dèbil). Moseley no va fer anar la notació K_α , K_β , L_α i L_β , però es va imposar ràpidament.

Va introduir una novetat experimental: un tub de raigs catòdics que fa xocar els electrons contra una zona molt petita del blanc, i després els raigs X han de passar per una petita escletxa de platí i després un orifici d'alumini; la resta de radiació l'aïlla amb plom. La radiació anava cap a l'espectroscopi i finalment era capturada en una pantalla on es fotografiava. Estudia 11 elements: calci, titani, escandi, vanadi, crom, manganès, ferro, cobalt, níquel, coure i zinc. El novembre informa a Bohr que ha obtingut, de llarg, el que ell esperava. Després es trasllada a Oxford, on segueix investigant fins el maig de 1914, seguint amb altres línies.

Farem un resum dels resultats més importants de les investigacions de Moseley [3.30]:

¹¹ Sobre Moseley, vegeu l'article de Heilbron [3.18].

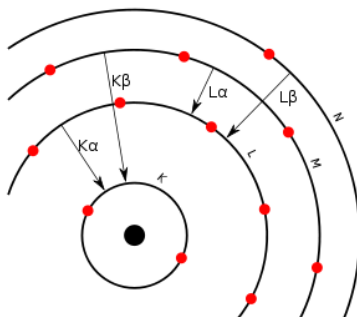


Figura 3.2: Esquema de transicions per les línies K_α , K_β , L_α i L_β de l'espectre de raigs X.

- La freqüència de qualsevol línia de l'espectre de raigs X és aproximadament proporcional a $\nu = A(N - b)^2$, on A i b són constants (en les representacions típiques es grafica $\sqrt{\nu}$ vs. N per cada sèrie). Obté les K_α , K_β , L_α i L_β de diferents elements. Per la K_α s'ha de complir, segons Bohr:

$$\nu_\alpha = \nu_o(N - 1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right).$$

I per la L_α :

$$\nu_\alpha = \nu_o(N - 7,4)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right).$$

En aquest darrer cas dins el parèntesi tindríem la càrrega efectiva, i l'apantallament seria 7,4.

El resultat important és que queda clar que la càrrega nuclear és N . Antonius van de Broek també havia proposat que el nombre atòmic (el lloc a la taula) no fós $A/2$ sinó un nombre sencer. Encara, però, no tenia significat. Això també és el que defensava, per exemple, Rutherford. L'espectre de raigs X d'un element (des de l'alumini a l'or) ve caracteritzat pel nombre sencer N . Això és molt important, perquè vol dir que hi ha una magnitud molt rellevant que varia de forma discreta i regular. A més, aquestes línies han de tenir a veure amb les capes internes, que deuen ser molt semblants entre elements. Les capes superficials, per contra, han de ser les més característiques.

- N és el nombre atòmic d'un element i s'identifica amb el nombre de càrregues positives que hi ha al nucli. Moseley cita el resultat de Rutherford: la desviació de les partícules α era per un nucli amb una càrrega positiva d'aproximadament $A/2$ electrons, on A és el pes atòmic.
- Tabula N des de l'alumini, suposant que és 13 (correcte), fins l'or (79). Coincideix amb el lloc que ocupen en el sistema periòdic, i el pes augmenta en dues unitats. L'ordre del nombre atòmic és el mateix que el del pes atòmic excepte en els casos en què aquest últim no està en concordança amb el de les propietats químiques. Per exemple, el níquel i el cobalt (27 i 28) estan girats (58,97 g

i 58,68 g). Abans no estava clar quin anava abans a la taula. Mendeleiev els havia posat en l'ordre *correcte* per què es va basar en les propietats físiques i químiques i no en el pes.

- Identifica tres elements, tres N 's per descobrir: 43, 61, 75 [posteriorment: Tecneci, Prometi, Reni].

Ni molt menys s'ha de pensar que aquesta contribució es va entendre immediatament com un èxit de la teoria de Bohr. De fet, sí va tenir èxit però perquè hi havia molta part experimental, no pel contingut teòric. Segons com, va contribuir més aviat a difondre els descobriments de Rutherford. Fins el 1916 l'àtom de Bohr no comença a establir-se. Recordem novament que això vol dir que estem en plena Gran Guerra. Al final, Alemanya va quedar una mica aïllada per beligerant i perdedora. Per tant, s'ha d'esperar una mica a veure el model de Bohr acceptat.

3.3.2.2 Efectes d camps elèctrics i magnètics

El 20 de novembre de 1913 Stark publica les seves observacions sobre el desdoblament de les línies espectrals de l'hidrogen (recordem que l'efecte Zeeman era conegut des de finals del segle anterior). La separació és proporcional a la intensitat del camp, i el coeficient de proporcionalitat depèn de la línia. Hi ha un primer intent d'explicar-ho amb el model de Bohr per part de Warburg, senzillament variant la segona hipòtesi fonamental, però no és reeixit. El 1914 i 1915 Bohr analitza l'efecte dels camps elèctric i magnètic en l'espectre de l'hidrogen. Es centra en n 's grans i moviments estrictament periòdics, doncs el model és massa precari. Fa algo com això:

$$E_n - E_{n-1} \approx h\bar{\nu}_n \Rightarrow \frac{dE}{dn} \approx h\bar{\nu}_n.$$

Segons Darrigol [3.4], en els manuscrits li diu 'principi de correspondència', i aquí vol dir poca cosa més que per n 's grans coincideixi lo mesurat amb lo deduït del model. Bohr dedueix, mitjançant aquest principi de correspondència primitiu (regla de selecció) resultats satisfactoris per l'efecte Stark:

- Per les components extremes, dedueix la proporcionalitat amb el camp (posició).
- Fent anar una analogia clàssica.
- Obté la polarització correcta d'aquestes components.

Ara bé, posteriors observacions refuten aquests resultats: les línies es separen en més de dues components, i els resultats només són *bons* per les components dels extrems. En l'efecte Zeeman la cosa encara és pitjor. Bohr obté violacions de la regla $\Delta E = h\nu$, i ha de posar coses com $\Delta E = h(\nu \pm \delta\nu)$ (segons Darrigol, inclús hi ha errors en les consideracions energètiques de Bohr [3.4]).

3.3.2.3 L'experiment de Franck-Hertz

James Franck i Gustave Hertz (nebot de Heinrich), ajudants de Heinrich Rubens (un dels principals implicats en la obtenció de l'espectre del cos negre) presenten els resultats d'aquest experiment a la *Societat Alemanya de Física* l'abril de 1914 [3.11, 3.12].¹²

¹²Sobre la història d'aquest experiment, es pot consultar l'article de C.A Gearhart [3.13]. També el de Horn i Goldstein [3.23]

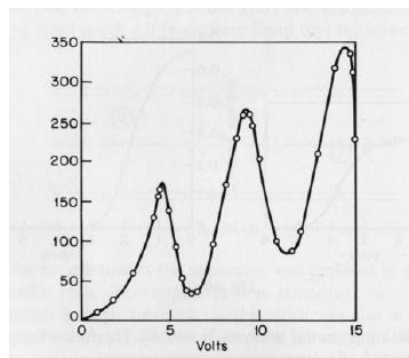


Figura 3.3: Figura que apareix a l'article de Franck i Hertz [3.11]. A l'eix de les X es representa el voltatge d'acceleració dels electrons, i a les Y 's la intensitat d'arribada del feix.

Des de 1911, estudien els tubs de descàrrega gasosa, en particular la connexió entre el potencial de ionització d'un gas i la teoria quàntica. Van estudiant potencials de ionització de diferents gasos, i el 1914 presenten uns resultats inesperats: troben un potencial de 4,9 volts amb mercuri (Fig. 3.3) i 21 volts amb heli. Remeten, en les seves explicacions, a Stark i Lennard (que era qui havia introduït el mètode).¹³ Ho relacionen amb la teoria quàntica, però emprant un model més semblant al de Thomson que el de Bohr: el model de Stark [3.13]. Identifiquen l'emissió que es veu de la transició amb $h\nu \approx 4,9$ volts ($\lambda = 2536 \text{ \AA}$), i en dedueixen la constant de Planck. Per ells aquesta radiació, que coincideix amb una de les línies del mercuri, vindria provocada per una oscil·lació d'un electró amb aquesta freqüència. També és el valor que disten els pics d'intensitat (Fig. 3.3). De manera que uns electrons ionitzarien el mercuri i uns altres crearien ressonàncies.

Sembla que Bohr, el 1913, no havia acudit a dades d'aquest tipus. Sí predeia en la seva trilogia que si un electró col·lisiona amb un àtom, perdrà energia en valors quantitzats. El 1915 proposa, a partir del coneixement d'altres sèries de mercuri, que els 4,9 volts no siguin el potencial de ionització, com diuen Franck i Hertz, sinó el de transició entre dos estats estacionaris.¹⁴ Si els electrons que col·lisionen amb el mercuri tenen una energia inferior, no perden energia perquè no poden.

No és fins el 1919 que Franck i Hertz accepten que han proporcionat una confirmació de la teoria atòmica de Bohr: és un recolzament importantíssim per la idea d'estat estacionari perquè mostra que l'estabilitat supramecànica està a prova de les col·lisions electròniques. Els hi donen el premi Nobel el 1925 "for their discovery of the laws governing the impact of an electron upon an atom".

3.3.2.4 Les regles de quantització de Sommerfeld

Un dels primers intents d'agrupar i justificar totes les quantitzacions fetes fins aleshores (Planck, Ehrenfest, Einstein, Bohr) és el de Sommerfeld i l'escola de Munich. Proposa, el 1916:

¹³El potencial de ionització del mercuri és 45 eV.

¹⁴Avui diríem que correspon a la transició $6^1S_0 \rightarrow 6^3P_1$.

$$\oint p_i dq_i = n_i h.$$

(p_i és el moment, q_i la posició, n_i un membre sencer, i $\oint$ indica una integral sobre un cicle complet). Wilson i Ishiwara, però no en treuen tantes conseqüències com Sommerfeld. Ell aplica la relativitat a les òrbites bohrianes i obté el·lipses. Troba un nou desdoblament en l'hidrogen, que ja s'havia observat aleshores: l'estructura fina. Per a fer-ho introdueix el segon nombre quàntic (azimutal).

Karl Schwarzschild i Paul S. Epstein segueixen el camí obert per Sommerfeld i reten compte de l'efecte Stark. Sommerfeld mateix i Debye generalitzen la quantització a moviments multiperíodics. Intenten aplicar-ho a l'estudi de l'efecte Zeeman i obtenen un resultat satisfactori a mitjes: han d'idear regles de selecció *ad hoc*.

La novetat més important és que per primer cop les regles es poden aplicar a moviments multiperíodics, no només als estrictament periòdics. Aquests moviments es poden descomposar en periòdics, descriure amb les variables acció-angle, però no tenen perquè ser periòdics. Bohr, després de 1916, ho incorpora a la seva teoria. També tracta de relacionar els harmònics dels moviments amb les freqüències de les línies: juntament amb Kramers dedueix alguna regla de selecció i intensitats i regles de construcció d'àtoms. És el germen del principi de correspondència.

3.3.2.5 Les probabilitats de transició d'Einstein

En uns articles de 1916-1917 Einstein aplica el model de Bohr a estudiar l'equilibri matèria radiació en un article on introdueix les probabilitats de transició [3.8]: dues induïdes (emissió i adsorció) i una espontània (emissió). La idea és que l'àtom de Bohr sigui el responsable de l'intercanvi entre matèria i radiació, és a dir, que faci el paper dels ressonadors planckians. Amb això i imposant equilibri, Einstein arriba a la llei de Planck. Aquest és el procediment.

En un sistema de dos nivells $\epsilon_n > \epsilon_m$ ($\epsilon_n - \epsilon_m = h\nu$) l'equilibri ve donat per:

$$p_m \rho B_n^m e^{-\beta \epsilon_m} = p_n \rho B_m^n e^{-\beta \epsilon_n} + p_n A_m^n e^{-\beta \epsilon_n}, \quad (3.10)$$

on p_i és el pes estadístic de l'estat i , i B_i^j la probabilitat de transició induïda de l'estat j a l' i i A_m^n la probabilitat espontània.¹⁵ Imposant que en el límit de densitats ρ grans (Rayleigh-Jeans) s'obté

$$p_m B_n^m = p_n B_m^n,$$

i per tant

$$\rho = \frac{A_m^n / B_m^n}{e^{\frac{\epsilon_n - \epsilon_m}{k_B T}} - 1}. \quad (3.11)$$

Imposant ara que

$$\frac{A_m^n}{B_m^n} = \alpha \nu^3$$

¹⁵Notem que el procés eminentment quàntic és l'emissió induïda. És el principi fonamental pel que funcionen els làsers, construïts per primer cop el 1960. Veurem més avall (apèndix 3.B), que si traiem aquest terme obtenim la llei de radiació de Wien.

i

$$\frac{\epsilon_n - \epsilon_m}{\kappa_B T} = h\nu$$

ja tenim la llei de Planck a partir de (3.11).

En aquest mateix article Einstein demostra amb un altre tractament (estudiant les fluctuacions) que per a que hi hagi equilibri en els processos elementals, cal assignar moment als quanta d'energia. A partir d'aquí sí són partícules: tenen energia i moment.

Bohr es queda amb la primera part de l'article, i no dona importància a la segona, doncs mai li van agradar els quanta de llum; no es va acceptar fins que no va tenir més remei, després de l'estudi de l'efecte Compton, i només després d'intentar explicar-lo sense quàntums de llum. Introdueix aquestes probabilitats a la seva nova teoria per a calcular intensitats de les línies. Aquest tipus d'explicació evita parlar del mecanisme responsable d'aquestes transicions. Bohr no ho sap, Einstein tampoc. A la llarga, el primer s'hi conformarà (forçat, diria ell, per les observacions), el segon sempre pensarà que la teoria, tot i funcionar molt bé, no és la definitiva, perquè no és completa.

3.3.3 La nova teoria de Bohr

El 1915 Bohr es proposa consolidar la teoria atòmica i la teoria quàntica en general. Vol clarificar-la, en part perquè s'estan fent molts càlculs poc cuidadosos a partir del seu model. Finalitza la redacció del nou text el 1916, però no la publica (ja en tenia les proves d'impremta) per què just li arriben al despatx els treballs de Sommerfeld sobre l'estructura fina [3.38]. En aquest treball inèdit Bohr formula suposicions positives només vàlides per sistemes estrictament periòdics. Principalment es basa en la hipòtesi adiabàtica d'Ehrenfest (1916) per deduir una regla de quantització generalitzada: moviments “permesos” es transformen en “permesos” en una transformació infinitament lenta de les forces que actuen sobre el sistema. Això permet, per exemple, obtenir els moviments quànticament permesos d'un oscil·lador anharmonic a partir dels d'un harmònic (Fig. [?]). Bohr veu en aquesta transformabilitat contínua dels estats estacionaris una conseqüència de la seva necessària estabilitat.

3.3.3.1 On the Quantum Theory of Line Spectra, 1918

Després de retirar de la impremta el seu primer intent de 1916, el 1918 Bohr finalitza un nou treball que, ara sí, presenta una teoria quàntica general [3.3]. La nova teoria incorpora les regles de Sommerfeld, amb els tractaments de Schwarzschild i Epstein, les probabilitats de transició d'Einstein, i la hipòtesi adiabàtica d'Ehrenfest (principi de transformabilitat mecànica). Hi trobem també una primera versió (sense el nom) del principi de Correspondència: en el límit de vibracions lentes (n 's grans) l'espectre quàntic teòric és igual al clàssic. El fa servir per justificar que les probabilitats de transició estan relacionades amb les intensitats, i també per calcular polaritzacions. La nova teoria abarca moviments multiperiòdics. La primera part, finalitzada el novembre de 1917, tracta dels principis generals de la teoria, i la segona, del desembre de 1918, està centrada en l'àtom d'hidrogen. La tercera no es va publicar fins el 1922.

A partir d'aleshores lo que més li interessa a Bohr és justificar la taula periòdica, investigació per la que li donaran el Nobel el 1922: “for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them”.

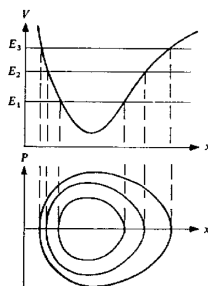


Figura 3.4: Potencial anharmònic. Els estat permesos ja no són el·lipses, com en el cas de Planck.

Cap el 1922 tot sembla anar sobre rodes. Hevesy i Coster descobreixen un nou element predit per Bohr: el Hafni (en honor de Bohr: Hafniae és Copenhagen), Pauli publica un model de la molècula d'hidrogen ionitzada que funciona força bé. Però el problema ve amb l'Heli. Kramers està a Copenhagen des de 1916 (després d'haver fet la tesi amb Ehrenfest). Ha anat fent coses amb l'Heli, però no ho publica fins el 1923: no dona bé. També Van Vleck, als Estats Units, publica els seus càlculs, obtenint coses molt semblants però igualment desquadrades de les mesures. El problema rau en què segons aquests càlculs, que semblen impecables, l'estat normal de l'Heli és inestable, sempre segons la teoria de Bohr. La cosa empitjora quan Heisenberg i Born estudien els estats excitats amb teoria de pertorbacions: les condicions quàntiques no estan bé i la mecànica no val ni als estats estacionaris. A partir d'aquí la mecànica ordinària va perdent presència a la teoria quàntica. Però això ja és una altra història.

Els anys 1923 i 1924 hi ha molts models diferents per explicar l'efecte Zeeman anòmal, que també es convertirà en un problema. Ja es coneixen molts multiplets. Pauli, Heisenberg, Born, i d'altres, s'hi dediquen molt, violen principis, introdueixen nombres semienters, etc. A principis de 1924 s'escampa la idea que la teoria de Bohr-Sommerfeld no funciona. Es pot parlar de crisi perquè les línies espectrals han passat a ser un problema greu, quan originalment era la principal prova de la teoria de Bohr.

3.3.4 Anàlisi

- Aquest experiment posa realment de manifest l'estabilitat atòmica? És un experiment important per què es provoquen col·lisions *controlades*, no com en els espectres, i es mesura el que es reb. Seria el primer experiment de col·lisions on es veu la quantització de l'energia. En els espectres hi ha col·lisions però només es mesura l'emissió.
- Com podem distingir (experimentalment) si hem vist la ionització o una transició entre nivells electrònics? Es podia fer a l'època?
- Per què no es veuen altres transicions en l'experiment de Franck-Hertz? Vegeu [3.6, 3.15, 3.17, 3.47].

- Gearhart explica amb detall com aquest experiment inicialment no es va entendre pels autors com una prova del model de Bohr, ans al contrari [3.13]. De fet, és interessant veure com els propis protagonistes van canviant la interpretació i la versió de la història al llarg dels anys.
- Com s'explica l'estabilitat avui? El problema de l'estabilitat té a veure amb el problema de la identitat dels àtoms: els models planetaris no prohibeixen configuracions intermitjes, però els àtoms sempre són iguals. Entre el ferro i el cobalt, per exemple, no hi ha cap element, cap configuració de transició. És la perfecta identitat que Maxwell veia com a prova de l'existència de la ma d'un Creador: només hi ha certes configuracions eren estables. Per què?

Apèndixs

3.A Models

Tant Bohr com Heisenberg després, com d'altres, es preguntaven si tenia sentit “entendre” un mecanisme si aquest no era mecànic. Això ho havia manifestat clarament Lord Kelvin dient que per ell ‘entendre’ implicava pensar en molles, politges, etc. Molts argumentaven que era una qüestió d'intuïció i sentit comú, o sigui, d'educació. Per alguns, una *educació quàntica* permetria no veure la quàntica com algo tan estrany. Heisenberg mateix comparava la seva actitud amb els observables en la primera versió de la Mecànica Matricial amb el que havia fet Einstein per construir la Relativitat. És realment comparable? Són igualment no visualitzables les dues teories més celebrades de la Física Moderna? I què fem a la Mecànica Estadística? És visualitzable la temperatura en termes mecànica? I l'energia interna U ?

3.B Probabilitats de transició

Podem fer anar el mètode d'Einstein (3.10) per entendre una mica més les diferències entre les lleis de radiació. En el cas de Rayleigh-Jeans el que s'obté és trivial: quan la densitat de radiació és alta podem negligir la probabilitat d'emissió espontània. O sigui:

$$p_m B_n^m = p_n B_m^n \Rightarrow e^{-\beta \epsilon_n} = e^{-\beta \epsilon_m}.$$

Per tant, en aquest límit podem considerar que estem en un continu d'energies, i $\epsilon_n \approx \epsilon_m$. Per obtenir la llei de Wien cal plantejar l'equació d'equilibri sense fer anar l'emissió induïda, doncs estem en una regió amb una densitat de radiació baixa. És a dir:

$$p_m B_n^m e^{-\beta \epsilon_m} \rho = p_n A_m^n e^{-\beta \epsilon_n}.$$

i per tant:

$$\rho = \frac{A_m^n}{B_m^n} e^{\beta(\epsilon_n - \epsilon_m)}. \quad (3.12)$$

Bibliografia

- [3.1] BAILY, C. Early atomic models – from mechanical to quantum (1904-1913). *The European Physical Journal H* 38 (2013), 1–38.
- [3.2] BOHR, N. On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine* 26 (1913), 1–25, 476–502, 857–875.
- [3.3] BOHR, N. On the quantum theory of line spectra. *Det. Kgl. Danske Vidensk. Selsk. Matem.-Fysiske Meddelelser* 4 (1918), 1–36, 103–166.
- [3.4] DARRIGOL, O. *From c-numbers to q-numbers: the classical analogy in the history of quantum theory*. Berkeley: University of California Press, 1992.
- [3.5] DARRIGOL, O. Quantum theory and atomic structure, 1900-1927. In *The Cambridge History of Science. Vol. 5. The modern physical and mathematical sciences.*, M. J. Nye, Ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2003, pp. 331–349.
- [3.6] DAVIS, B., AND GOUCHER, F. Ionization and excitation of radiation by electron impact in mercury vapor and hydrogen. *Physical Review* 10 (1917), 101–115.
- [3.7] EHRENFEST, P. Welche Züge der Lichtquantenhypothese spielen in der Theorie der Wärmestrahlung eine wesentliche Rolle? *Annalen der Physik* 36 (1911), 91–118.
- [3.8] EINSTEIN, A. Zur Quantentheorie der Strahlung. *Deutsche Physikalische Gesellschaft Verhandlungen* 16, 18 (1916), 47–62. Reimprès a *Physikalische Zeitschrift* 18, pp. 121-128. Reimprés a [3.25], pp. 362-370. Versió anglesa a [3.10], pp. 212-216.
- [3.9] EISBERG, R., AND RESNICK, R. *Física Cuántica. Átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*. México: Limusa, 1993.
- [3.10] ENGEL, A. *The collected papers of Albert Einstein. Vol. 6. The Berlin years: writings, 1914-1917. English translation of selected texts*. Princeton: Princeton University Press, 1997. Traducció de textos seleccionats de [3.25].
- [3.11] FRANCK, J., AND HERTZ, G. Über Zusammenstöße zwischen Elektronen und Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung desselben. *Verhandlungen der Deutsche Physikalische Gesellschaft* 16 (1914), 457–467.
- [3.12] FRANCK, J., AND HERTZ, G. On the excitation of the 2536 mercury resonance line by electron collisions. *Verhandlungen der Deutsche Physikalische Gesellschaft* 16 (1914), 512. Traducció anglesa de [3.39], 160-166.
- [3.13] GEARHART, C. A. The Franck-Hertz experiments, 1911-1914. Experimentalists in search of a theory. *Physics in perspective* 16 (2014), 293–343.
- [3.14] GEIGER, H., AND MARSDEN, E. On a diffuse reflection of the α -particles. *Proceedings of the Royal Society A* 82 (1909), 495–500.
- [3.15] GENOLIO, R. Average energy of electrons in a Franck-Hertz tube. *American Journal of Physics* 41 (1973), 288–290.

- [3.16] HAAS, A. E. Über die elektrodynamische Bedeutung des Planckschen Strahlungsgesetzes und über eine neue Bestimmung des elektrischen Elementarquantums und der Dimensionen der Wasserstoffatome. *Sitzungsberichte der kaiserlichen Akademie der Wissenschaften in Wien II*, 1 (1910), 119–144.
- [3.17] HANNE, G. What really happens in the Franck-Hertz experiment with mercury? *American Journal of Physics* 56 (1987), 696–700.
- [3.18] HEILBRON, J. L. The work of H.G. Moseley. *Isis* 57 (1966), 336–364.
- [3.19] HEILBRON, J. L. The scattering of α and β particles and Rutherford's atom. *Archive for History of Exact Sciences* 4 (1968), 247–307.
- [3.20] HEILBRON, J. L. The genesis of the Bohr atom. *Historical Studies in the Physical Sciences* 1, 3 (1969), 211–290.
- [3.21] HEILBRON, J. L. J.J. Thomson and the Bohr atom. *Physics Today* (april 1977), 23–30.
- [3.22] HERMANN, A. *The genesis of quantum theory*. Cambridge: MIT Press, 1971. Versió anglesa de C.W. Nash. Original en alemany de 1969.
- [3.23] HON, G., AND GOLDSTEIN, B. R. Centenary of the Franck-Hertz experiments. *Annalen der Physik* 12 (2013), A179–A183.
- [3.24] HON, G., AND GOLDSTEIN, B. R. J.J. Thomson's plum-pudding atomic model: The making of a scientific myth. *Annalen der Physik* 8/9 (2013), A129–A133.
- [3.25] KOX, A., KLEIN, M. J., AND SCHULMANN, R. *The Collected Papers of Albert Einstein. Vol. 6. The Berlin Years: writings, 1914–1917*. Princeton: Princeton University Press, 1996.
- [3.26] KRAGH, H. Conceptual objections to the Bohr atomic theory – do electrons have a “free will”? *European Physical Journal H* 36 (2011), 327–352.
- [3.27] KRAGH, H. *Niels Bohr and the quantum atom*. Oxford: Oxford University Press, 2012.
- [3.28] MCCORMMACH, R. Henri Poincaré and the quantum theory. *Isis* 58 (1967), 37–55.
- [3.29] MEHRA, J. *The Solvay conferences on physics: aspects of the development of physics since 1911*. Dordrecht: Reidel, 1985.
- [3.30] MOSELEY, H. G. J. The high-frequency spectra of the elements. *Philosophical Magazine* 26 (1913), 1024–1034.
- [3.31] PÉREZ, E., AND PIÉ I VALLS, B. Bohr and Ehrenfest: transformations and correspondences in the early 1920s. *The European Physical Journal H* 41, 2 (2016), 93–136.
- [3.32] RUTHERFORD, E. The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom. *Philosophical Magazine* 21 (1911), 669–688.
- [3.33] RUTHERFORD, E. The structure of the atom. *Philosophical Magazine* 27 (1914), 488–498.

- [3.34] RUTHERFORD, E., AND ROYDS, T. The nature of the α particle from radioactive substances. *Philosophical Magazine* 17 (1909), 281–286.
- [3.35] RUTHERFORD, E., AND SODDY, F. Radioactive change. *Philosophical Magazine* 5 (1903), 576–591.
- [3.36] RYDBERG, J. Recherches sur la constitution des spectres d’émission des éléments chimique. *Den Kungliga Svenska Vetenskapsakademiens Handlingar* 23, 11 (1890), 576–591.
- [3.37] SÁNCHEZ DEL RÍO, C., Ed. *Física Cuántica*. Madrid: Pirámide, 1997. Autors diversos.
- [3.38] SOMMERFELD, A. The fine structure of hydrogen and hydrogen-like lines. *European Physical Journal H* 39 (2014), 179–204. Original alemany aparegut el 1915 a *Sitzungsberichte der mathematisch-physikalischen Klasse der K.B. Akademie der Wissenschaften zu München*, 459–500.
- [3.39] TER HAAR, D. *The old quantum theory*. Oxford: Pergamon Press, 1967.
- [3.40] THOMSON, J. J. On the masses of the ions at low pressures. *Philosophical Magazine* 48 (1899), 547–567.
- [3.41] THOMSON, J. J. *Conduction of electricity through gases*. Cambridge: Cambridge University Press, 1903. Primera edició.
- [3.42] THOMSON, J. J. *Electricity and matter*. New York: Charles Scribner’s Sons, 1904.
- [3.43] THOMSON, J. J. On the structure of the atom: an investigation of the stability and periods of oscillation of a number of corpuscles arranged at equal intervals around the circumference of a circle. *Philosophical Magazine* 7 (1904), 237–265.
- [3.44] THOMSON, J. J. The structure of the atom. *Proceedings of the Royal Institution Friday March 10* (1905).
- [3.45] THOMSON, J. J., Ed. *The corpuscular theory of matter*. New York: Charles Scribner’s Sons, 1907.
- [3.46] THOMSON, J. J. The scattering of rapidly moving electrified particles. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 15 (1910), 465–471.
- [3.47] VAN DER BIJL, H. Theoretical considerations concerning ionization and single-lined spectra. *Physical Review* 10 (1917), 546–556.