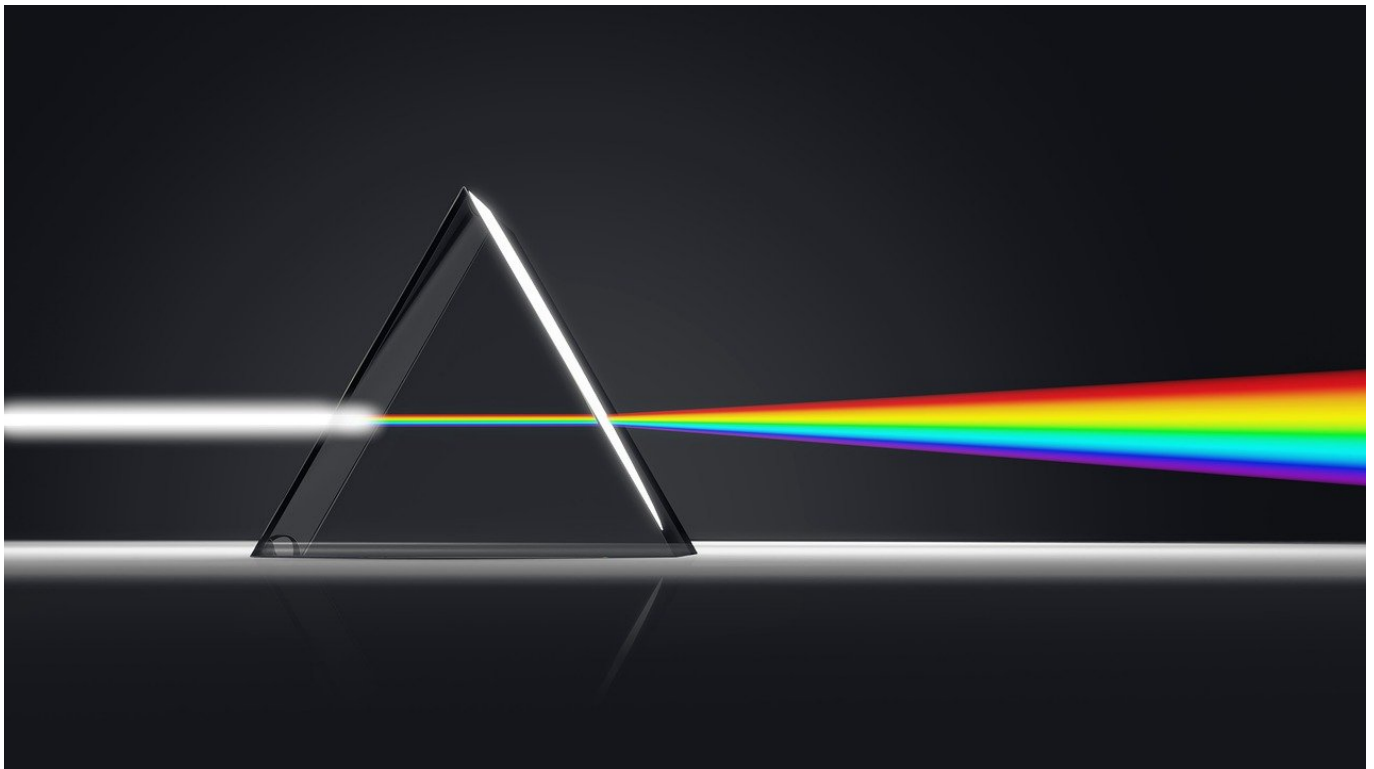


# Spectraallijnen van quantumdeeltjes

Als we in ons alledaagse leven vallende appels of stuiterende tennisballen willen beschrijven gebruiken we, wat natuurkundigen noemen, *klassieke mechanica*. Als we echter inzoomen en kijken hoe deeltjes zich op de schaal van atomen en moleculen gedragen, betreden we de wereld van de *quantummechanica*, die allerlei nieuwe en soms rare eigenschappen kent. In dit artikel zien we een eigenaardige eigenschap die de energie van een quantumdeeltje heeft, en hoe die eigenschap leidt tot de wereld van de *spectroscopie*.



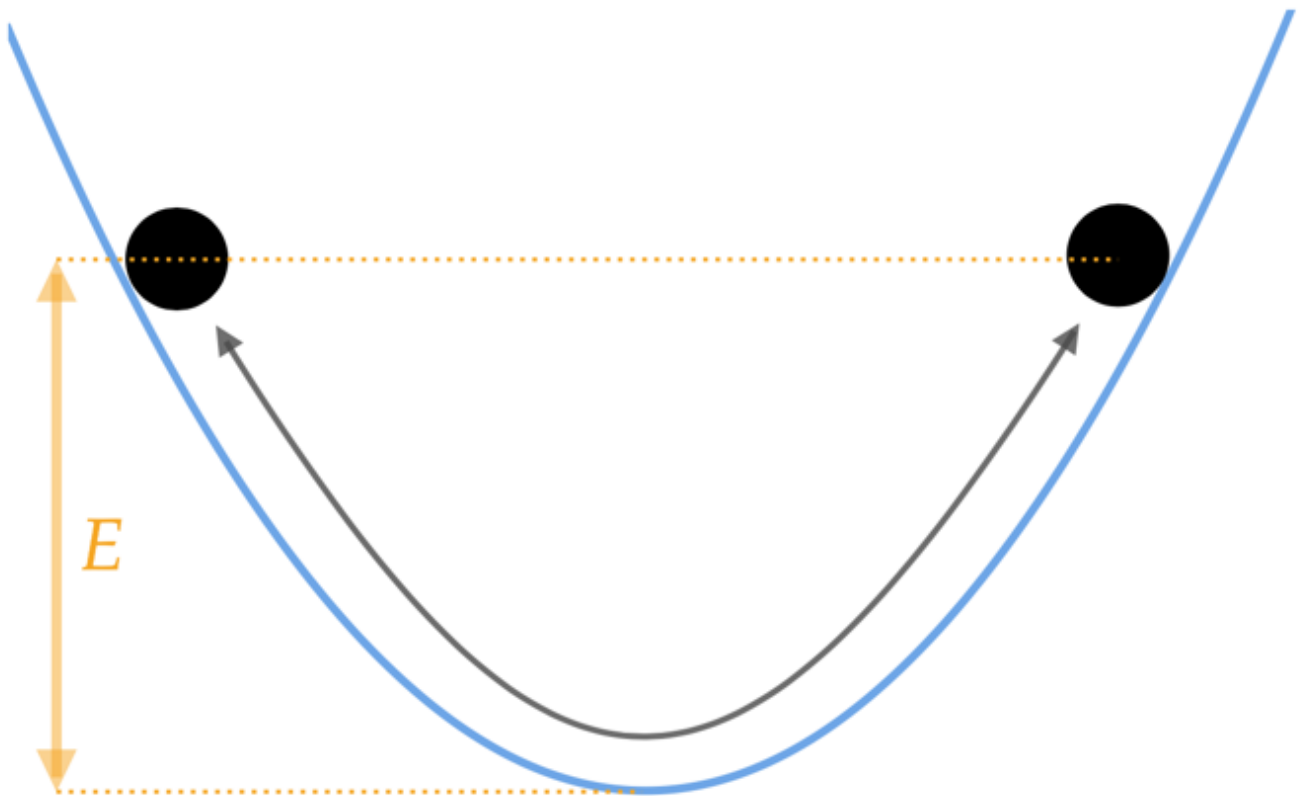
**Afbeelding 1. Een prisma.** Een prisma splitst licht in een spectrum van kleuren. De quantummechanica maakt zo'n spectrum extra interessant. Afbeelding: [BlenderTimer](#).

Op de allerkleinste schaal worden de deeltjes waaruit de natuur om ons heen is opgebouwd beschreven door quantummechanische *golffuncties*. We kunnen zo'n golffunctie interpreteren als een statistische distributie die je vertelt hoe groot de *kans* is dat je het

deeltje op de desbetreffende locatie vindt. Om nog preciezer te zijn: het kwadraat van de golf functie geeft ons de correcte statistische verdeling. Hoe groter deze waarde op een locatie  $x$ , hoe groter de kans dat je het deeltje daar zult vinden. Over golf functies en de bijbehorende kansverdelingen kun je alles lezen in onze [serie artikelen over de quantumfysica](#).

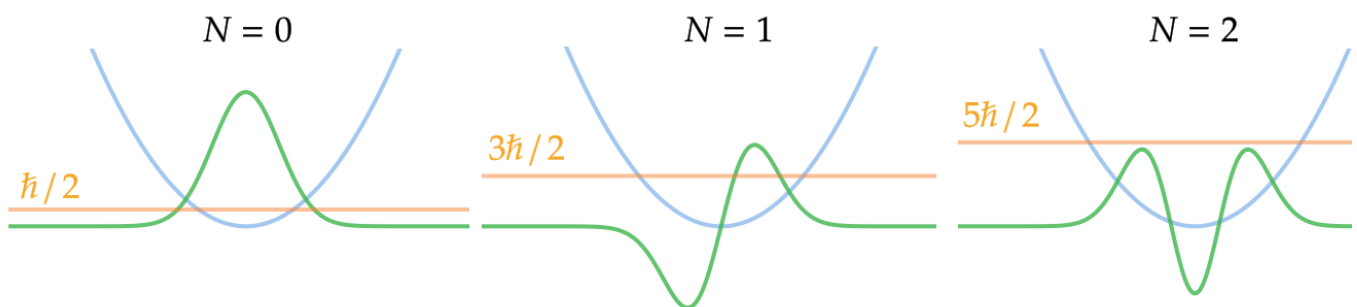
Een andere bijzondere eigenschap van de quantummechanica is dat, als we een deeltje in een begrensde omgeving plaatsen, zijn energie alleen specifieke *discrete* waarden kan hebben. Met 'discrete waarden' bedoelen we dat je de waarden zagezegd kan tellen. Als je bijvoorbeeld het aantal inwoners van Nederland telt, zul je een geheel getal vinden. De verzameling van alle gehele getallen is een voorbeeld van een discrete verzameling. De gemiddelde lengte van alle Nederlanders kan echter ieder getal zijn; van iets simpels zoals 180 cm tot (waarschijnlijker) een ingewikkeld getal met honderd decimalen achter de komma. De verzameling van mogelijke uitkomsten is in dit voorbeeld duidelijk niet discreet. Waarom dit onderscheid belangrijk is zul je aan het einde van dit artikel zien.

Terug naar de natuurkunde. Laten we beginnen met een klassiek voorbeeld. Neem de opstelling van afbeelding 2 en laat aan één zijde op een zekere hoogte een bal los. Als we even ervan uitgaan dat er geen wrijving is, zul je zien dat de bal naar beneden rolt en aan de andere kant weer net zo hoog tot stilstand komt. Daarna rolt de bal weer terug naar zijn startplek, en dit blijft zich zo herhalen. De proefopstelling die je hier ziet, is een goede benadering van wat we een *harmonische oscillator* noemen, omdat de bal in een put zoals deze een harmonische beweging maakt. De hoogte waarop je de bal loslaat kun je zien als de energie die je hem meegeeft. Aangezien je vrij bent om hem van iedere hoogte naar keuze los te laten, kun je de bal dus iedere energie meegeven die je maar wilt.



**Afbeelding 2. Een bal in een vallei.** In dit geval heeft de vallei de vorm van een parabool waardoor de bal een harmonische beweging maakt.

Op de quantummechanische schaal werkt dit allemaal heel anders! We maken een stap naar de allerkleinste schaal, waar we nu te maken hebben met de *quantum*-harmonische oscillator. Een voorbeeld van waar je zo een quantum-mechanische oscillator vindt is in de quantumdot, die we al in een [eerder artikel](#) zagen voorbijkomen. Zoals gezegd worden deeltjes op deze schaal beschreven door golffuncties. Deze golffuncties zijn oplossingen van de beroemde [Schrödingervergelijking](#).



**Afbeelding 3. De drie eerste oplossingen van de quantum-harmonische oscillator.**

De blauwe lijn geeft de potentiaal weer, de groene de golffunctie en de oranje het

energieniveau.

Een mooie bijkomstigheid van deze vergelijking is dat, wanneer je de golffunctie van het deeltje weet, je ook de bijbehorende energie van het deeltje kunt berekenen. Belangrijk hierbij is de vorm van de 'put', in de quantummechanica ook wel de *potentiaal* genoemd. Nu blijkt in het geval van de quantum-harmonische oscillator dat je, als je de Schrödingervergelijking oplost, een reeks oplossingen vindt die we kunnen nummeren met met een getal  $N$ . De eerste drie oplossingen,  $N=0$  tot en met  $N=2$ , zijn getekend in groen in afbeelding 3. Als je deze oplossingen terug in de Schrödingervergelijking stopt kun je ook de bijbehorende energieën van deze golffuncties berekenen. Dit leidt tot de volgende formule:

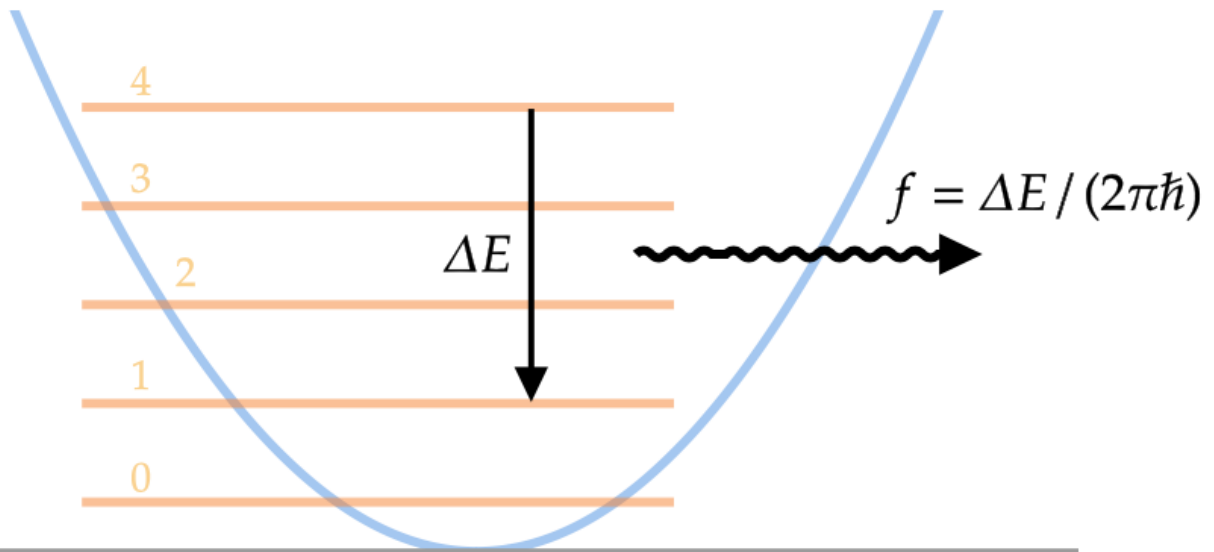
$$( E = \hbar(N+1/2) ).$$

Hierin zien we de beroemde constante van Planck,  $( \hbar )$ , verschijnen - een constante die we in onze serie over quantumfysica ook uitgebreid [hebben besproken](#). Interessant is ook het feit dat we nu een hele *ladder* van energieniveaus krijgen. Dit is interessant om de volgende reden: fysische systemen hebben de neiging naar een zo laag mogelijke energietoestand te gaan. Dit betekent dat, als een systeem zich in een hogere energietoestand bevindt, het graag zijn energie kwijt zou willen. In een klassiek systeem zoals de bal in een put zou de wrijving hiervoor zorgen: de bewegingsenergie van de bal zou langzaam door wrijving omgezet worden in warmte en zo het systeem verlaten. Helaas is dit geen optie voor onze harmonische oscillator, die immers maar uit één quantumdeeltje bestaat en geen interactie zoals wrijving heeft met andere deeltjes. Er is echter een alternatieve optie: we kunnen in sommige gevallen van een hogere naar een lagere energietoestand springen door een *foton* te creëren dat het systeem verlaat. Dit foton moet dan als energie precies het energieverschil tussen de twee toestanden van het trillende deeltje hebben - de totale energie moet immers behouden zijn. Dankzij de volgende bekende formule kunnen we zelfs voorspellen wat de *frequentie*  $f$  van dit foton is:

$$( \Delta E = 2\pi \hbar f ).$$

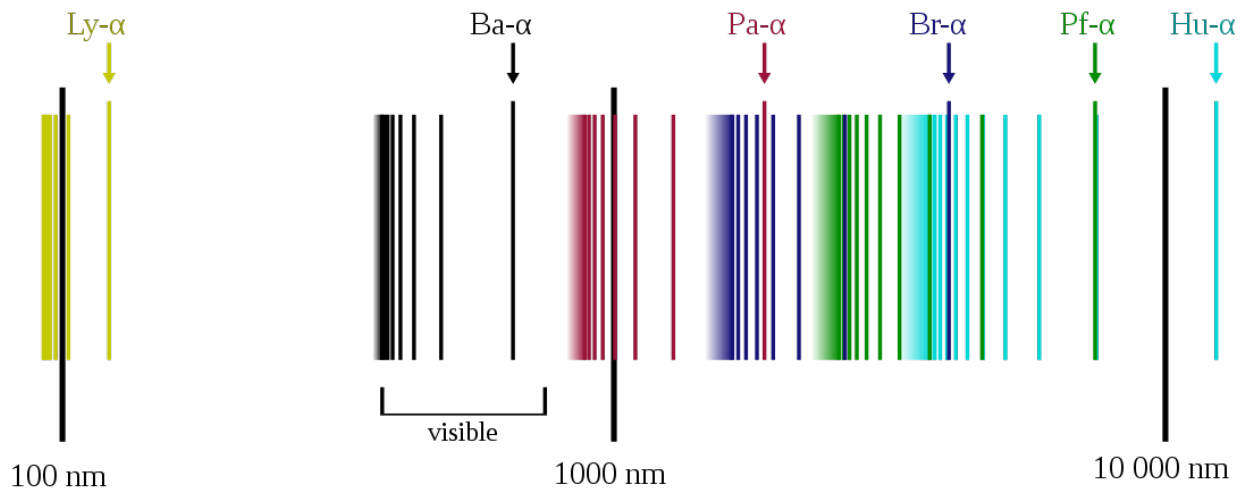
Dit proces kan ook omgekeerd plaatsvinden. Stel dat we met een lamp schijnen op ons systeem, dan kunnen fotonen die precies een frequentie  $( \Delta E / (2\pi \hbar) )$  hebben geabsorbeerd worden door ons systeem, waardoor het in een hogere energietoestand terechtkomt. Daarna is het een kwestie van tijd totdat het systeem weer zakt in energie door

middel van het uitzenden van een foton.



**Afbeelding 4. Een deeltje zakt naar een lagere energietoestand en zendt daarbij een foton uit.** De energie van dit foton is exact het verschil tussen de energieën van de oude en nieuwe energietoestand.

Dit leidt tot een interessante toepassing die we *spectroscopie* noemen: de energieniveaus waarvoor we hierboven de formule zagen, zijn typerend voor de harmonische oscillator en dus zijn de fotonen die het systeem kan absorberen en weer uitstralen ook karakteristiek voor dit systeem. Nu kunnen we ook een ander quantummechanisch model bestuderen, zoals dat van het waterstofatoom. Ook dit model heeft discrete energieniveaus en zijn eigen unieke spectrum dat compleet anders is dan dat van de harmonische oscillator of van andere atomen. In dit geval hebben we een elektron dat tussen de verschillende energietoestanden heen en weer kan springen en daarmee ook een uniek spectrum genereert, dat in de vorm van een lijnenpatroon te zien is in afbeelding 5. De lijnen die je helemaal links ziet geven de *Lyman-reeks* weer, en corresponderen met alle sprongen die elektronen in het waterstofatoom kunnen maken naar de grondtoestand met  $N=0$ .



**Afbeelding 5. De emissielijnen van waterstof.** Voor iedere mogelijk overgang tussen de energietoestanden van een waterstofatoom is er een typerende frequentie van een uitgezonden foton. Bij die frequentie hoort weer een specifieke golflengte (gemeten in nanometers), die hierboven is afgebeeld. Afbeelding: [OrangeDog](#).

Spectroscopie is een enorm groot onderzoeksgebied dat allerlei toepassingen kent. Zo wordt de methode gebruikt om vanaf afstand de atmosfeer van andere planeten zoals Mars te bestuderen, het [dopplereffect van verre sterrenstelsels](#) te meten, maar ook om de structuur van allerlei moleculen hier op aarde in kaart te brengen. Het is indrukwekkend hoe een versimpeld model als de quantum-harmonische oscillator, toch kwalitatief zoveel overeenkomsten heeft met de echte fysische modellen van atomen en moleculen, en ons zoveel kan leren over de wereld om ons heen!