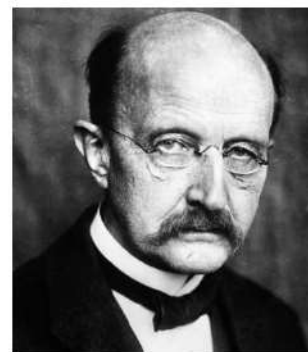


17 Kwantummechanica vwo

17.0 Inleiding

Zwarte stralers en het foto-elektrisch effect

In het hoofdstuk Elektromagnetisch straling zagen we dat **Max Planck** in 1900 het idee lanceert dat licht wordt uitgezonden in kwanta (pakketjes) met een hoeveelheid energie gegeven door $E = h \cdot f$. De frequentie f van het licht vermenigvuldigd met een vast getal h (de constante van Planck) geeft de hoeveelheid energie van een lichtkwantum. In 1905 toont **Albert Einstein** aan dat het idee van Planck een fundamentele eigenschap van elektromagnetische straling is. In de daaropvolgende jaren werken Planck en Einstein hun ideeën verder uit, maar lang worden ze door vrijwel niemand geloofd. Uiteindelijk krijgen ze gelijk en ontvangt Planck in 1918 en Einstein in 1921 de Nobelprijs voor hun eerste stappen op weg naar de kwantummechanica. Om deze weg verder in kaart te brengen gaan we eerst een paar jaar terug om de ontwikkeling van de atoomtheorie te volgen. Uiteindelijk brengt de synthese tussen de atoomtheorie en de licht-theorie van Planck en Einstein de kwantummechanica voort.



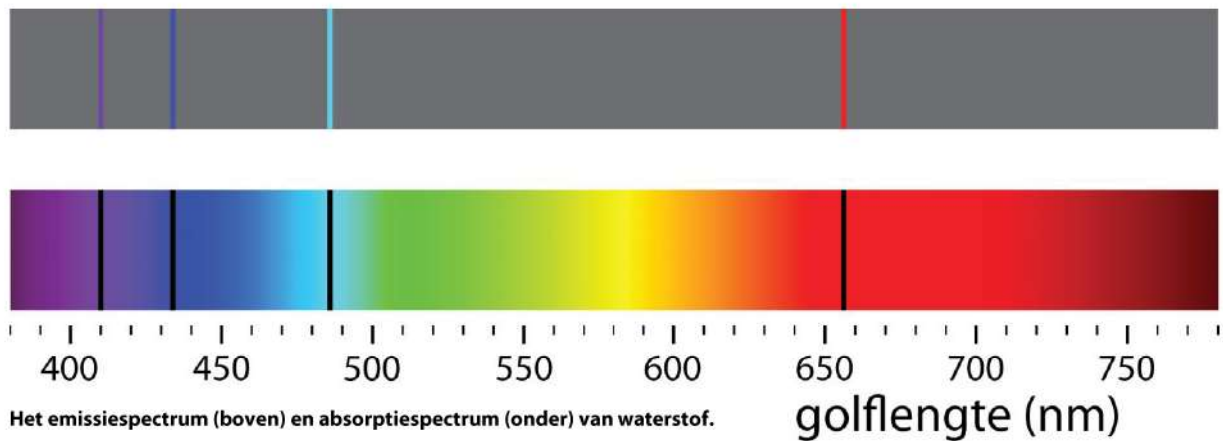
Max Planck



Albert Einstein

Het lijnspectrum van waterstof

In 1863 ontdekt **Anders Jonas Ångström** (1814–1874) dat waterstofgas licht uitzendt dat bestaat uit enkele golflengtes. In de figuur hieronder zie je bovenaan het emissiespectrum dat maar uit enkele lijnen bestaat. Bij alle andere golflengtes wordt geen licht uitgezonden en is het zwart. Daaronder zie je het absorptiespectrum dat ook uit enkele lijnen bestaat. De golflengtes die worden uitgezonden (bovenste spectrum) en worden geabsorbeerd (onderste spectrum) zijn exact gelijk aan elkaar. Ze lijken willekeurig te zijn, maar dat is niet zo. In 1885 vindt **Johann Jakob Balmer** (1825–1898) een formule waarmee je de golflengtes kunt uitrekenen. Zijn formule is niet gebaseerd op een natuurkundige theorie maar geeft alleen het wiskundige verband dat hij uit waarnemingen weet af te leiden. Met de formule van Balmer kunnen de golflengtes van de zichtbare emissielijnen worden berekend, maar waterstof zendt ook licht uit in het infrarode en in het ultraviolette gebied. Om ook de onzichtbare spectrale lijnen uit te kunnen rekenen stelt **Johannes Rydberg** (1854–1919) in 1888 een verbeterde formule op. Ook deze formule is niet gebaseerd op een natuurkundige theorie. Zowel Balmer als Rydberg hebben geen idee waarom hun formules werken. Dat is niet zo vreemd, want daarvoor is kennis nodig van de bouw van een atoom, en deze kennis is in hun tijd nog niet beschikbaar.



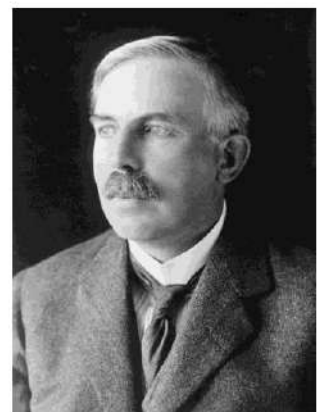
De bouw van een atoom

Joseph John Thomson (1856–1940) doet onderzoek naar de straling die een gloeidraad in vacuüm uitzendt als je er een negatieve spanning op aanbrengt. Deze straling wordt kathode straling genoemd. In 1897 ontdekt hij dat deze straling bestaat uit kleine geladen deeltjes waaraan later de naam **elektronen** wordt gegeven. In 1904 stelt hij voor dat het atoom eruitziet als een positief geladen bol waarin zich kleine negatief geladen elektronen bevinden. Zijn atoommodel lijkt op een plumpudding en wordt daarom het **plumpuddingmodel** genoemd. In Nederland denken we eerder aan een krentenbol.



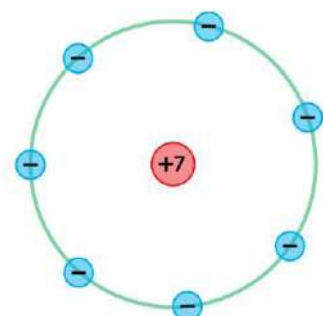
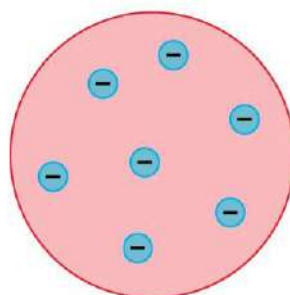
Joseph J. Thomson

Ongeveer tegelijk met Thomson onderzoekt **Ernest Rutherford** (1871–1937) het radioactief verval van atoomkernen. In 1899 ontdekt hij de alfa- en bètastraling en in 1903 de gammastraling. Hiervoor ontvangt hij in 1908 de Nobelprijs voor scheikunde. Na zijn Nobelprijs gaat hij onderzoek doen aan de bouw van het atoom. In zijn beroemde goudfolie-experiment beschiet hij goudfolie met alfadeeltjes. Hij vindt dat een alfadeeltje niet altijd door het folie schiet maar soms wordt teruggekaatst. Hij beredeneert dat dit alleen mogelijk is als het atoom een kleine compacte kern heeft. In 1911 formuleert hij zijn atoommodel waarin het atoom een elektrisch geladen kern heeft die vrijwel alle massa bevat. Om deze kern cirkelen de vrijwel massaloze elektronen met tegengestelde lading. Het atoommodel van Rutherford lijkt op een miniatuur planetenstelsel.



Ernest Rutherford

Links, het atoommodel van Thomson (plumpudding). Rechts, het model van Rutherford.



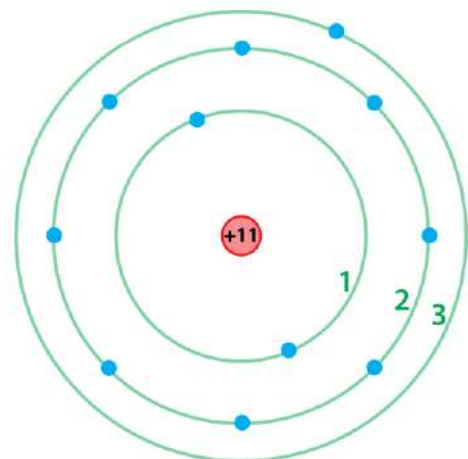
Een theoretisch bezwaar tegen het atoommodel van Rutherford is dat negatief geladen elektronen die om de positief geladen atoomkern cirkelen volgens de wetten van Maxwell elektromagnetische straling uitzenden, waardoor ze energie verliezen en uiteindelijk op de kern vallen. Maar in de praktijk gebeurt dit niet, want een atoom is immers stabiel. Om dit te onderzoeken nodigt Rutherford in 1911 de nog jonge Niels Bohr (1885–1962) uit om aan dit probleem te werken. In 1913 publiceert Bohr drie artikelen waarin hij het atoommodel van Rutherford combineert met het idee van Planck en Einstein dat licht uit deeltjes (fotonen) bestaat.



Niels Bohr

Uit het atoommodel van Bohr volgt dat de elektronen op specifieke afstanden van de atoomkern staan. Niet alle afstanden zijn mogelijk. De elektronen bevinden zich in **schillen** om de atoomkern. Elektronen in een bepaalde schil hebben dezelfde energie. Neemt het atoom één foton op, dan springt het elektron naar een schil op grotere afstand van de kern. Bij een sprong naar een lagere schil zendt het atoom één foton uit. Als het elektron in de laagst mogelijke schil zit heeft het een afstand van gemiddeld $5,29 \cdot 10^{-11}$ meter. Deze afstand staat nu bekend als de Bohrstraal en kun je opvatten als de gemiddelde straal van het waterstofatoom. Het voorvoegsel "gemiddeld" staat er niet voor niets, want zoals we later zullen zien hebben elektronen geen vaste baan. Maar dat wist Bohr in 1913 nog niet.

De atoomtheorie van Bohr uit 1913 staat nu bekend als de **Oude Kwantumtheorie**. De atoomtheorie van Bohr heeft de ontwikkeling van de kwantumtheorie versneld, maar het zal nog meer dan tien jaar duren voordat de kwantumtheorie in 1926, met de komst van de Schrödingervergelijking, de natuurkunde voorgoed zal veranderen.



Het atoommodel van Bohr.

Inhoud

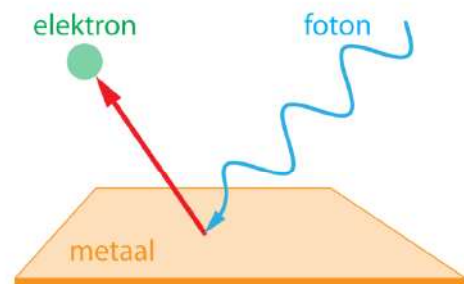
17.1	Het foto-elektrisch effect	6
–	Het foto-elektrisch effect	6
–	Fotostroom opwekken in een fotocel	6
–	(I, U)-karakteristiek van een fotocel	7
–	Wet van behoud van energie toegepast op een fotocel	8
–	De elektronvolt als eenheid van energie	9
17.2	Deeltjes of golven	11
–	Kwantummechanica begrijpen?	11
–	Dubbelspleet experiment met kogels	11
–	Dubbelspleet experiment met watergolven	12
–	Dubbelspleet experiment met elektronen	13
–	Kijken naar elektronen	15
–	Superpositie	18
–	Wel of geen interferentie	19
–	De kat van Schrödinger	20
17.3	Onbepaaldheid	21
–	Enkelspleet experiment met fotonen	23
–	Materiegolven	24
–	Transmissie Elektronen Microscoop (TEM)	24
–	Experiment met kogels nader bekeken	25
–	Een kwantumdeeltje heeft geen baan	25
–	Een kwantumdeeltje heeft geen identiteit	26
–	De kans om een kwantumdeeltje aan te treffen	26
–	Kwantummechanica versus klassieke mechanica	27
17.4	De Schrödingervergelijking	28
–	De golffunctie	28
–	De Schrödingervergelijking	29
17.5	Kwantumdeeltje in een energieput	30
–	Kwantumdeeltje in een oneindig diepe energieput	30
–	Energie opnemen en afstaan	31
–	De golffunctie van een deeltje in een oneindig diepe energieput	32
–	De afmeting van de put en de massa van het deeltje	33
17.6	Harmonische oscillator	34
–	Harmonische oscillator	34
–	Golffuncties van een harmonische oscillator	35
–	Nulpuntsenergie	35
–	Energie opnemen en afstaan	36

17.7	Het waterstofatoom	37
–	Het waterstofatoom	37
–	De energie van het waterstofatoom	37
–	Energie opnemen en afstaan	39
–	Golffuncties van het waterstofatoom	40
17.8	Spin	42
–	De spin van het elektron	42
–	Het uitsluitingsprincipe	43
17.9	Moleculen en vaste stoffen	44
–	Chemische binding	44
–	Energiebanden	45
–	Elektrische geleiders, halfgeleiders en isolators	46
–	Halfgeleiders	46
17.10	Tunnelen	50
–	Kwantumdeeltje in een energieput	50
–	Scanning Tunneling Microscoop (STM)	50
–	Golffuncties in een energieput	51
–	Tunnelen tussen twee energieputten	52
–	Tunnelen door een energiebarrière	52
–	Exponentiële demping van de golffunctie	52
17.11	Samenvatting	54
–	Grootheden en eenheden	54
–	Weten	54
–	Formules	56
–	Figuren	57

17.1 Het foto-elektrisch effect

Het foto-elektrisch effect

In 1887 ontdekt Heinrich Hertz het **foto-elektrische effect**. Als je licht laat vallen op een metaal kunnen er elektronen worden losgeschoten. Vang je deze elektronen op en laat je ze door een elektrisch circuit gaan, dan ontstaat er elektrische stroom, een **foto-stroom**. In een moderne zonnecel gebeurt hetzelfde.

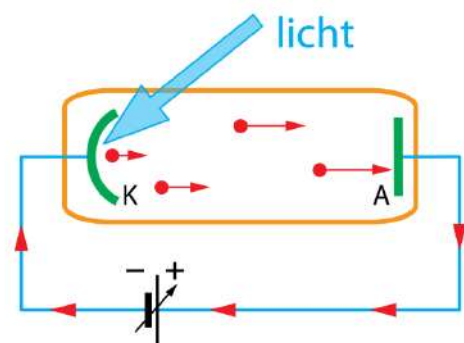


Figuur 1 Foto-elektrisch effect.

Het foto-elektrisch effect gebeurt niet bij ieder soort licht. Alleen als de golflengte klein genoeg is treedt het op. Er is een grenswaarde van de golflengte. Is de golflengte kleiner dan de grenswaarde dan gebeurt het en anders niet. Als licht een elektromagnetische golf is, is dit niet te begrijpen want dan zou je het bij iedere golflengte moeten zien. Misschien niet bij iedere golflengte evenveel, maar een scherpe grenswaarde kan niet. Toch is dit wel het geval en het foto-elektrisch effect kan dus niet verklaard worden met de elektromagnetische theorie van licht. Een nieuwe theorie is nodig en dit brengt ons uiteindelijk de kwantummechanica.

Fotostroom opwekken in een fotocel

Een fotocel bestaat uit een vacuümbuis met twee elektrodes en een regelbare spanningsbron. Zie figuur 2. De elektrode die je belicht sluit je aan op de minpool en heet de **fotokathode**. De elektrode die de elektronen opvangt sluit je aan op de pluspool en heet de **anode**. De spanning tussen de kathode en de anode zorgt ervoor dat de vrijgemaakte elektronen door de kathode worden afgestoten en door de anode worden aangetrokken. Vacuüm is nodig om te voorkomen dat de elektronen onderweg tegen gasmoleculen botsen.



Figuur 2 Aangesloten fotocel waarbij de fotokathode wordt belicht.

Bij een fotokathode gemaakt van natrium zie je het volgende:

- Er gaat geen stroom lopen als $\lambda > 544 \text{ nm}$ ook al is het licht intens.
- Er gaat wel stroom lopen als $\lambda < 544 \text{ nm}$ ook al is het licht zwak.
- Voor licht met $\lambda < 544 \text{ nm}$ neemt de fotostroom recht evenredig toe met de intensiteit.

De verklaring voor het foto-elektrische effect is in 1905 door Albert Einstein gegeven, waaraan hij zijn Nobelprijs te danken heeft. Hij stelt dat:

- 1) Licht bestaat uit energiepakketjes, fotonen genaamd.
- 2) Een elektron kan per keer maar één foton opnemen, ook al is het licht intens.

- 3) Om een elektron uit een metaal te verwijderen is een minimum aan energie nodig.
- 4) Is de fotonenergie kleiner dan dit minimum, dan wordt er geen enkel elektron uit het metaal verwijderd, hoe intens het licht ook is.
- 5) Is de fotonenergie groter dan dit minimum dan wordt een deel van de energie gebruikt om het elektron los te maken en de rest om het snelheid te geven.

Het minimum aan energie is de **uittree-energie** E_{uit} en omdat $E_{\text{foton}} = h \cdot f$ is er ook een **grensfrequentie** f_{grens} en een **grensgolflengte** λ_{grens} . Er geldt: $E_{\text{uit}} = h \cdot f_{\text{grens}} = h \cdot c / \lambda_{\text{grens}}$.

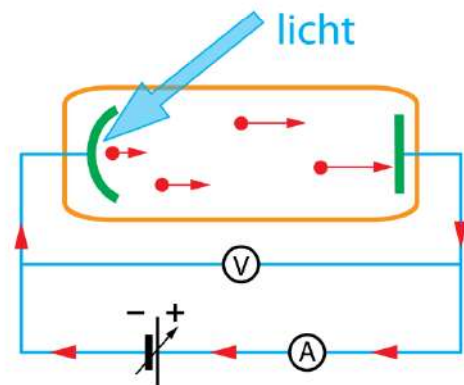
uittree-energie	E_{uit}	energie om een elektron vrij te maken uit het metaal
grensfrequentie	f_{grens}	minimale frequentie om een elektron vrij te maken
grensgolflengte	λ_{grens}	maximale golflengte om een elektron vrij te maken

De **uittree-energie** is niet gelijk aan de **ionisatie-energie** van een atoom. Het vrijmaken van een elektron uit een metaal kost minder energie dan het losmaken van een elektron bij een atoom. Zo is de uittree-energie van natrium metaal 2,28 eV terwijl de ionisatie-energie van een natriumatoom 5,14 eV is. Dit verschil wordt veroorzaakt door de binding van een atoom met de omliggende atomen, die wel aanwezig zijn in een metaal maar niet bij losse atomen.

(I, U)- karakteristiek van een fotocel

Om een fotocel te onderzoeken gaan we de spanning en de stroomsterkte meten. Zie figuur 3. We gebruiken licht met één frequentie, waarvan de fotonenergie groter is dan de uittree-energie van het kathodemateriaal. Er gaat nu een fotostroom lopen. Door de spanning te veranderen verandert ook de stroomsterkte en als we de fotostroom uitzetten tegen de spanning krijg je de (I_{foto}, U) -karakteristiek van de fotocel.

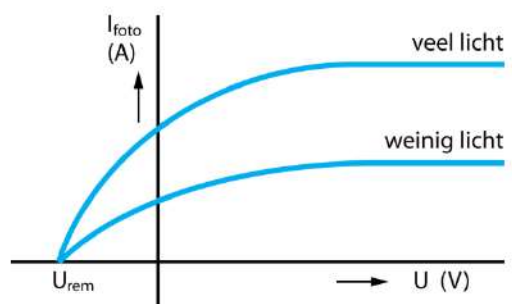
Zie figuur 4.



Figuur 3 Fotocel in een elektrisch circuit.

Bij een positieve spanning worden de vrijgemaakte elektronen versneld en bij een negatieve spanning vertraagd. Figuur 4 is de (I_{foto}, U) -karakteristiek met op de horizontale as de spanning en op de verticale as de fotostroom. We zien het volgende:

- 1) Als de spanning een grote waarde heeft is de stroomsterkte constant.
- 2) Bij een lagere positieve spanning neemt de stroomsterkte toe.
- 3) Als de spanning negatief is wordt de stroomsterkte steeds kleiner.
- 4) Bij een bepaalde negatieve spanning is de stroomsterkte nul.
- 5) De lichtintensiteit beïnvloedt de stroomsterkte maar NIET de spanning waarbij $I_{\text{foto}} = 0$.



Figuur 4 (I, U) -karakteristiek.

Deze eigenschappen worden verklaard door:

- 1) Bij een grote positieve spanning komen alle vrijgemaakte elektronen aan.
- 2) Bij een lagere spanning komt maar een deel van de vrijgemaakte elektronen aan.
- 3) Bij een negatieve spanning worden de vrijgemaakte elektronen afgeremd zodat er nog maar weinig aankomen.
- 4) Er is een spanning U_{rem} waarbij de elektronen worden afgeremd tot stilstand.
- 5) De lichtintensiteit heeft alleen invloed op hoeveel elektronen er per seconde worden vrijgemaakt maar NIET op de energie die een elektron opneemt.

Wet van behoud van energie toegepast op een fotocel

De fotonenergie wordt gebruikt om:

- 1) Eén elektron uit het metaalrooster te verwijderen.
- 2) De resterende energie als kinetische energie mee te geven.

$$E_{\text{foton}} = E_{\text{uit}} + E_K$$

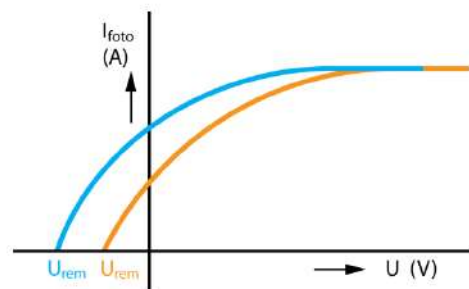
- E_{foton} is de energie van de fotonen in joule (J)
- E_{uit} is de uittree-energie van het materiaal in joule (J)
- E_K is de kinetische energie van de uitgetreden elektronen in joule (J)

In het hoofdstuk elektromagnetisme zijn we de elektronenversneller tegengekomen. Daarin wordt een spanning aangelegd om elektronen te versnellen, waarbij elektrische energie wordt omgezet in kinetische energie. Er geldt: $\Delta E_K = -\Delta E_{\text{el}}$ met $\Delta E_{\text{el}} = q \cdot U$ vinden we $q \cdot U = -\Delta E_K$. In een fotocel gaan we geen elektronen versnellen maar juist afremmen. Kinetische energie wordt nu omgezet in elektrische energie. Omdat we de elektronen afremmen tot stilstand kunnen we schrijven $E_K = q \cdot U_{\text{rem}}$, waarbij U_{rem} de spanning is waarbij de elektronen tot stilstand komen. In bovenstaande formule mogen we E_K vervangen door $q \cdot U_{\text{rem}}$ en we krijgen dan:

$$E_{\text{foton}} = E_{\text{uit}} + q \cdot U_{\text{rem}}$$

- q is lading van een elektron: $q = -1,60218 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- U_{rem} is de remspanning in volt (V) U_{rem} heeft een negatieve waarde

Om meer te weten te komen onderzoeken we welke invloed de fotonenergie heeft. We weten al dat er een minimale energie nodig is maar wat verandert er als we fotonen gebruiken met genoeg energie? We passen de fotonenergie aan, en we zorgen daarbij dat het aantal fotonen per seconde hetzelfde blijft. Als fotonen meer energie hebben krijgen de elektronen meer kinetische energie. Het kost dan dus meer spanning om de elektronen tot stilstand te brengen. In figuur 5 zie je (I, U) -grafieken voor fotonen met veel energie (blauw) en fotonen met minder energie (oranje).



Figuur 5 (I, U) -diagram van een fotocel bestraald met blauw en met oranje licht.

De elektronvolt als eenheid van energie

Bij berekeningen aan het foto-elektrisch effect is de elektronvoltschaal erg handig. Eén elektronvolt eV is de kinetische energie die een deeltje met lading e (het elementair ladingsquantum) krijgt als het met één volt wordt versneld. De lading van een elektron is $-e$ en een elektron dat wordt versneld met -1 V krijgt een energie van 1 eV. Het omgekeerde geldt ook: met -1 V wordt een elektron met 1 eV energie tot stilstand gebracht. Het omrekenen van joule naar eV gaat als volgt:

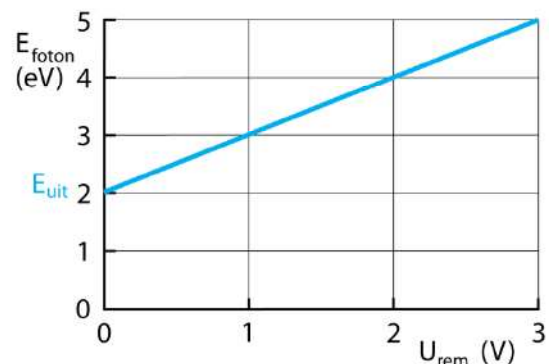
$$1 \text{ eV} = 1,60218 \cdot 10^{-19} \text{ J} \rightarrow \frac{\text{energie in joule}}{1,60218 \cdot 10^{-19}} = \text{energie in eV}$$

We kunnen de formule $E_{\text{foton}} = E_{\text{uit}} + q \cdot U_{\text{rem}}$ delen door $e = 1,60218 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ en vinden dan:

$$E_{\text{foton}} (\text{eV}) = E_{\text{uit}} (\text{eV}) - U_{\text{rem}}$$

MERK OP $q_{\text{elektron}} = -e$, E_{foton} (eV) en E_{uit} (eV) zijn positief, U_{rem} is negatief zodat $-U_{\text{rem}}$ ook positief is.

E_{uit} is een eigenschap van het metaal en niet afhankelijk van de fotonenergie. Uit een diagram met op de horizontale as U_{rem} en op de verticale as E_{foton} kun je E_{uit} bepalen. Zie figuur 6. De fotonenergie waarbij de remspanning nul is, is gelijk aan de uittree-energie, in dit geval 2,0 eV.



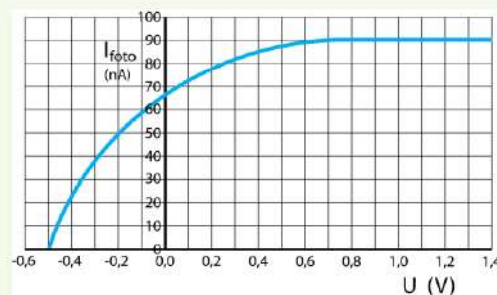
Figuur 6 Fotonenergie als functie van de remspanning.

VOORBEELD Fotocel

Een fotocel heeft een kathode gemaakt van calcium (Ca). Het (I, U) -diagram is gegeven in figuur 7.

Bereken de energie van het licht waarmee de kathode wordt bestraald.

- opzoeken $E_{\text{uit}} = 3,20 \text{ eV}$
- aflezen $U_{\text{rem}} = -0,50 \text{ V}$
- $E_{\text{foton}} = E_{\text{uit}} + q \cdot U_{\text{rem}} \rightarrow E_{\text{foton}} (\text{eV}) = E_{\text{uit}} (\text{eV}) - U_{\text{rem}}$
- $E_{\text{foton}} (\text{eV}) = 3,2 - (-0,5) = 3,7 \text{ eV}$



Figuur 7

Bereken de golflengte van dit licht.

- $3,70 \text{ eV} = 3,70 \cdot 1,6022 \cdot 10^{-19} = 5,928 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
- $E_{\text{foton}} = h \cdot f = h \cdot \frac{c}{\lambda}$ met $h = 6,62607 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ en $c = 2,99792 \text{ m/s}$
- $5,928 \cdot 10^{-19} = 6,6261 \cdot 10^{-34} \cdot \frac{2,9979 \cdot 10^8}{\lambda} \rightarrow \lambda = 3,35 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 335 \text{ nm}$

Vervolgens bestralen we de fotocel met 365 nm licht en evenveel fotonen per seconde.

Bereken de remspanning.

- $E_{\text{foton}} = h \cdot \frac{c}{\lambda} \rightarrow E_{\text{foton}} = 6,62607 \cdot 10^{-34} \cdot \frac{2,99792 \cdot 10^8}{3,65 \cdot 10^{-7}} \rightarrow E_{\text{foton}} = 5,44231 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
- $E_{\text{foton}} (\text{eV}) = \frac{5,44231 \cdot 10^{-19}}{1,60218 \cdot 10^{-19}} = 3,39681 = 3,40 \text{ eV}$
- $E_{\text{foton}} (\text{eV}) = E_{\text{uit}} (\text{eV}) - U_{\text{rem}} \rightarrow 3,40 = 3,20 - U_{\text{rem}} \rightarrow U_{\text{rem}} = -0,20 \text{ V}$

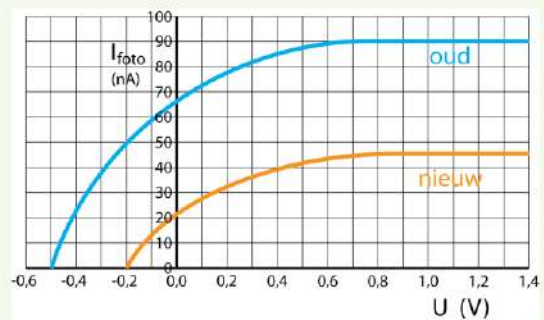
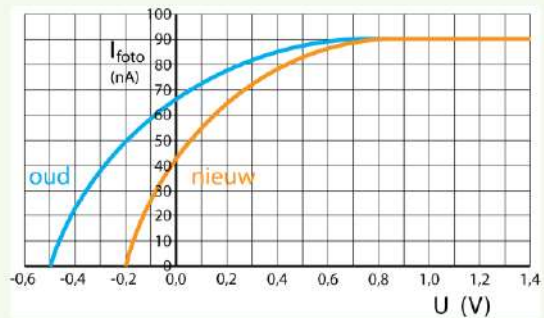
Schets de nieuwe (I, U)-grafiek van de fotocel.

- U_{rem} was $-0,5 \text{ V}$ en wordt $-0,20 \text{ V}$
- de maximale fotostroom blijft gelijk

Vervolgens halveren we het aantal fotonen per seconde.

Schets de nieuwe (I, U)-grafiek van de fotocel.

- de maximale fotostroom halveert van $90 \mu\text{A}$ naar $45 \mu\text{A}$
- de remspanning verandert niet



17.2 Deeltjes of golven

Kwantummechanica begrijpen?

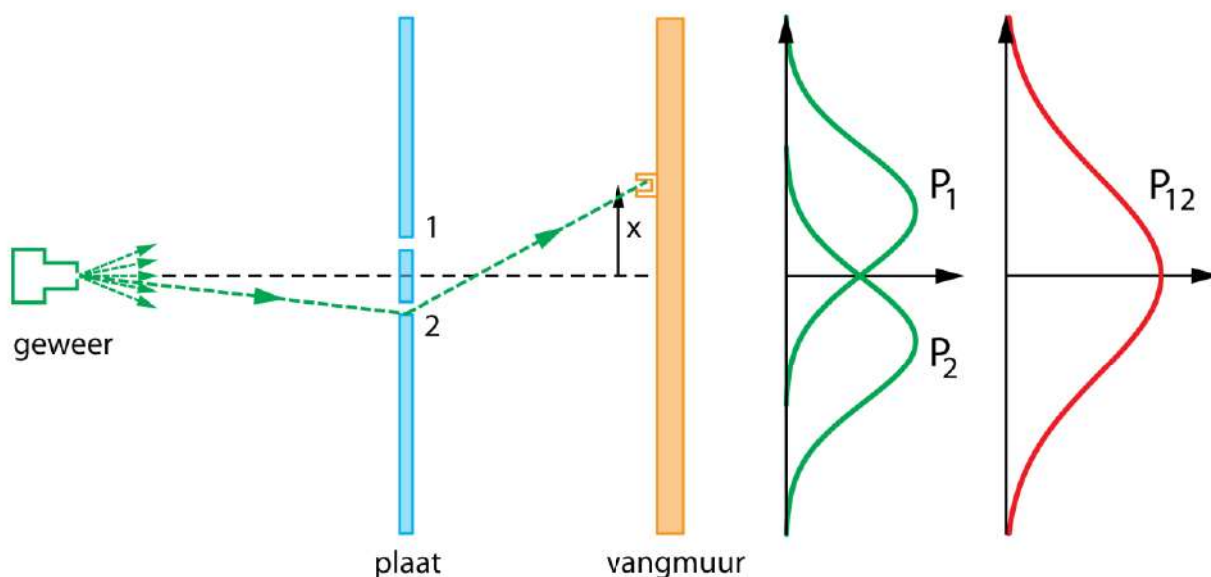
Kwantumdeeltjes zijn deeltjes met geen of weinig massa, zoals fotonen, elektronen, protonen, neutronen, atomen en moleculen. Om het gedrag kwantumdeeltjes te beschrijven heb je kwantummechanica nodig. Voorwerpen met veel massa kun je ook beschrijven met kwantummechanica, maar meestal is dat niet nodigen en voldoet de klassieke mechanica, omdat voor alledaagse voorwerpen kwantumeffecten onwaarneembaar klein zijn.

Kwantumdeeltjes gedragen zich anders dan alles wat je ooit hebt meegemaakt. Om dit te demonstreren bekijken we het in 1801 door **Thomas Young** (1773–1829) uitgevoerde **dubbelspleet experiment**. Hij deed dit experiment met licht, maar nu gaan we het met kwantumdeeltjes uitvoeren. Daaruit blijkt dat het gedrag van kwantumdeeltjes bizar is. Omdat je nooit met kwantumeffecten in aanraking bent gekomen, kunnen je hersenen het niet begrijpen. Begrijpen betekent immers teruggrijpen op eerdere ervaringen, en met kwantumeffecten kan dat niet. Als je kwantummechanica niet begrijpt is dat niet erg, want niemand begrijpt kwantummechanica. Iemand die het tegendeel beweert heeft er duidelijk geen verstand van.

In deze paragraaf volgen we de introductie van **Richard Feynman** (1918–1988) in zijn legendarische boekenreeks: *Feynman Lectures on Physics*. Deze boekenreeks is gebaseerd op de colleges die hij begin jaren zestig van de vorige eeuw aan het California Institute of Technology heeft gegeven. In 1965 krijgt Feynman de Nobelprijs voor de natuurkunde, vanwege zijn fundamentele bijdrage aan de kwantumelektrodynamica.

Dubbelspleet experiment met kogels

Om te onderzoeken hoe kwantumdeeltjes zich gedragen gaan we in gedachte het dubbelspleet experiment van Young uitvoeren met verschillende bronnen. Als eerste bron nemen we een machinegeweer waaruit kogels worden afgevuurd op een stalen plaat, voorzien van twee spleten die net groot genoeg zijn om een kogel door te laten. De richting waarmee de kogels worden weggeschoten heeft een kleine spreiding, zie figuur 8. Achter de plaat bevindt zich een vangmuur, zoals een dikke houten wand, die de inkomende kogels absorbeert. Vlak voor deze muur bevindt zich een kogeldetector. Dit kan een doosje zijn met zand waarin de kogels worden opgevangen. Als we willen kunnen we het doosje openen om het aantal gevangen kogels te tellen. De detector kan worden verschoven in een richting die we de x -richting zullen noemen. Met deze opstelling kunnen we de vraag beantwoorden: "Hoe groot is de kans dat een kogel die door een spleet in de stalen plaat is gegaan aankomt bij de kogeldetector op een afstand x vanaf het centrum?" Je moet je realiseren dat we over de **kans** moeten praten, omdat we niet exact weten waar een specifieke kogel terechtkomt. Een kogel kan tegen de zijkant van een spleet kaatsen en alle kanten opvliegen. Om de kans te bepalen laten we het machinegeweer een poosje vuren. Daarna tellen we het aantal kogels dat is opgevangen in de detector en delen dit getal door het aantal door de vangmuur geabsorbeerde kogels.

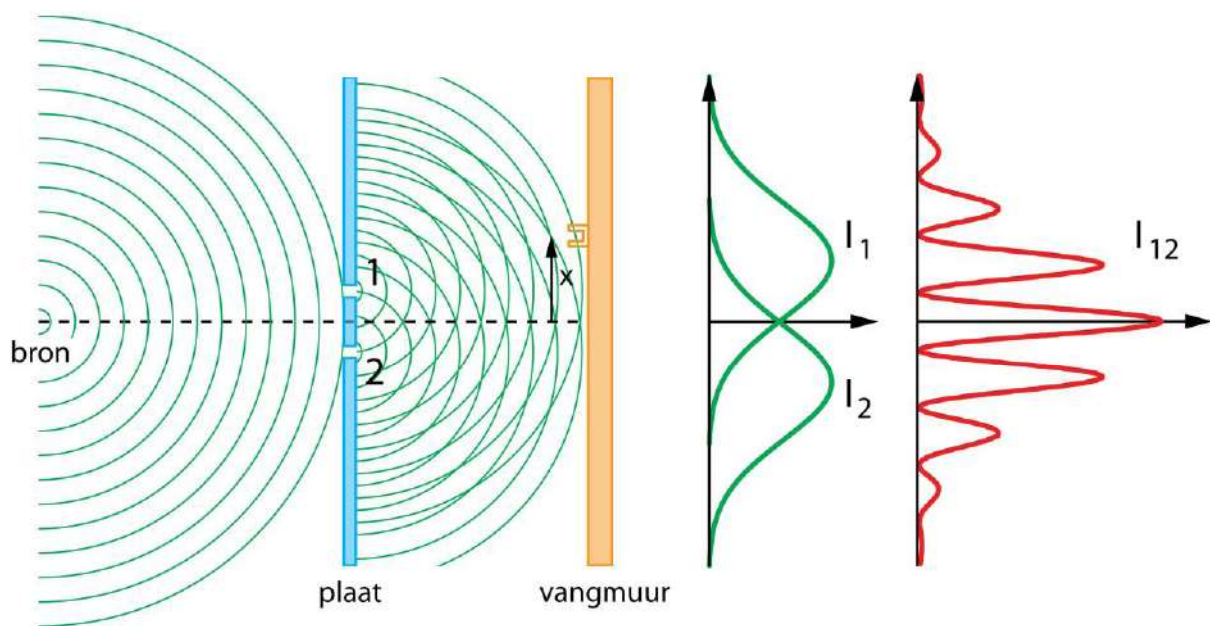


Figuur 8 Dubbelspleet experiment met kogels.

In ons gedachte-experiment gaan we ervan uit dat de kogels **onverwoestbaar** zijn, ze breken niet doormidden. Wat we waarnemen is dat de kogels in hun geheel arriveren. Als we iets in onze detector vinden is dat altijd een geheel aantal kogels. Laten we het machinegeweer met lage frequentie schieten, dan vinden we dat op ieder moment of helemaal geen of precies één hele kogel aankomt bij de kogelvanger. De frequentie waarmee het machinegeweer vuurt heeft geen invloed op de grootte van de kogels. Het resultaat van dit experiment zie je helemaal rechts in figuur 8, rode curve. Daar zie je een diagram met de kans op de horizontale as en de afstand x op de verticale as. De kans noemen we P_{12} . P staat voor probability (Engels, waarschijnlijkheid) en met subscript 12 geven we aan dat de kogel zowel door spleet 1 als door spleet 2 kan zijn gegaan. Je ziet dat P_{12} groot is in het midden bij $x = 0$ en klein wordt bij een grote waarde van x . Om dit te begrijpen herhalen we het experiment nadat we spleet 2 hebben dichtgemaakt. De kogels kunnen nu alleen nog door spleet 1 en we vinden de curve P_1 (groen) in figuur 8. Zoals je verwacht ligt het maximum van P_1 bij de waarde van x die op een rechte lijn ligt met spleet 1 en het geweer. Met spleet 1 gesloten en spleet 2 open vinden we curve P_2 (groen). P_2 is de kansverdeling voor kogels die door spleet 2 zijn gegaan. Vergelijken we de groene en de rode curven van figuur 8 dan vinden we het belangrijke resultaat: $P_{12} = P_1 + P_2$. De kansen tellen gewoon bij elkaar op. Het resultaat met beide spleten open is simpelweg de som van de resultaten met ieder spleet afzonderlijk open. We geven dit resultaat aan als **geen interferentie**.

Dubbelspleet experiment met watergolven

We gaan nu hetzelfde experiment herhalen met water. In figuur 9 zie je de opstelling met een trillingsbron die watergolven opwekt. Voor de bron bevindt zich een plaatje met twee spleten en daarachter een vangmuur, die ervoor zorgt dat de golven niet worden teruggekaatst. Voor de vangmuur is weer een detector geplaatst. De detector is nu een apparaat waarmee de **intensiteit** van de golfbeweging wordt gemeten. Dit kan bijvoorbeeld een apparaat zijn dat de amplitude van een bewegende dobber meet en waarvan de schaal evenredig is met het **kwadraat van de amplitude**. De detector meet dus de **energie** die door de golf wordt aangevoerd.



Figuur 9 Dubbelspleet experiment met watergolven.

Wat we zien is dat de intensiteit ieder willekeurige waarde kan aannemen. Wordt de bron een beetje verplaatst dan verandert de intensiteit ook een beetje. Als je de bron een beetje harder zet wordt de intensiteit bij de detector een beetje meer. We kunnen niet zeggen dat de intensiteit in stapjes verandert.

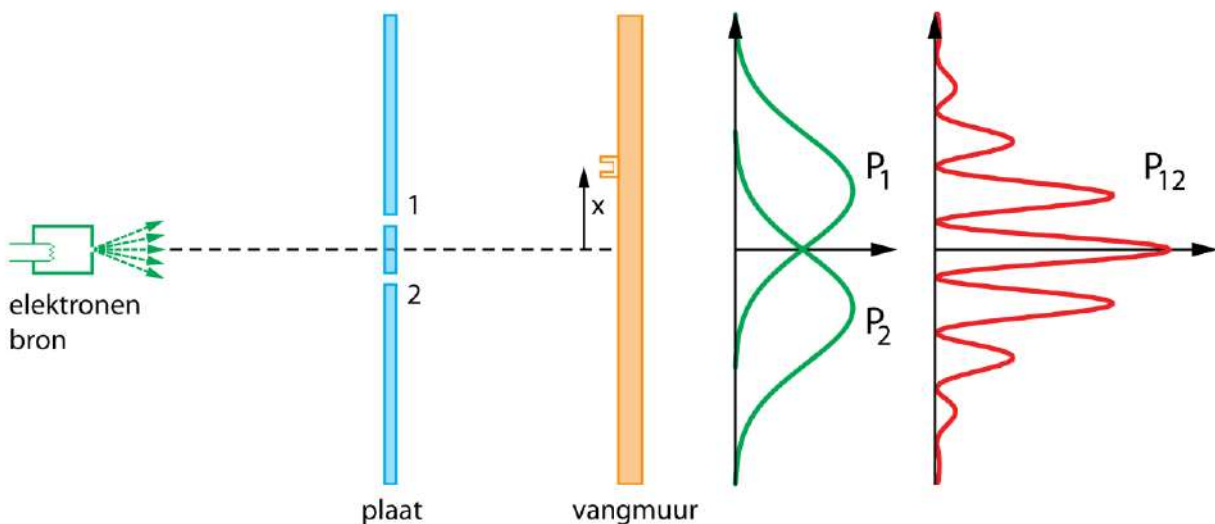
De golfbron wordt aangezet, we meten de intensiteit op verschillende plaatsen x en maken een diagram van de intensiteit uitgezet tegen de afstand x . Wat we vinden is grafiek I_{12} (rode curve) van figuur 9. Sluiten we één van de spleten af dan vinden we de groene grafieken van figuur 9. I_1 is de intensiteit van de golf door spleet 1 als spleet 2 gesloten is en I_2 is de intensiteit van de golf door spleet 2 als spleet 1 gesloten is. De intensiteit I_{12} is zeker niet de som van de intensiteiten I_1 en I_2 . We zeggen dat er **interferentie** plaatsvindt. Op de plaatsen waar I_{12} maximaal is zijn de golven in fase, zodat de amplitudes van golf 1 en golf 2 bij elkaar moeten worden opgeteld. De golven versterken elkaar, waardoor de intensiteit extra groot wordt. We zeggen dat er op deze plaatsen **constructieve interferentie** plaatsvindt. Op plaatsen waar I_{12} een lage waarde heeft zijn de golven 1 en 2 in tegenfase, zodat we de amplitudes van elkaar moeten aftrekken en de golven elkaar uitdoven. Hier treedt **destructieve interferentie** op. We verwachten een lage waarde in I_{12} als het verschil in afstand tussen spleet 1 en de detector en spleet 2 en de detector gelijk is aan een oneven aantal halve golflengtes.

Dubbelspleet experiment met elektronen

Nu stellen we ons hetzelfde experiment voor met elektronen. In figuur 10 zie je de opstelling. Als elektronenbron gebruiken we een dun wolfram draadje in een metalen doosje met een spleet erin. Het draadje verhitten we met elektrische stroom. Als het draadje negatief is ten opzichte van het metalen doosje worden de elektronen versneld naar de wanden, waarbij sommige elektronen door het gaatje gaan. Alle elektronen die uit de elektronenbron komen hebben ongeveer dezelfde energie. Voor de bron bevindt zich een dun plaatje met twee gaten erin en daarachter een andere plaat die als vangmuur dient.

Voor de vangmuur bevindt zich een beweegbare detector, zoals een Geigerteller, die een "klik" geeft als er een elektron wordt opgevangen.

Het eerste wat ons opvalt is dat alle "klikken" die we horen hetzelfde zijn. Er zijn geen "halve klikken". Verder zijn de "klikken" volkomen onregelmatig in de tijd. We horen zoiets als: klik.....klik-klik...klik.....klik....klik-klik-klik.....klik... etc. Tellen we het aantal klikken gedurende langere tijd, bijvoorbeeld een uur, en tellen we daarna opnieuw gedurende een uur, dan vinden we twee vrijwel gelijke aantallen. Hoewel de elektronen onregelmatig binnenkomen verandert het gemiddeld aantal klikken per tijdseenheid vrijwel niet.



Figuur 10 Dubbelspleet experiment met elektronen.

Verplaatsen we de detector een beetje, dan verandert hierdoor het gemiddelde aantal klikken per tijdseenheid, maar het klikgeluid blijft hetzelfde. Verlagen we de temperatuur van het wolframdraadje, dan neemt het aantal klikken per tijdseenheid af, maar de klikken gaan niet anders klinken. Ze worden bijvoorbeeld niet zachter. Plaatsen we een tweede detector dan horen we een klik uit de ene of uit de andere detector. Nooit komt er een klik tegelijkertijd uit beide detectoren. We concluderen dat wat er ook mag aankomen bij de vangmuur in ieder geval uit brokken bestaat. Alle brokken zijn even groot. Alleen hele brokken komen aan. Ze bereiken één-voor-één de vangmuur. Conclusie: elektronen komen altijd als identieke brokken aan.

Net als bij het experiment met de kogels kunnen we een experiment uitvoeren om antwoord te krijgen op de vraag: "Hoe groot is de kans dat een elektron aankomt bij de vangmuur op een afstand x vanaf het centrum?" Om de kans te bepalen zetten we de elektronenbron een poosje aan. We tellen het aantal klikken (gedetecteerde elektronen) en delen dit getal door het aantal elektronen dat de vangmuur bereikt. Het resultaat van dit experiment is grafiek P_{12} (rode curve) van figuur 10. Laten we eens nagaan of we dit resultaat kunnen begrijpen.

Het eerste wat we denken is dat de elektronen die aankomen door spleet 1 **of** door spleet 2 zijn gegaan. We doen de volgende bewering: **Bewering: ieder elektron gaat door spleet 1 óf door spleet 2.** Deze bewering houdt in dat de elektronen die aankomen bij de vangmuur verdeeld kunnen worden in twee groepen. Groep 1 zijn de elektronen die door

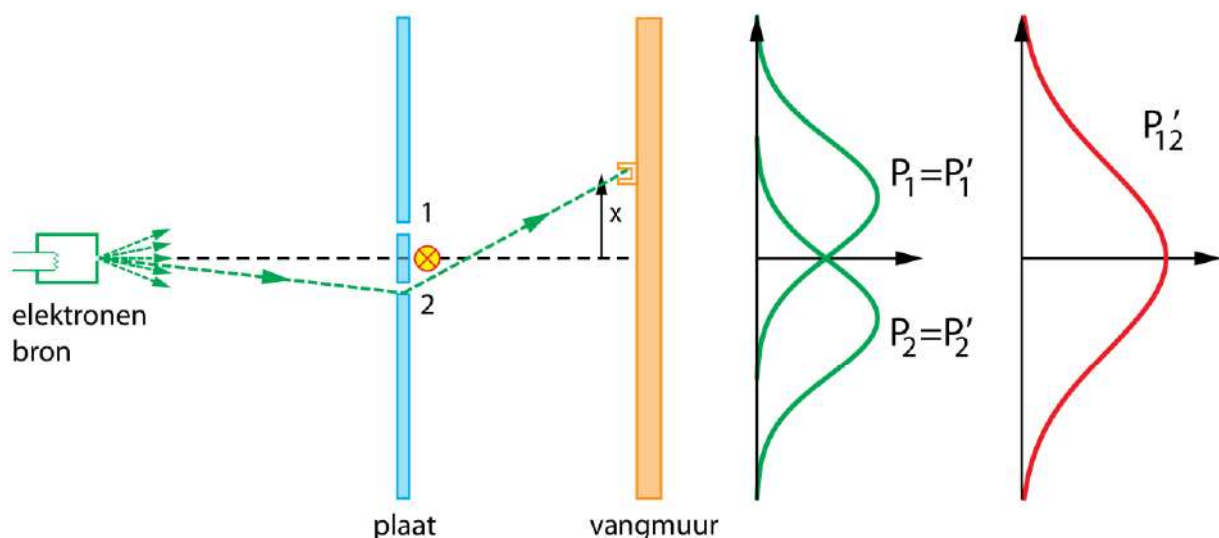
spleet 1 zijn gekomen en Groep 2 door spleet 2. De grafiek P_{12} moet dus de som zijn van de elektronen uit Groep 1 en uit Groep 2. Om dit te controleren sluiten we spleet 2 af en herhalen het experiment. We vinden nu grafiek P_1 (groene curve) van figuur 10. Op dezelfde manier doen we een experiment waarbij spleet 1 is afgesloten met P_2 als resultaat. Het resultaat P_{12} dat we krijgen met beide gaten open is duidelijk NIET de som van P_1 en P_2 , de kansverdeling voor ieder spleet afzonderlijk. In analogie met ons watergolf experiment zeggen we dat er **interferentie** optreedt. Voor elektronen geldt: $P_{12} \neq P_1 + P_2$. We kunnen niet anders dan concluderen dat de bewering dat ieder elektron door spleet 1 óf door spleet 2 gaat onjuist is. **Het is NIET waar dat ieder elektron door spleet 1 of door spleet 2 gaat.**

Hoe kan dit nou? Misschien moeten we zeggen dat het niet waar is dat elektronen door spleet 1 of door spleet 2 gaan. Misschien is het ingewikkelder en splitsen ze doormidden. Nee, want ze komen altijd in hele brokken aan. Misschien gaat een elektron eerst door spleet 1 keert dan om, gaat door spleet 2, maakt nog een paar rondjes en komt dan pas aan. Door spleet 2 te blokkeren veranderen we daarom de kans dat een elektron dat begint bij spleet 1 uiteindelijk bij de vangmuur aankomt. Dat kan ook niet, want met beide spleten open zijn er plaatsen waar minder elektronen aankomen dan als er maar één spleet open is. Door een spleet af te sluiten zouden we het aantal elektronen door de andere spleet moeten **vermeederen**. Verder zien we dat in het midden, bij $x = 0$, de grafiek P_{12} meer dan twee keer zo groot is als $P_1 + P_2$. Het lijkt wel alsof het afsluiten van een spleet het aantal elektronen dat door de andere spleet komt **vermindert**. Het is wel erg moeilijk om beide effecten te verklaren door aan te nemen dat elektronen in ingewikkelde paden reizen. Er zijn heel wat ideeën verzonnen om grafiek P_{12} te verklaren in termen van individuele elektronen die op een ingewikkelde manier door de gaten gaan. Geen enkel verzinsel levert de correcte grafiek P_{12} op. Gek genoeg is de wiskunde waarmee P_1 en P_2 aan P_{12} kan worden gerelateerd erg eenvoudig. Want P_{12} ziet er net zo uit als I_{12} van figuur 9. Voor de kansverdeling bij elektronen geldt dus hetzelfde als voor de kansverdeling bij golven. We concluderen het volgende:

Elektronen komen net als deeltjes in brokjes aan en de kans dat een brokje aankomt is op dezelfde manier verdeeld als de intensiteit van een golf. Het is op deze manier dat een elektron zich soms als deeltje en soms als golf manifesteert.

Kijken naar elektronen

Intussen zijn we nieuwsgierig geworden naar de manier waarop elektronen van de elektronenbron naar de vangmuur reizen. Om hier meer van te weten plaatsen we een sterke lichtbron achter de plaat tussen de twee gaten in, zie figuur 11. We weten dat licht wordt verstrooid door elektronen en als er een elektron voorbijkomt zal er wat licht in ons oog worden verstrooid, zodat we kunnen zien waar het elektron gaat. Als een elektron bijvoorbeeld door spleet 2 gaat, zoals in figuur 11, dan zien we een lichtflits in de buurt van spleet 2 in de figuur. Gaat een elektron door spleet 1 dan verwachten we een lichtflits in de buurt van spleet 1. Mocht het elektron zich toch in tweeën splitsen en door beide gaten gaan dan verwachten we tegelijkertijd twee lichtflitsen.



Figuur 11 Kijken of een elektron door spleet 1 of door spleet 2 gaat.

Het experiment geeft antwoord op onze vraag hoe het elektron gaat. Iedere keer als we een "klik" horen van onze detector zien we een lichtflits afkomstig van spleet 1 óf spleet 2. Nooit zien we tegelijkertijd twee lichtflitsen. Als we naar de elektronen kijken zien we dus dat ze door spleet 1 óf door spleet 2 gaan. Het experiment toont aan dat de bewering dat ieder elektron door spleet 1 of door spleet 2 gaat waar is. **Het is WEL waar dat ieder elektron door spleet 1 of door spleet 2 gaat.**

Wat is er aan de hand? Waarom is de bewering volgens het ene experiment niet waar en volgens het andere experiment wél waar? Waarom is P_{12} niet gewoon $P_1 + P_2$? We gaan het experiment herhalen. We verlagen de intensiteit van de elektronenbron zodat er steeds maar één elektron onderweg is. Voor iedere plaats x van de detector tellen we gedurende een tijdje de elektronen die aankomen. Daarbij houden we in de gaten of er een lichtflits uit spleet 1 of uit spleet 2 komt. We noteren het resultaat in twee kolommen. Iedere keer als we een klik horen zetten we een streepje. Zien we een lichtflits uit spleet 1 dan zetten we het streepje in kolom 1 en als een lichtflits uit spleet 2 komt zetten we een streepje in kolom 2. Door voor iedere plaats x het aantal streepjes in kolom 1 te tellen vinden we de kansverdeling P_1' dat een elektron via spleet 1 de detector bereikt. Uit het aantal streepjes in kolom 2 vinden we de kansverdeling P_2' dat een elektron via spleet 2 de detector bereikt. De grafieken P_1' en P_2' zie je in figuur 11 (groene curven). Zoals verwacht is grafiek P_1' identiek met P_1 uit het experiment waarbij we spleet 2 hadden afgesloten. P_2' is hetzelfde als toen we spleet 1 hadden afgesloten. Als we naar ze kijken gaan de elektronen zoals je zou verwachten. Elektronen waarvan we zien dat ze door spleet 1 gaan verdelen zich op dezelfde manier, onafhankelijk of spleet 2 open is of dicht.

Maar wat krijgen we nu voor de totale waarschijnlijkheid P_{12}' dat een elektron aankomt bij de detector los van de genomen route? Die informatie hebben we al, want we doen net alsof we nooit hebben gekeken en tellen het aantal streepjes van kolom 1 en kolom 2 gewoon bij elkaar op. En dan vinden we uiteraard: $P_{12}' = P_1' + P_2'$. Nu we gezien hebben door welk spleet ieder elektron is gekomen vinden we niet langer het interferentiepatroon P_{12} maar een nieuwe grafiek P_{12}' . Zetten we het lampje waarmee we kijken uit dan krijgen

we het interferentiepatroon terug. We moeten het volgende concluderen: als we naar de elektronen kijken gaan ze zich anders verdelen dan wanneer we niet kijken.

Misschien verstoort onze lichtbron het gedrag van de elektronen. Een elektron heeft immers maar weinig massa en als het in aanraking komt met een foton krijgt het een stoot, waardoor zijn richting verandert. Hierdoor verdwijnt het interferentiepatroon. We kunnen de gang van de elektronen minder verstoren door fotonen met minder energie te gebruiken. Voor fotonen geldt: $E = h \cdot f = h \cdot c / \lambda$. Verlagen we de fotonenergie dan vergroten we dus de golflengte. Stap voor stap verlagen we de energie van de fotonen en kijken we wat er gebeurt. Is de fotonenergie nog groot dan verstoren we de elektronen teveel en vinden we geen interferentie. Verminderen we de fotonenergie dan zien we dat bij een bepaalde golflengte het interferentiepatroon terug begint te komen. De golflengte waarbij dit gebeurt is ongeveer gelijk aan de afstand tussen de gaten. Alleen als de golflengte een stuk groter is dan de afstand tussen de gaten is de verstoring van de elektronen klein genoeg om een duidelijk interferentiepatroon P_{12} te krijgen. Maar bij zo'n grote golflengte kunnen we niet meer vaststellen of de lichtflits afkomstig is van spleet 1 of van spleet 2. Vanwege het golfkarakter van licht is er een beperking op de kleinste mogelijke afstand waarmee twee punten van elkaar kunnen worden onderscheiden. Is deze afstand kleiner dan de golflengte dan zien we een vage vlek. Dat is precies wat gebeurt in het experiment. Is de golflengte groter dan de afstand tussen de gaten dan zien we een vage lichtflits, waarvan we niet kunnen vaststellen of die afkomstig is van spleet 1 of van spleet 2.

Het is onmogelijk om vast te stellen door welk spleet het elektron gaat en tegelijkertijd niet het interferentiepatroon te verstoren. **Werner Heisenberg** formuleerde deze uitkomst als algemeen geldig principe. Dit is het **onbepaaldheidsprincipe** en kan in termen van ons experiment als volgt worden geformuleerd:

Ieder apparaat waarmee kan worden vastgesteld door welk spleet het elektron gaat, verstoort de elektronen zodanig dat het interferentiepatroon wordt vernietigd.

Het onbepaaldheidsprincipe is in onnoemelijk veel experimenten bevestigd. Nog nooit is het gelukt om eraan te ontsnappen en we moeten dus vaststellen dat het hier om een fundamentele eigenschap van de natuur gaat. De hele kwantummechanica is gefundeerd op de geldigheid van het onbepaaldheidsprincipe. En omdat de kwantummechanica een uitzonderlijk succesvolle theorie is, waarmee enorm veel atomaire processen tot in de kleinste details kunnen worden verklaard, is ons vertrouwen in het onbepaaldheidsprincipe in de afgelopen honderd jaar heel sterk geworden. Wordt er ooit een experiment uitgevoerd waarmee het onbepaaldheidsprincipe wordt "verslagen" dan wordt daarmee de kwantumtheorie inconsistent en moet het als geldige theorie terzijde worden geschoven of deel gaan uitmaken van een overkoepelende theorie. Tot op heden is dit echter niet het geval.

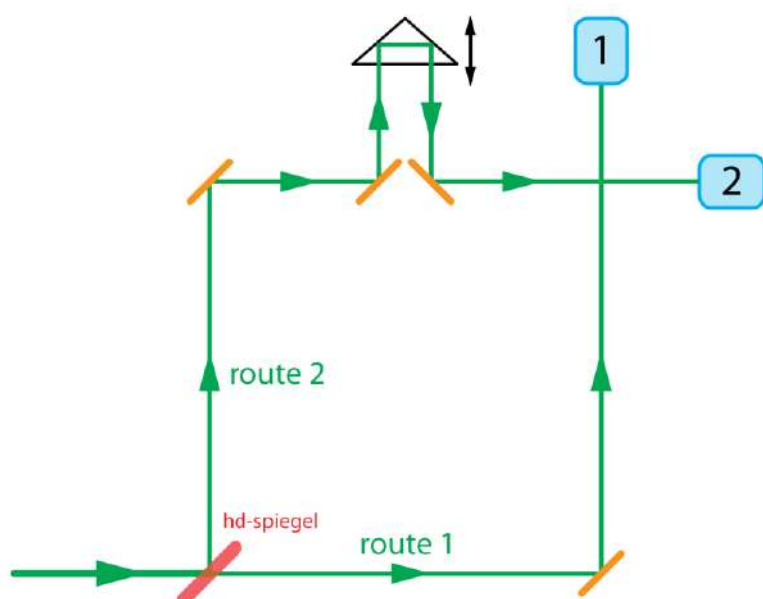
Het raadsel waarmee we blijven zitten is of het nu wel of niet waar is dat het elektron door spleet 1 of door spleet 2 gaat. Het enige antwoord dat we kunnen geven is dat we op een speciale manier moeten leren denken en praten om te voorkomen dat we inconsistent

worden. Wat we moeten zeggen is het volgende. Als we een experiment doen waarmee we kunnen vaststellen of het elektron door spleet 1 of spleet 2 gaat dan mogen we zeggen dat het elektron door spleet 1 óf door spleet 2 gaat. Maar als we niet proberen vast te stellen door welk spleet het elektron gaat dan mogen we ook niet zeggen dat het elektron door spleet 1 of spleet 2 gaat. Doe je dat toch, en redeneer je hiermee consequent door, dan spreek je jezelf uiteindelijk tegen. Dit antwoord is voor velen moeilijk verteerbaar. Toch zullen we het moeten accepteren om verder te komen met de beschrijving van de natuur. Het onbepaaldheidsprincipe heeft verstrekkende consequenties waarin we ons in de volgende paragraaf gaan verdiepen.

Superpositie

In het dubbelspleet experiment met kwantumdeeltjes komen we de situatie tegen waarbij het onbekend is hoe een kwantumdeeltje de spleten passeert. Zonder verdere informatie kunnen we niet zeggen door welke spleet het deeltje is gegaan en moeten we beide mogelijkheden openhouden. We zeggen dat het deeltje zich in een **superpositie** bevindt van de route door spleet 1 en de route door spleet 2. Met superpositie bedoel je de optelling of de samenvoeging van twee of meer mogelijke uitkomsten.

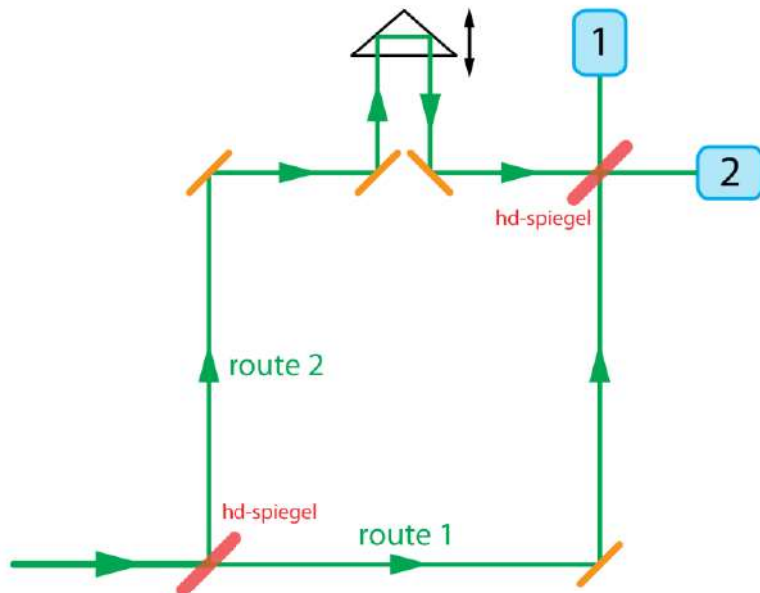
Laten we een ander voorbeeld bekijken waarin superpositie optreedt. Stel we schijnen met licht op een halfdoorlatende spiegel. Dit is een spiegel die 50% van het licht doorlaat en 50% terugkaatst. In figuur 12 is de halfdoorlatende spiegel in rood aangegeven. Gewone spiegels die 100% terugkaatsen zijn in oranje aangegeven. Bij de halfdoorlatende spiegel splits de lichtbundel zich in twee. De ene helft volgt route 1 en de andere helft route 2. In route 2 bevindt zich een prisma, die in de aangegeven richting kan worden verplaatst. De lengte van route 2 verandert hierdoor. Aan het einde van elke route bevindt zich een detector, waarmee de lichtintensiteit wordt gemeten. Zoals verwacht meten de detectoren 1 en 2 ieder de helft van de intensiteit van het licht. Vlak voor de detectoren snijden de lichtbundels elkaar loodrecht, maar dit heeft geen invloed op het resultaat. Als fotonen één voor één door de opstelling gaan zal 50% van de fotonen aankomen bij detector 1 en 50% bij detector 2.



Figuur 12 Superpositie van licht zonder interferentie.

We gaan de opstelling uitbreiden met een tweede halfdoorlatende spiegel. Zie figuur 13. In dit geval meten we interferentie van het licht. Het prisma kan worden verplaatst, waarmee de lengte van route 2 verandert. Als het verschil in weglengte een heel aantal keer de golflengte is, versterken de lichtbundels elkaar vanwege constructieve interferentie. Als het verschil in weglengte $\frac{1}{2}\lambda$, $1\frac{1}{2}\lambda$, $2\frac{1}{2}\lambda$, $3\frac{1}{2}\lambda$... is, doven de lichtbundels elkaar uit vanwege destructieve interferentie. Interferentie treedt alleen op als twee lichtbundels elkaar overlappen. Het foton heeft dus niet route 1 of route 2 gevolgd maar beide routes tegelijk.

Figuur 13 Superpositie van licht met interferentie.



Het ziet er dus naar uit dat zonder de tweede hd-spiegel een foton route 1 **of** route 2 volgt en met de tweede hd-spiegel route 1 **én** route 2. Maar hoe weet een foton dat bij de eerste hd-spiegel aankomt of verderop in de opstelling nog een tweede hd-spiegel staat? En stel dat het foton dit zou "weten" dan kunnen we het om de tuin leiden door nadat het de eerste hd-spiegel is gepasseerd snel de tweede hd-spiegel toe te voegen of weg te nemen. Het foton zou dan het verkeerde "besluit" hebben genomen. Maar zo werkt het niet.

Zoals je merkt is onze dagelijkse manier van denken niet langer toepasbaar. In de kwantummechanica moet je een andere manier gaan **denken** en daar heb je een andere **taal** voor nodig. We zeggen dat een foton, nadat het de eerste hd-spiegel is gepasseerd, zich in een superpositie van route 1 en route 2 bevindt. Zolang er geen verdere informatie is, blijft het foton in deze superpositie. Op het moment dat er een waarneming wordt gedaan wordt de superpositie opgeheven en weet je welke van de twee opties is gerealiseerd. Dit weet je dus alleen achteraf.

Wel of geen interferentie

Om de situatie van een kwantumdeeltje in superpositie te beschrijven introduceren we een functie Ψ (Griekse letter psi) die we de **golffunctie** noemen. De fotonen die route 1 volgen krijgen functie Ψ_1 en de fotonen die route 2 volgen krijgen functie Ψ_2 . Een detector meet de intensiteit van het licht en dit is gelijk aan het **kwadraat** van de functie Ψ .

Bij het passeren van de eerste hd-spiegel wordt een foton in een superpositie van route 1 en route 2 gebracht. Zijn toestandsfunctie wordt nu $\Psi_1 + \Psi_2$. Zonder de tweede hd-spiegel kan detector 1 alleen de fotonen die route 1 hebben genomen waarnemen. Het signaal dat hij ontvangt is gerelateerd aan Ψ_1^2 . Detector 2 neemt alleen fotonen waar die route 2 hebben genomen en ontvangt een signaal gerelateerd aan Ψ_2^2 . Is het experiment zo ingericht dat alleen route 1 of route 2 wordt waargenomen dan is er **geen interferentie**. Als we de tweede halfdoorlatende spiegel in de lichtweg plaatsen verandert de situatie. Een detector kan nu geen onderscheid meer maken tussen route 1 en route 2 waardoor er **wel interferentie** ontstaat. Het signaal dat een detector ontvangt is het kwadraat van de golffunctie en wordt gegeven door:

$$(\Psi_1 + \Psi_2)^2 = \Psi_1^2 + \Psi_2^2 + 2 \cdot \Psi_1 \cdot \Psi_2 \cdot \cos \varphi$$

Hierin is φ het faseverschil tussen golf 1 en golf 2. $\cos \varphi$ varieert tussen 1 en -1 , waarbij er constructieve interferentie (versterking) is als $\cos \varphi = 1$ en destructieve interferentie (uitdoving) als $\cos \varphi = -1$. Zoals je ziet is er een term waarin de functies Ψ_1 en Ψ_2 met elkaar zijn vermenigvuldigd. Het is deze mengterm, aangegeven in rood, die verantwoordelijk is voor het ontstaan van interferentie. Zonder deze mengterm is er geen interferentie. Met deze mengterm is er wel interferentie.

De kat van Schrödinger

Superpositie is kenmerkend voor kwantummechanica. Maar, kwantummechanica geldt niet alleen voor fotonen en deeltjes met een kleine massa, maar voor alle voorwerpen, klein of groot. De gedachte dat voorwerpen zich in een superpositie kunnen bevinden is voor **Erwin Schrödinger** (1887–1961) onaanvaardbaar. Hoewel hij een van de belangrijkste grondleggers van de kwantummechanica is kan hij de consequenties niet accepteren. Om dit te illustreren bedenkt hij het volgende gedachtenexperiment wat bekend staat als "de kat van Schrödinger".

In een ruimte bevindt zich een radioactieve bron, een Geigerteller, een hamer, een fles met dodelijk gif en een kat. Als in de radioactieve bron een atoomkern spontaan uiteenvalt geeft de Geigerteller een signaal af waardoor de hamer de fles met gif kapotslaat. De kat ademt het gif in en gaat dood. Zie figuur 14.



Figuur 14 De kat van Schrödinger.

Nadat de ruimte is afgesloten weet je niet of het radioactief verval wel of niet heeft plaatsgevonden. Net als het foton en de halfdoorlatende spiegel bevinden de radioactieve kernen zich in een superpositie van wel of niet vervallen. En omdat het leven van de kat is gekoppeld aan het radioactieve proces, bevindt de kat zich ook in een superpositie van leven en dood. Deze superpositie blijft bestaan totdat de ruimte wordt geopend en informatie beschikbaar komt over de toestand van de kat.

17.3 Onbepaaldheid

Het onbepaaldheidsprincipe is in 1927 door **Werner Heisenberg** (1901–1976) gepubliceerd. Op dat moment is de kwantummechanica al ver ontwikkeld. Het onbepaaldheidsprincipe kun je daarom zien als conclusie, waarin veel inzichten samenkomen. In dit hoofdstuk over kwantummechanica volgen we niet de historische ontwikkeling. We beginnen als het ware met de conclusie en kijken vandaaruit hoe alle puzzelstukjes aan elkaar vastzitten. In 1932 krijgt Werner Heisenberg, pas 31 jaar oud, de Nobelprijs voor natuurkunde.



Werner Heisenberg

Om hier meer van te begrijpen moet je eerst kennismaken met de grootheid **impuls**. De impuls $\vec{p}$ van een deeltje met massa m en snelheid $\vec{v}$ wordt gegeven door:

$$\vec{p} = m \cdot \vec{v}$$

- $\vec{p}$ is de impuls (een vectorgrootheid) met als eenheid (kg·m/s)
- m is de massa van het voorwerp in kilogram (kg)
- $\vec{v}$ is de snelheid in meter per seconde (m/s)

De impuls speelt een belangrijke rol als twee deeltjes op elkaar botsen. Botst deeltje 1 op deeltje 2 dan verandert hierdoor de impuls van beide deeltjes. Maar de totale hoeveelheid impuls blijft hetzelfde. Dit is de **wet van behoud van impuls**:

$$\Sigma \vec{p}_{\text{voor}} = \Sigma \vec{p}_{\text{na}}$$

- $\Sigma \vec{p}_{\text{voor}}$ is de som van alle aanwezige impulsen voor de botsing
- $\Sigma \vec{p}_{\text{na}}$ is de som van alle aanwezige impulsen na de botsing

Toegepast op de situatie waarin deeltje 1 op deeltje 2 botst vinden we:

$$\vec{p}_{1, \text{voor}} + \vec{p}_{2, \text{voor}} = \vec{p}_{1, \text{na}} + \vec{p}_{2, \text{na}}$$

Ieder bewegend deeltje bevat impuls. Ook fotonen bevatten impuls, ondanks dat hun rustmassa nul is. De richting van de impuls is gelijk aan de richting waarin het deeltje beweegt. De impuls van een foton vinden we door de formules $E = m \cdot c^2$, $E = h \cdot f$ en $c = \lambda \cdot f$ te combineren waaruit volgt:

$$p_{\text{foton}} = \frac{h}{\lambda}$$

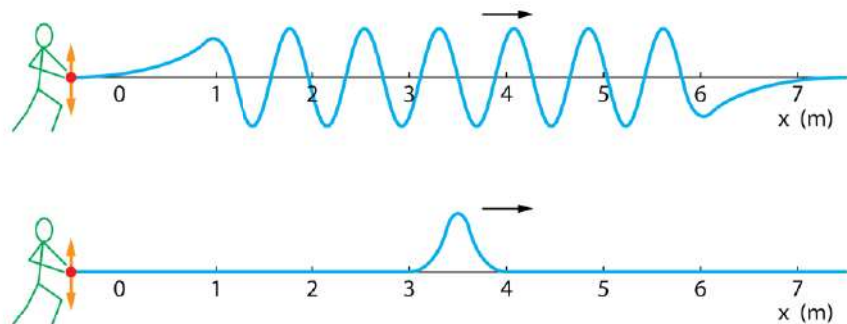
- p_{foton} is de grootte van de impuls van een foton (kg·m/s)
- h is de constante van Planck: $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- λ is de golflengte van het foton in meter (m)

BEWIJS

- $m \cdot c^2 = h \cdot f$
- $m \cdot c = \frac{h \cdot f}{c}$ en $c = f \cdot \lambda \rightarrow m \cdot c = p = \frac{h}{\lambda}$

De impuls van een foton is gerelateerd aan zijn golflengte. Dit is vreemd, want als je een foton opvat als deeltje heeft het een goed bepaalde plaats, terwijl een golf als kenmerk heeft dat het zich verspreidt in de ruimte. In figuur 15 wordt dit geïllustreerd. In het bovenste plaatje zie je een golf in een koord met een vrij goed bepaalde golflengte, maar een slecht bepaalde plaats. In het onderste plaatje zie je een golf met een goed bepaalde plaats en een slecht bepaalde golflengte. Het lijkt wel of de mogelijkheid om de golflengte en de plaats te bepalen elkaar tegenwerken. Je moet kiezen wat je wilt bepalen. Kies je voor de golflengte, dan weet je weinig van de plaats en kies je voor de plaats dan weet je weinig van de golflengte.

Figuur 15 Onbepaaldheid van de golflengte en de plaats. Als je de golflengte goed kunt bepalen weet je weinig van de plaats en als je de plaats goed kunt bepalen weet je weinig van de golflengte.



De onbepaaldheidsrelatie geeft aan hoe de onbepaaldheid van de plaats en die van de impuls met elkaar samenhangen. Beschouwen we alleen de x-richting dan geldt:

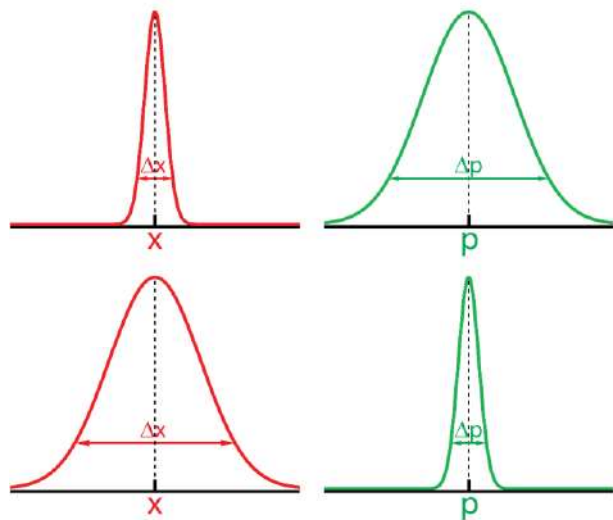
De onbepaaldheidsrelatie tussen plaats en impuls

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

- Δx is de onbepaaldheid van de plaats in meter (m)
- Δp is de onbepaaldheid van de impuls in de x-richting in (kg·m/s)
- h is de constante van Planck: $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s

De onbepaaldheidsrelatie zegt het volgende. Als je een kwantumdeeltje in een ruimte brengt weet je niet precies waar het deeltje zich bevindt. Er is een plaats x waarvoor de kans om het deeltje aan te treffen het grootst is. Een stukje van x verwijderd is de kans om het deeltje aan te treffen kleiner dan op plaats x . Hoe groter de afstand tot x is, hoe kleiner de kans wordt om het deeltje aan te treffen. Als we de kans om het deeltje aan te treffen uitzetten tegen de afstand tot x dan krijgen we de rode curves in figuur 16. Neemt de kans snel af met de afstand tot x dan is de kansverdeling smal (figuur 16, boven). Neemt de kans langzaam af met de afstand tot x dan is de kansverdeling breed (figuur 16 onder). Hetzelfde geldt voor de impuls. De kans dat het deeltje impuls p heeft is het grootst. Hoe groter het verschil met p is, hoe kleiner de kans wordt.

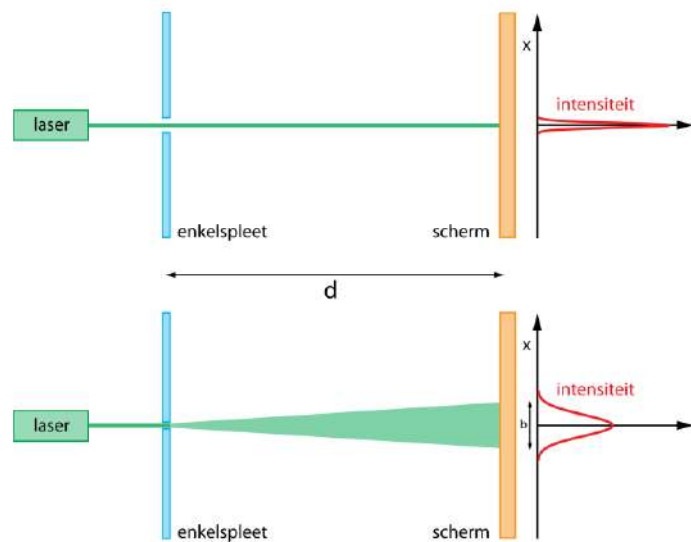
In figuur 16 zie je de kansverdelingen van de plaats (rood) en van de impuls (groen). De onbepaaldheidsrelatie zegt dat de kansverdelingen van de plaats en van de impuls niet tegelijkertijd smal kunnen zijn. Is de kansverdeling van de plaats smal (kleine Δx) dan moet de kansverdeling van de impuls een minimale breedte Δp hebben. Alleen als de kansverdeling van de plaats breed is kan de kansverdeling van de impuls smal zijn. Er is sprake van uitwisseling van de kansverdelingsfuncties. Als de ene smal is, is de andere noodzakelijk breed. Verder geldt altijd: $\Delta x > 0$ én $\Delta p > 0$.



Figuur 16 Kansverdeling van de plaats (rood) en van de impuls (groen).

Enkelspleet experiment met fotonen

Om de onbepaaldheidsrelatie te demonstreren schijnen we met een laser op een spleet waarvan je de breedte kan variëren. Op een scherm zie je het laserlicht. Zie figuur 17. Als de spleet een millimeter breed is, zie je een stip op het scherm. We maken de spleet steeds smaller en zien dat de stip in één richting wordt uitgerekt tot een ovale vlek. We zien ook een interferentiepatroon waar we verder geen aandacht aan geven. De onbepaaldheidsrelatie geeft de relatie tussen de breedte van de spleet en de breedte van de lichtvlek.



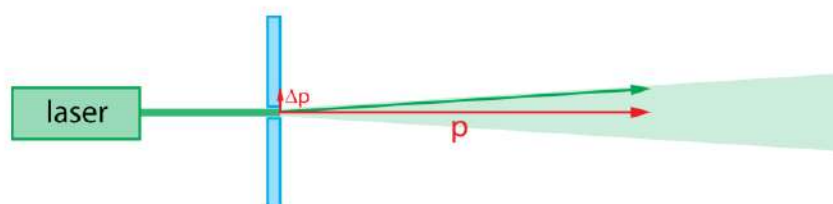
Figuur 17 Enkel-spleet met fotonen.

Stel dat de spleet $10 \mu\text{m}$ breed is dan krijgen we $\Delta x = 10^{-5} \text{ m}$. De minimale waarde van de onbepaaldheid van de impuls in de x-richting volgt uit de onbepaaldheidsrelatie:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi} \rightarrow 10^{-5} \cdot \Delta p \geq \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{4\pi} \rightarrow \Delta p = 5,27286 \cdot 10^{-30} \text{ kg m s}^{-1}$$

Als de golflengte van het licht 532 nm is, vinden we voor de impuls van de fotonen:

$$p = \frac{h}{\lambda} \rightarrow p = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{532 \cdot 10^{-9}} = 1,2455 \cdot 10^{-27} \text{ kg m s}^{-1}$$



Figuur 18

Voor de hoek waaronder de lichtstraal wordt verspreid geldt (zie figuur 18):

$$\tan \alpha = \frac{\Delta p}{p} \rightarrow \alpha = \tan^{-1} \frac{5,27286 \cdot 10^{-30}}{1,2455 \cdot 10^{-27}} \rightarrow \alpha = 0,24256 \text{ graden}$$

Het scherm staat op afstand $d = 3,0 \text{ m}$ en voor de breedte b van de lichtvlek op het scherm vinden we:

$$\tan \alpha = \frac{\frac{1}{2}b}{d} \rightarrow \tan 0,24256 = \frac{\frac{1}{2}b}{3,0} \rightarrow b = 2,54 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

Materiegolven

In 1924 suggereert **Louis de Broglie** ("de brui-je") dat je niet alleen aan fotonen maar ook aan voorwerpen mét rustmassa een golflengte kunt toekennen. Zoals we hebben gezien kunnen voorwerpen, bijvoorbeeld in een dubbelspleet experiment, met elkaar interfereren en uit het interferentiepatroon kun je een golflengte bepalen. Voor de grootte van deze golflengte geldt onderstaande formule.



Louis de Broglie

De debroglie golflengte

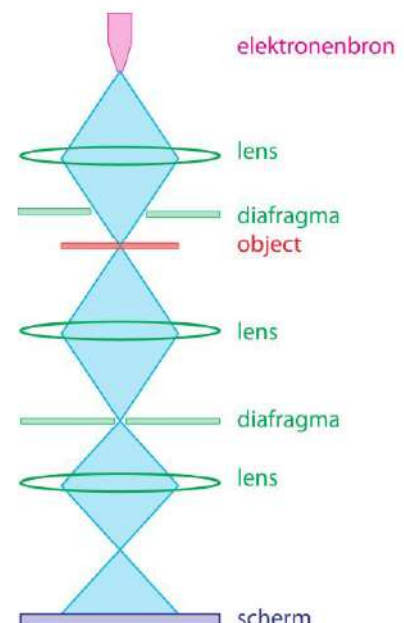
$$\lambda = \frac{h}{p} \rightarrow \lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

- λ is de golflengte van het voorwerp in meter (m)
- h is de constante van Planck: $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- m is de massa van het voorwerp in kilogram (kg)
- v is de snelheid van het voorwerp in meter per seconde (m/s)

Een voorwerp met een grote massa of een grote snelheid heeft een kleine debroglie golflengte. Het getal $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ wordt dan immers gedeeld door een groot getal. De golflengte van gewone voorwerpen is daarom te klein om waar te nemen.

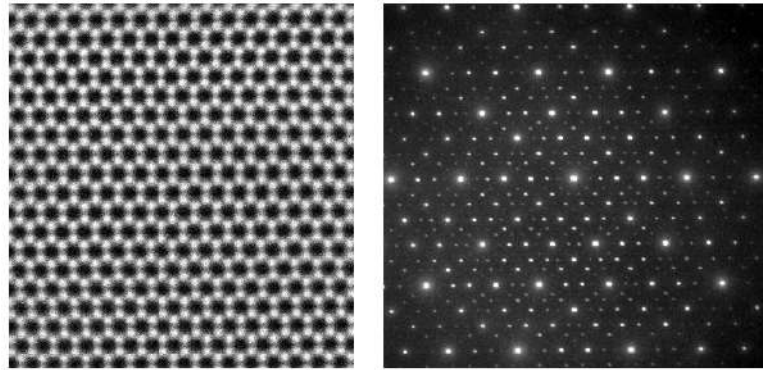
Transmissie Elektronen Microscoop (TEM)

In een **Transmissie Elektronen Microscoop (TEM)** interfereren elektronen die versneld zijn met een spanning van 100 kV tot 300 kV. Met een lens en een diafragma wordt de elektronenbundel op het object gericht. Om de beeldkwaliteit te verbeteren zijn er achter het object nog twee lenzen en een diafragma. Onderin bevindt zich een scherm, waar het beeld of het interferentiepatroon te zien is. De maximale vergroting wordt bepaald door de golflengte van de elektronen. Alleen objecten die groter zijn dan de golflengte kunnen scherp worden waargenomen.



Figuur 19 Transmissie Elektronen Microscoop (TEM).

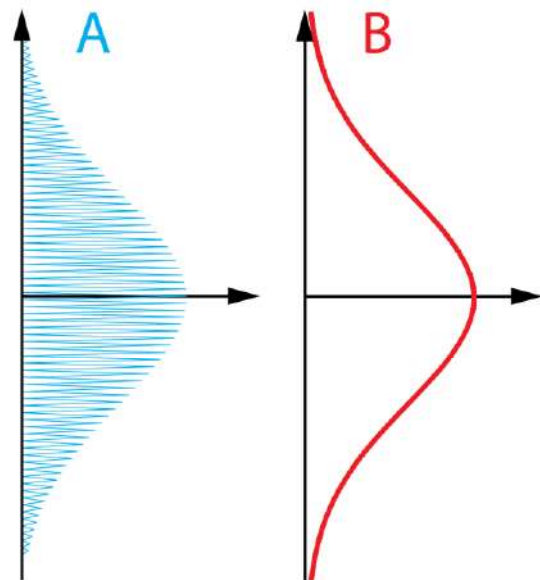
De de Broglie golflengte wordt bepaald door de versnellingsspanning. Hoe groter die is, hoe kleiner de golflengte. Een moderne TEM heeft een resolutie van ongeveer 50 pm. Zoals je in figuur 20 kunt zien kun je met een TEM atomen waarnemen.



Figuur 20 Links: TEM beeld met atomaire resolutie, rechts: TEM interferentiepatroon.

Experiment met de kogels nader bekeken

Hoe zit het nu met de kogels uit ons eerdere experiment? Waarom zien we bij kogels geen interferentie? Het antwoord hierop is dat voor kogels de golflengte zo klein is dat het interferentiepatroon heel erg dicht op elkaar is gepakt. Zo dicht zelfs dat met welk instrument dan ook de maxima en minima niet van elkaar zijn te onderscheiden. In figuur 21 zie je een schets van de situatie. In deel A zie je de kansverdeling voor kogels, zoals door de kwantummechanica wordt voorspeld. Het dichte bos aan pieken representeert het interferentiepatroon dat je krijgt bij zeer kleine golflengtes. Een instrument meet altijd een hele groep pieken tegelijkertijd, zodat het experiment een vloeiende curve geeft, zoals in deel B.



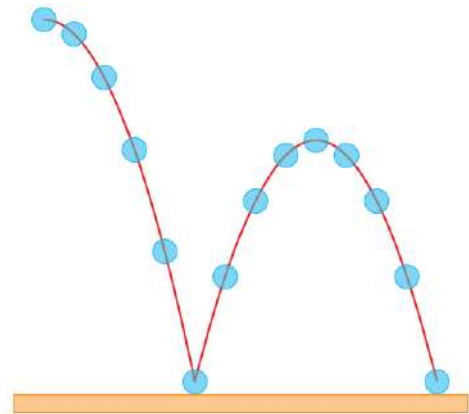
Figuur 21 Interferentiepatroon met kogels. Deel A is de werkelijke kansverdeling van de kogels. Deel B is wat het experiment laat zien.

Een kwantumdeeltje heeft geen baan

Om de beweging van een voorwerp – zoals een tennisbal – te beschrijven kunnen we de klassieke mechanica toepassen. De wetten van Newton stellen ons in staat om de beweging van het voorwerp uit te rekenen. Weet je van een voorwerp de plaats, de impuls en de resulterende kracht, dan kun je voor ieder tijdstip de plaats en de impuls berekenen. Het vereist wellicht een flinke computer om alle berekeningen uit te voeren, maar in principe ligt met de informatie op één tijdstip de toekomst van het voorwerp volledig vast.

Om te controleren of onze berekeningen juist zijn kunnen we de plaats en de impuls (de snelheid) van het voorwerp op een groot aantal tijdstippen meten. Dit kan bijvoorbeeld door een stroboscopische foto te maken, waarop de plaats op een serie tijdstippen zichtbaar is, zie figuur 22. De opeenvolgende plaatsen die het voorwerp inneemt noem je de **baan** van het voorwerp. Ben je niet tevreden over de nauwkeurigheid en wil je de plaats

van het voorwerp tussen twee lichtflitsen weten dan hoef je slechts de frequentie waarmee je de lichtflitsen geeft te vergroten. In principe is het mogelijk om de beweging van het voorwerp exact te volgen. De baan van het voorwerp kan met iedere gewenste nauwkeurigheid worden vastgelegd. Maar bij een kwantumdeeltje kan dit niet. De lichtflitsen verstoren immers de impuls van het deeltje.



Figuur 22 Stroboscopische foto van een stuiterende bal.

Stel dat je van een kwantumdeeltje de plaats x_1 op tijdstip t_1 en de plaats x_2 op tijdstip t_2 weet. Dit kun je onmogelijk weten, maar stel dat je deze informatie hebt. Om te onderzoeken hoe het deeltje van x_1 naar x_2 is gegaan geef je een extra lichtflits op een tijdstip tussen t_1 en t_2 in. Het gevolg van deze flits is echter dat het deeltje op tijdstip t_2 niet meer bij x_2 aankomt. Weet je dus de plaats van een kwantumdeeltje op t_1 en t_2 dan is het **onmogelijk** om de plaats van het deeltje tussen deze tijdstippen te weten te komen. We moeten dus concluderen dat aan een kwantumdeeltje geen baan kan worden toegekend.

Een kwantumdeeltje heeft geen baan.

Een kwantumdeeltje heeft geen identiteit

Nu we weten dat een kwantumdeeltje geen baan heeft, moeten we ook het idee loslaten dat een kwantumdeeltje een eigen identiteit bezit. Laten we opnieuw kijken naar de stroboscopische foto. We zien de plaats van een bal op verschillende tijdstippen. De foto laat steeds dezelfde bal zien die beweegt. Dat weten we zeker omdat we vrij zijn om tussen twee tijdstippen een nieuwe meting te doen, zodat we de bal met iedere gewenste nauwkeurigheid kunnen volgen op de weg die het gaat. Verder is het mogelijk om de bal te markeren. Je kunt bijvoorbeeld een kruisje zetten op de bal om te zien of op iedere afbeelding hetzelfde kruisje staat.

Maar bij een kwantumdeeltje ligt dit anders. We kunnen immers geen extra metingen doen. Het is daarom onmogelijk om vast te stellen of het kwantumdeeltje dat je ziet bij flits 2 hetzelfde kwantumdeeltje is als bij flits 1. We zien twee keer een bepaald type kwantumdeeltje – bijvoorbeeld een elektron – maar niemand kan weten of het beide keren om hetzelfde elektron gaat. Informatie hierover is niet beschikbaar en er valt dus niets zinnigs over te zeggen.

Een kwantumdeeltje heeft geen identiteit.

De kans om een kwantumdeeltje aan te treffen

Het is intussen duidelijk dat de toekomst van een kwantumdeeltje niet vastligt. Hoe groot onze computer ook is, het is **principeel onmogelijk** om voorspellingen te doen over toekomstige plaats en impuls van een kwantumdeeltje. Het enige dat voorspeld kan worden is de **kans** dat het zich op een bepaalde plaats met een bepaalde impuls bevindt. Als je

maar één meting doet is het goed mogelijk dat het kwantumdeeltje niet de verwachte plaats en impuls heeft. Maar als je veel metingen doet is de **kansverdeling** exact voorspelbaar. Het is dus niet zo dat de toekomst van een kwantumdeeltje helemaal open is. Het resultaat van één enkele meting is onvoorspelbaar, maar het gemiddelde resultaat van veel metingen kan exact worden berekend.

Voor een kwantumdeeltje kan alleen de toekomstige kansverdeling van de plaats en van de impuls worden berekend. Het resultaat van één enkele waarneming ligt niet vast en is daarom onvoorspelbaar.

Kwantummechanica versus klassieke mechanica

Uit het bovenstaande lijkt het dat kwantummechanica en klassieke mechanica niet veel met elkaar te maken hebben. De manier van denken en de taal die je daarbij nodig hebt verschilt namelijk enorm. Toch mag je kwantummechanica niet tegenover klassieke mechanica plaatsen. Kwantummechanica is een verfijning van de klassieke mechanica die je nodig hebt als de massa klein is. De klassieke mechanica is volledig in overeenstemming met de kwantummechanica en mag gewoon worden gebruikt bij voorwerpen waarvan de massa zo groot is dat zijn golflengte te klein is om waar te nemen.

Om de stap van kwantummechanica naar klassieke mechanica te maken moeten we ons realiseren dat natuurkundige kennis voorkomt uit experimenten. Stel we nemen een kwantumdeeltje en meten daarvan 1000 keer de plaats. Bij iedere meting zal de plaats van het kwantumdeeltje anders zijn. Maar van al deze plaatsen kunnen we het gemiddelde nemen en vinden dan de **verwachtingswaarde** van de plaats. Om de verwachtingswaarde uit te rekenen moet je dus veel experimenten doen en van de alle uitkomsten het gemiddelde nemen. Stel we nemen een dobbelsteen, gooien 1000 keer, en noteren steeds de uitkomst. De verwachtingswaarde is dan $\frac{1}{6} + \frac{2}{6} + \frac{3}{6} + \frac{4}{6} + \frac{5}{6} + \frac{6}{6} = \frac{21}{6} = 3,5$. Het getal 3,5 kun je helemaal niet krijgen, maar dit is toch de gemiddelde uitkomst bij het gooien van een dobbelsteen. Speel je het gezelschapsspel Ganzenbord dan ga je per worp gemiddeld 3,5 plaatsen vooruit. De verwachtingswaarde geven we aan met $\langle \dots \rangle$. $\langle x \rangle$ is de verwachtingswaarde van de plaats, $\langle v \rangle$ is de verwachtingswaarde van de snelheid, etc.

Beweegt een voorwerp met een constante snelheid v dan gebruiken we in de klassieke mechanica $x = v \cdot t$. In de kwantummechanica geldt deze formule niet, maar wat wel geldt is: $\langle x \rangle = \langle v \rangle \cdot t$. Als je veel experimenten doet en van alle resultaten het gemiddelde neemt komt dit exact overeen met de klassieke mechanica. Deze verbinding tussen de klassieke mechanica en de kwantummechanica is het theorema van **Paul Ehrenfest** (1880–1933) die werkte aan de Universiteit van Leiden. Het stelt ons in staat om vertrouwde begrippen te blijven gebruiken, zolang we ons maar realiseren dat de klassieke natuurkunde het gemiddelde beschrijft van heel veel gebeurtenissen op microscopische schaal.



Paul Ehrenfest

17.4 De schrödingervergelijking

Erwin Schrödinger (1887–1961) levert een cruciale bijdrage aan de kwantummechanica door in 1925 een methode te bedenken waarmee het spectrum van waterstof exact kan worden uitgerekend. In zijn methode wordt een kwantumdeeltje beschreven door een golffunctie. Schrödinger denkt dat kwantumdeeltjes een soort golven zijn, maar daarmee kun je hun gedrag niet verklaren. In 1926 geeft **Max Born** (1882–1970) de juiste interpretatie aan de golffunctie. Volgens hem heeft de golffunctie zelf geen betekenis maar moet het kwadraat van de golffunctie worden opgevat als de kans dat een deeltje zich op een bepaald tijdstip op een bepaalde plaats bevindt.

Het idee van Born heeft verstrekkende gevolgen. Beroemde natuurkundigen, zoals Max Planck, Albert Einstein, Louis de Broglie en Erwin Schrödinger, kunnen de interpretatie van Born niet accepteren. Einstein is de bekendste opponent en schrijft in 1926 brieven aan Born en Bohr waarin hij zegt niet te kunnen geloven dat God dobbelt. Einstein kan niet accepteren dat het gedrag van een individueel kwantumdeeltje wordt bepaald door toeval. Volgens Einstein heeft uiteindelijk alles een oorzaak en is het de taak van de natuurkundige om de fundamentele oorzaken te doorgronden. Bohr, Heisenberg en Born kunnen wel accepteren dat in de natuurkunde toeval het laatste woord heeft.

Niels Bohr is de bekendste voorstander en redeneert dat alleen het waarneembare tot de natuurkunde mag behoren. En zoals het onbepaaldheidsprincipe aangeeft kan de levensloop van een individueel kwantumdeeltje niet worden waargenomen. Een "oorzaak" vinden van deze onwaarneembare levensloop is daarom overbodig. Deze visie staat bekend als de **Kopenhaagse interpretatie**, genoemd naar Bohrs woonplaats.

De golffunctie

De kans om een deeltje op een bepaald moment op een bepaalde plaats aan te treffen is vastgelegd in een **golffunctie** Ψ (Griekse letter psi). De golffunctie Ψ heeft de **plaats** en de **tijd** als variabelen. Om het niet al te ingewikkeld te maken beperken we ons tot één richting, de x-richting. We krijgen dan een golffunctie $\Psi(x, t)$, waarbij x de plaats is en t de tijd. Voor iedere plaats en voor ieder tijdstip geeft $\Psi(x, t)$ een bepaald getal. Het kwadraat van dit getal is de kans dat het deeltje zich op tijdstip t op plaats x bevindt.

Een kwantumdeeltje heeft een golffunctie $\Psi(x, t)$ met plaats en tijd als variabelen. Ψ^2 is de kans dat het deeltje op tijdstip t op plaats x is.



Erwin Schrödinger



Max Born

De Schrödingervergelijking

De basis van de Schrödingervergelijking is de wet van behoud van energie. Een kwantumdeeltje heeft **kinetische energie** ten gevolge van zijn snelheid (zijn impuls), en **potentiële energie** ten gevolge van zijn plaats. Potentiële energie wordt veroorzaakt door krachten op het deeltje. Denk bijvoorbeeld aan elektrische aantrekking en afstoting bij een elektron. Het symbool V wordt gebruikt voor de potentiële energie. Zwaarte-energie en veerenergie zijn voorbeelden van potentiële energie, want beide energiesoorten zijn afhankelijk van de plaats. De totale energie van een voorwerp is de som van de kinetische energie (snelheids-energie) en de potentiële energie (plaatsenergie).

We beperken ons tot één richting waarbij de potentiële energie V niet in de tijd verandert. In dat geval zegt het voorschrift van Schrödinger dat je een functie Ψ moet vinden die aan de volgende vergelijking voldoet.

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V \cdot \Psi = E \cdot \Psi$$

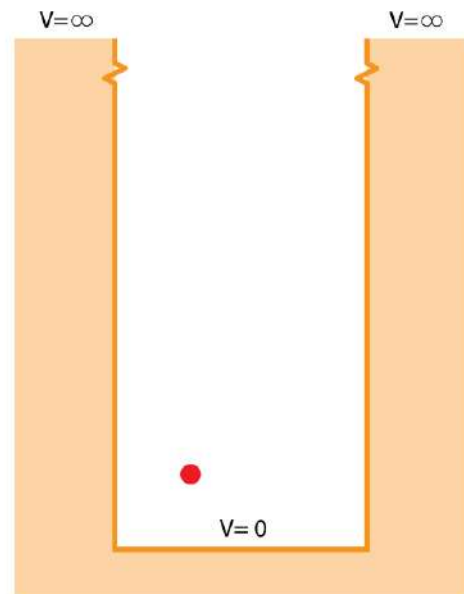
- h is de constante van Planck $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- m is de massa van het deeltje in kilogram (kg)
- Ψ is de golffunctie en is afhankelijk van de plaats
- V is de potentiële energie en is constant in de tijd
- E is de energie van het deeltje

Omdat V constant is, verandert Ψ^2 niet in de tijd. Het kwantumdeeltje bevindt zich in een stationaire (tijdonafhankelijke) toestand. Er zijn maar enkele gevallen waarin het lukt om een functie Ψ te vinden die precies aan dit voorschrift voldoet. In alle andere gevallen heb je een computer nodig om een functie te vinden die bij benadering overeenkomt met de werkelijke golffunctie. Er zijn maar drie gevallen waarbij de Schrödingervergelijking zonder computer exact kan worden opgelost. Het eerste geval is een deeltje in een oneindig diepe energieput. Het tweede geval is een kwantumdeeltje dat een harmonische trilling uitvoert. En het derde geval is een elektrisch geladen deeltje dat is verbonden met een veel zwaarder deeltje met tegenovergestelde lading. Dit is de situatie bij een waterstofatoom. In de volgende drie paragrafen ga ik deze drie gevallen behandelen.

17.5 Kwantumdeeltje in een energieput

Kwantumdeeltje in een oneindig diepe energieput

We bekijken een kwantumdeeltje in een put met oneindig hoge wanden. Om uit de put te ontsnappen heeft het deeltje oneindig veel energie nodig en is daarom onmogelijk. Behalve de begrenzing door de put leggen we verder geen beperkingen op. Het deeltje wordt volledig vrijgelaten. Er werken geen krachten op het deeltje, zodat de potentiële energie in de put nul is. Buiten de put is de potentiële energie oneindig groot. In figuur 23 is deze situatie weergegeven.



Figuur 23 Een kwantumdeeltje in een oneindig diepe energieput. In de put $V = 0$ en buiten de put $V =$ oneindig.

Als we voor deze situatie de Schrödingervergelijking oplossen vinden we dat de golflengte van het kwantumdeeltje niet iedere waarde kan hebben. Voor de golflengte moet gelden:

$$\lambda = \frac{2 \cdot L}{n} \quad \text{met } n = 1, 2, 3, \dots$$

- λ is de golflengte van het kwantumdeeltje in meter (m)
- L is de afmeting van de put in meter (m)
- n is het kwantumgetal: $n = 1, 2, 3, \dots$ (geen eenheid)

Er is een natuurlijk getal n dat loopt van 1 tot oneindig. Dit getal heet het **kwantumgetal**. Ook als je de Schrödingervergelijking oplost voor meer ingewikkelde gevallen vind je altijd één of meer kwantumgetallen. Een kwantumdeeltje in een oneindig diepe energieput heeft een maximale golflengte bij $n = 1$ die twee keer de lengte van de put is.

Omdat de energie afhankelijk is van de golflengte van Ψ heeft het kwantumdeeltje een serie van mogelijke energiewaarden. De toestand met laagst mogelijke energie noem je de **grondtoestand**. De energie neemt daarna met sprongen toe. Het zijn deze sprongen in energie die de toevoeging "kwantum" in kwantumdeeltje verklaart.

In een oneindig diepe energieput heeft een kwantumdeeltje een minimale hoeveelheid energie. De energie neemt met sprongen toe. Tussengeschieden energiewaarden zijn niet mogelijk.

De energie van het kwantumdeeltje kan alleen de volgende waarden aannemen:

$$E = n^2 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2} \quad \text{met } n = 1, 2, 3, \dots$$

- E is de energie van het deeltje in joule (J)
- n is het kwantumgetal: $n = 1, 2, 3, \dots$ (geen eenheid)
- h is de constante van Planck: $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- m is de massa van het deeltje in kilogram (kg)
- L is de afmeting van de put in meter (m)

In de tabel hiernaast vind je voor $n = 1$ t/m $n = 5$ de golflengte en de energie van het kwantumdeeltje. De energie heeft een minimale waarde voor $n = 1$. Deze minimale energie heet de **nulpuntsenergie**. In figuur 24 zie je een illustratie van de energieput met de energie van $n = 1$ t/m $n = 4$.

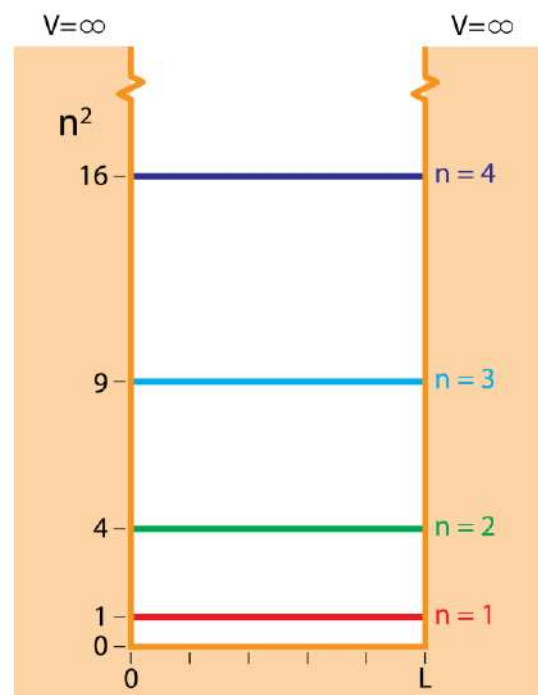
n	$\lambda \text{ (m)}$	$E \text{ (J)}$
$n=1$	$\lambda_1 = \frac{2 \cdot L}{1}$	$E_1 = 1 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2}$
$n=2$	$\lambda_2 = \frac{2 \cdot L}{2}$	$E_2 = 4 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2}$
$n=3$	$\lambda_3 = \frac{2 \cdot L}{3}$	$E_3 = 9 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2}$
$n=4$	$\lambda_4 = \frac{2 \cdot L}{4}$	$E_4 = 16 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2}$
$n=5$	$\lambda_5 = \frac{2 \cdot L}{5}$	$E_5 = 25 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2}$

Energie opnemen en afstaan

Een deeltje in een energieput kan slechts bepaalde hoeveelheden energie opnemen of afstaan. Alleen sprongen tussen de verschillende energieniveaus zijn mogelijk. Begint het deeltje in niveau n_{begin} en eindigt het in n_{eind} dan geldt voor de energie van deze sprong: $\Delta E = E_{\text{eind}} - E_{\text{begin}}$. Dit geeft:

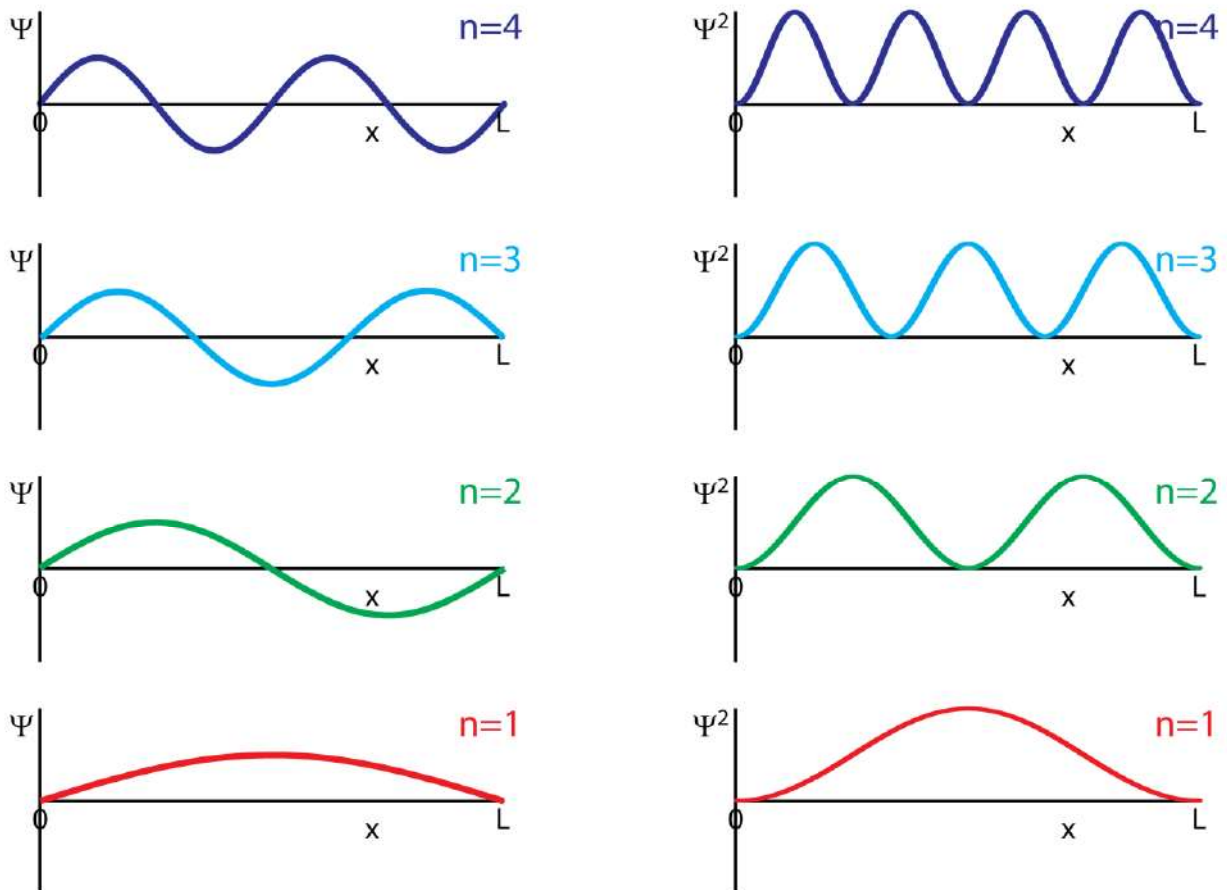
$$\Delta E = (n_{\text{eind}}^2 - n_{\text{begin}}^2) \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2}$$

Figuur 24 Energiewaarden van een kwantumdeeltje in een oneindig diepe energieput.



De golf functie van een deeltje in een oneindig diepe energieput

Voor een kwantumdeeltje in een oneindig diepe energieput zijn de golf functies sinus-vormig. Het zijn dezelfde functies als die van **staande golven in een aan twee kanten vastgemaakte snaar**. In het hoofdstuk golven zagen we dat er een grondtoon is en boventonen, en nu zien we hetzelfde. De grondtoon heet nu de grondtoestand en de boventonen heten nu de **aangeslagen toestanden**, maar het idee is hetzelfde. Je moet je wel realiseren dat dit alleen zo is bij een deeltje in een oneindig diepe energieput. In alle andere gevallen is het veel ingewikkelder. In figuur 25 zie je de golf functies van Ψ_1 t/m Ψ_4 en de kansverdelingen Ψ_1^2 t/m Ψ_4^2 .



Figuur 25 Golf functies Ψ en kansverdelingen Ψ^2 van een deeltje in een oneindig diepe energieput met lengte L .

Bij staande golven zijn knopen de plaatsen waar de amplitude nul is en buiken de plaatsen waar de amplitude maximaal is. Voor de golf functies zijn knopen de plaatsen waar de kans om een deeltje aan te treffen nul is en buiken de plaatsen waar de kans om een deeltje aan te treffen maximaal is. Kwantumgetal n is gelijk aan het aantal buiken van de golf functie. We vinden het volgende:

$n=1$	Ψ_1	K-B-K
$n=2$	Ψ_2	K-B-K-B-K
$n=3$	Ψ_3	K-B-K-B-K-B-K
$n=4$	Ψ_4	K-B-K-B-K-B-K-B-K

De afmeting van de put en de massa van het deeltje

Door goed naar de formules voor de energie in een oneindig diepe energieput kijken kunnen we het volgende concluderen:

– invloed van de afmeting van de energieput –

Wordt de put groter dan neemt L toe en worden alle beschikbare energiewaarden kleiner. De afstand tussen de energieën wordt ook kleiner. Bij een grote put is de afstand tussen de energieën zo klein dat ze niet meer van elkaar zijn te onderscheiden. Kwantisatie van de energie is er nog wel maar kan niet meer worden waargenomen.

Als de ruimte groot is worden de afstanden tussen de beschikbare energiewaarden zo klein dat de kwantisatie niet meer waarneembaar is.

– invloed van de massa –

In een energieput is de energie omgekeerd evenredig met de massa. Het groter worden van de massa geeft hetzelfde effect als het groter worden van de ruimte. Wordt de massa groter, dan worden alle beschikbare energiewaarden en de afstand tussen de energieën kleiner. Bij een zwaar deeltje is de afstand tussen de energieën zo klein dat ze niet meer van elkaar te onderscheiden zijn.

Als de massa groot is worden de afstanden tussen de beschikbare energiewaarden zo klein dat de kwantisatie niet meer waarneembaar is.

– deeltje in een toestand met veel energie (grote waarde van n) –

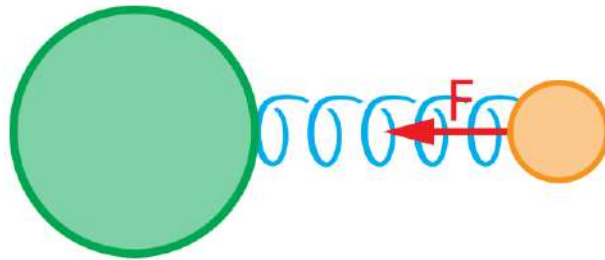
Zoals je in figuur 25 ziet wordt de kans om een deeltje aan te treffen gelijkmatiger naarmate de energie toeneemt. De afstand tussen plaatsen waar het deeltje nooit komt wordt steeds kleiner. Bij veel energie wordt deze afstand zo klein dat deze plaatsen niet meer van elkaar te onderscheiden zijn. Is de energie erg groot dan is de kans om het deeltje waar te nemen overal even groot. Buiken en knopen zijn wel aanwezig maar zijn niet meer waarneembaar.

Als de energie groot is wordt de afstand tussen de knopen en buiken zo klein dat kwantisatie niet meer waarneembaar is.

17.6 Harmonische oscillator

Harmonische oscillator

In figuur 26 is een kwantumdeeltje (rechts) verbonden met een veel groter deeltje (links). Voor het kwantumdeeltje gaan we de Schrödingervergelijking oplossen. Het grote deeltje beschouwen we als stilstaand. Dit is bijvoorbeeld het geval bij een H₂O molecuul, waarbij de twee protonen zijn gebonden aan het veel zwaardere zuurstofatoom. De kracht bij een ééndimensionale harmonische oscillator is recht-evenredig met de uitwijking: $F_{\text{veer}} = -C \cdot u$.



Figuur 26 Kracht bij een harmonische oscillator.

Voor de veerenergie geldt $E_{\text{veer}} = \frac{1}{2}C \cdot u^2$, wat een parabolische (E, u)-grafiek oplevert. Dit gaan we invullen in de Schrödingervergelijking, waarbij we x gebruiken in plaats van u.

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2}C \cdot x^2 \cdot \Psi = E \cdot \Psi$$

- h is de constante van Planck: $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- m is de massa van het deeltje in kilogram (kg)
- Ψ is de golf functie en is afhankelijk van de plaats x
- C is de evenredigheidsconstante tussen de kracht en de uitwijking (N/m)
- E is de energie van het deeltje (J)

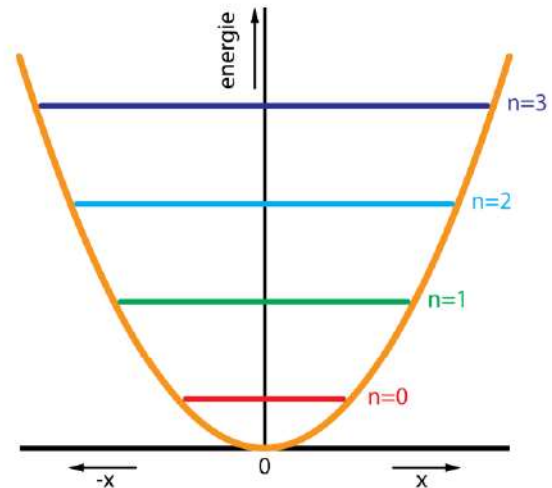
Door deze vergelijking op te lossen vind je de energiewaarden en de golf functies van het kwantumdeeltje. Als resultaat krijgen we opnieuw een reeks van energiewaarden en in dit geval is de afstand tussen de energieniveaus steeds hetzelfde. Zie figuur 27.

Voor **de energie van een harmonisch gebonden kwantumdeeltje** geldt:

$$E = (n + \frac{1}{2}) \cdot h \cdot f \quad \text{met } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

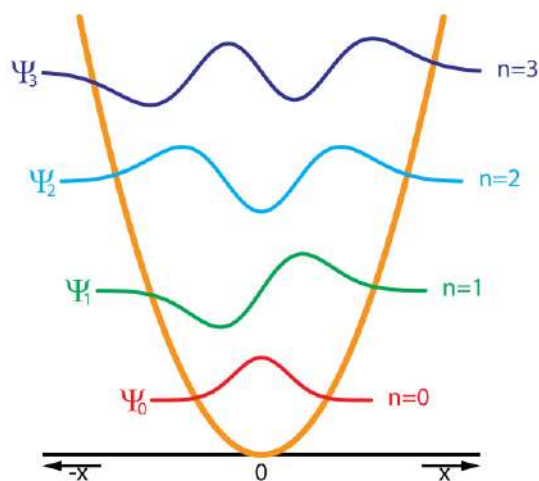
- E is de energie van het deeltje in joule (J)
- n is het kwantumgetal: $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ (geen eenheid)
- h is de constante van Planck: $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- f is de frequentie van het oscillerende deeltje in Hertz (Hz)

Figuur 27 Het kwadratisch verband tussen u en E_{veer} geeft een parabolische grafiek voor de potentiële energie (oranje). De toegestane energiewaarden voor $n=0$ t/m $n=3$ zijn aangegeven.

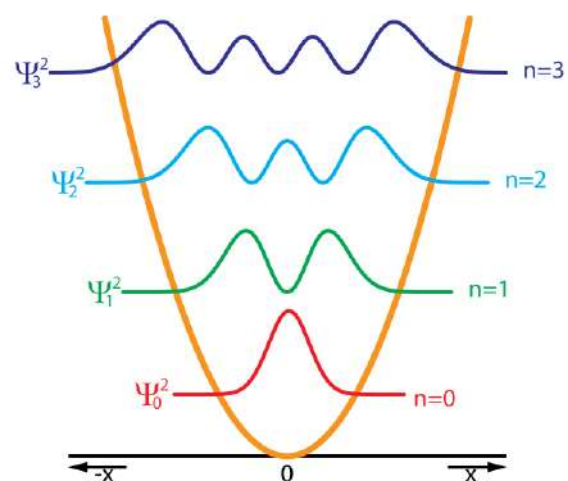


Golffuncties van een harmonische oscillator

De golffuncties Ψ van een harmonische oscillator zie je in figuur 28 voor $n = 0$ t/m $n = 3$. De golffuncties zijn getekend op de hoogte van de bijbehorende energie. Het zijn oscillerende functies, maar ze zijn niet sinusvormig. In figuur 29 zie je de kansverdeling Ψ^2 , opnieuw getekend op de hoogte van de bijbehorende energie. Er zijn plaatsen waar de kans om het deeltje aan te treffen groot is (buiken) en plaatsen waar de kans nul is (knopen). Als n met één toeneemt komt er één knoop en één buik bij. Verder valt het op dat de golffuncties een beetje doorlopen buiten de potentiële energie grafiek (oranje). Dit komt door het tunneleffect, waar je later meer over leert.



Figuur 28 Harmonische oscillator golffuncties Ψ .



Figuur 29 Harmonische oscillator kansverdeling Ψ^2 .

Nulpuntsenergie

Het valt op dat de energie van het kwantumdeeltje een minimale waarde heeft $E_0 = \frac{1}{2} h \cdot f$. De energie van het kwantumdeeltje is dus altijd groter dan nul, ook bij een temperatuur van nul kelvin.

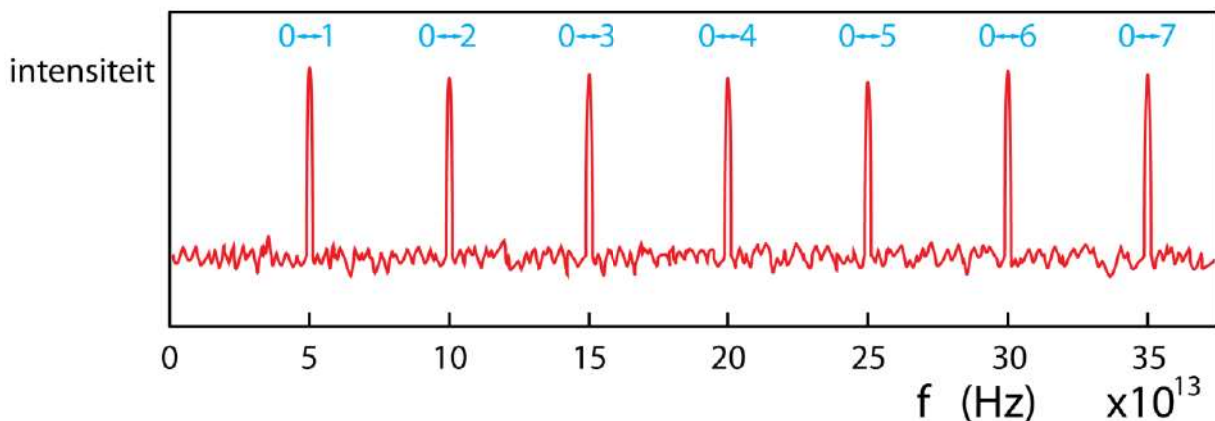
In de grondtoestand is de energie $E_0 = \frac{1}{2} h \cdot f$.

Energie opnemen en afstaan

Nu we de toegestane energiewaarden weten kunnen we uitrekenen hoeveel energie er opgenomen of afgestaan wordt als het atoom een overgang maakt tussen twee energieniveaus. We vinden $\Delta E = (n_{\text{eind}} - n_{\text{begin}}) \cdot h \cdot f$

Een vibratiespectrum, bijvoorbeeld verkregen met Raman spectroscopie, bestaat uit pieken met een vaste energieafstand van $h \cdot f$. Zie figuur 30. Dit is precies gelijk aan de energie van één foton. Zoals we eerder zagen heeft Max Planck licht opgevat als deeltjes met energie $E_{\text{foton}} = h \cdot f$. De overeenkomst is niet toevallig, maar daar ga ik het verder niet over hebben.

Een molecuul met een eigenfrequentie van $f = 5,0 \cdot 10^{13}$ Hz geeft het vibratiespectrum van figuur 30. Op de horizontale as staat de frequentie en op de verticale as de intensiteit. Bij het weergeven van een vibratiespectrum is het gebruikelijk om op de horizontale as niet de frequentie maar $1/\lambda$ (het golfgetal) uit te zetten. $c = f \cdot \lambda \rightarrow 1/\lambda = f/c$, en er is dus een recht evenredig verband tussen $1/\lambda$ en f .



Figuur 30 Vibratiespectrum verkregen met Raman spectroscopie.

17.7 Het waterstofatoom

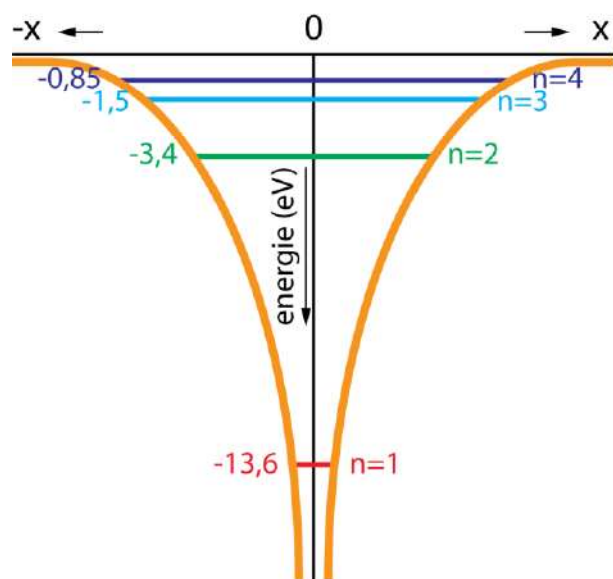
Het waterstofatoom

Het waterstofatoom bestaat uit één proton en één elektron en is het eenvoudigste atoom. De massa van het proton is 1836 keer groter dan de massa van het elektron. Kwantummechanische effecten manifesteren zich vooral in het gedrag van het elektron. Omdat het proton een positieve en het elektron een negatieve elektrische lading heeft trekken ze elkaar aan. De aantrekkende kracht wordt gegeven door de **wet van Coulomb**:

$$F_{\text{el}} = f \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r^2} \quad \text{met} \quad f = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

- f is een vast getal $f = 8,98755 \cdot 10^9 \text{ N m}^2 \text{ C}^{-2}$
- q is de ladingen van een deeltjes in coulomb (C)
- r is de afstand tussen de deeltjes in meter (m)
- ϵ_0 is de elektrische permittiviteit van vacuüm: $\epsilon_0 = 8,8542 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$

De potentiële energie $V = -e^2 / 4\pi\epsilon_0 \cdot r$ heeft een negatieve waarde en gaat naar nul als de afstand tussen het proton en het elektron oneindig wordt. In de buurt van het proton zit het elektron in een energieput met negatieve energie. Hoe groter de afstand is hoe kleiner de kracht en daarmee hoe minder negatief de energie. Op oneindig grote afstand is het elektron vrij en is zijn potentiële energie nul. In figuur 31 is de potentiële energie van het elektron getekend als functie van de afstand tot het proton. We kijken alleen in de x-richting, maar voor de andere richtingen geldt hetzelfde.



Figuur 31 De energie van het waterstofatoom voor $n=1$ t/m $n=4$.

Omdat het elektron is gevangen in een energieput neemt zijn energie in stappen toe. Onderin is de ruimte klein wat grote stappen oplevert. Bovenin is er meer ruimte en zijn de energiestappen kleiner. Als het elektron loskomt van het proton is er geen beperking meer, waardoor hij iedere energiewaarde kan krijgen.

De energie van het waterstofatoom

De Schrödingervergelijking geeft de volgende oplossing voor de energiewaarden van een waterstofatoom:

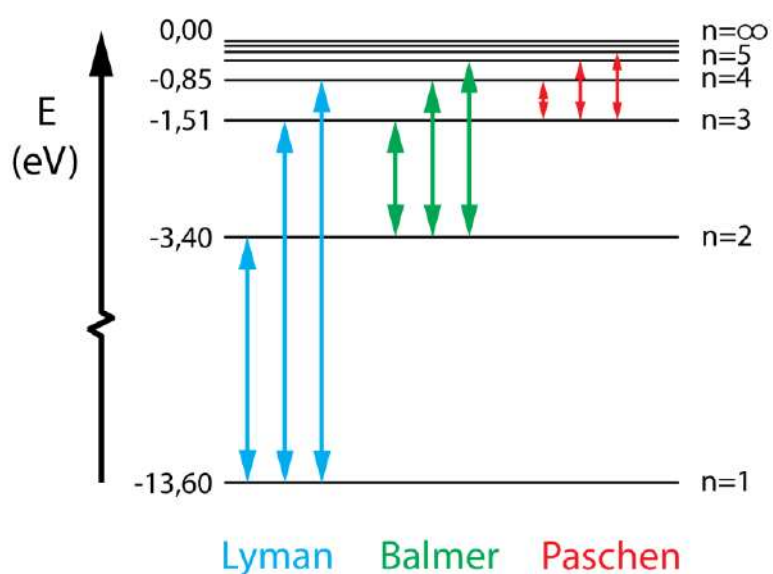
$$E = -\frac{1}{n^2} \left(\frac{m \cdot e^4}{8\epsilon_0^2 \cdot h^2} \right) \quad \text{met } n=1, 2, 3, \dots$$

In figuur 31 zie je de toegestane energieniveaus. De laagste energiewaarde is E_1 en hoort bij kwantumgetal $n=1$. Daarboven liggen de energieniveaus E_2, E_3, E_4 , etc. die horen bij $n=2, n=3, n=4, \dots$. De factor $m e^4 / 8 \epsilon_0^2 \cdot h^2$ heeft de waarde $2,17896 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ wat gelijk is aan 13,60 eV. Vullen we dit in dan krijgen we voor de energiewaarden van het waterstofatoom:

$$E = -\frac{13,60 \text{ eV}}{n^2} \quad \text{met } n=1, 2, 3, \dots$$

In onderstaande tabel vind je de energie van de eerste tien niveaus. De overeenstemming met de experimentele waarden is verbluffend goed. In figuur 32 zie je een vereenvoudigd energieniveau-schema van het waterstofatoom.

n	atoomstraal (nm)	energie (eV)	$E_n - E_1$ (eV)
1	0,052918	-13,6057	0
2	0,21167	-3,4014	10,2043
3	0,47626	-1,5117	12,0939
4	0,84668	-0,8504	12,7553
5	1,3229	-0,5442	13,0615
6	1,9050	-0,3779	13,2278
7	2,5930	-0,2777	13,3280
8	3,3867	-0,2126	13,3931
9	4,2863	-0,1680	13,4377
10	5,2918	-0,1361	13,4696



Figuur 32 Energieniveaus van een waterstofatoom.

Energie opnemen en afstaan

Nu we energiewaarden van een waterstofatoom weten kunnen we uitrekenen hoeveel energie er opgenomen of afgestaan wordt als het atoom een overgang maakt tussen twee energieniveaus. We vinden:

$$\Delta E = \left(\frac{1}{n_{\text{begin}}^2} - \frac{1}{n_{\text{eind}}^2} \right) \cdot 13,60 \text{ eV}$$

Er zijn drie bekende reeksen met lijnen in het absorptiespectrum van waterstof: de Lyman reeks (figuur 32 blauw), de Balmer reeks (figuur 32 groen) en de Paschen reeks (figuur 32 rood), genoemd naar hun ontdekkers. De Lyman reeks bevindt zich in het ultraviolette gebied van het spectrum, de Balmer reeks in het zichtbare gebied en de Paschen reeks in het infrarode gebied.

Bij lichtabsorptie in de Balmer reeks wordt een elektron uit de $n=2$ naar de $n=3$, $n=4$, $n=5$, $n=6$, $\dots$ schil gebracht. De energieverschillen bij deze overgangen zijn:

$$\Delta E_{2 \rightarrow 3} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right) \cdot 13,60 \text{ eV} = 1,889 \text{ eV} \rightarrow \lambda = 656 \text{ nm}$$

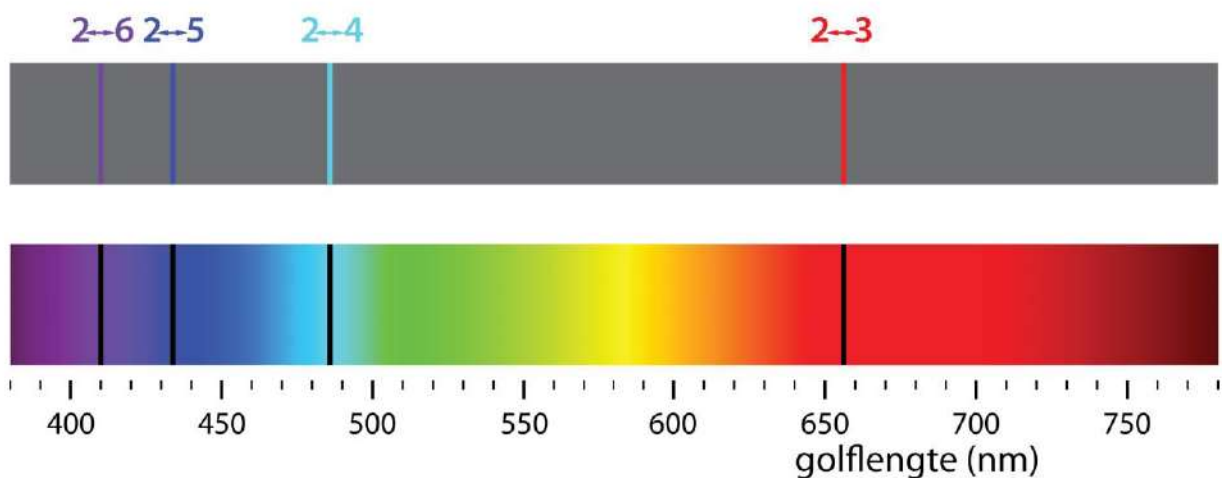
$$\Delta E_{2 \rightarrow 4} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{16} \right) \cdot 13,60 \text{ eV} = 2,550 \text{ eV} \rightarrow \lambda = 486 \text{ nm}$$

$$\Delta E_{2 \rightarrow 5} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{25} \right) \cdot 13,60 \text{ eV} = 2,856 \text{ eV} \rightarrow \lambda = 434 \text{ nm}$$

$$\Delta E_{2 \rightarrow 6} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{36} \right) \cdot 13,60 \text{ eV} = 3,022 \text{ eV} \rightarrow \lambda = 410 \text{ nm}$$

$$\Delta E_{2 \rightarrow 7} = \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{49} \right) \cdot 13,60 \text{ eV} = 3,122 \text{ eV} \rightarrow \lambda = 397 \text{ nm}$$

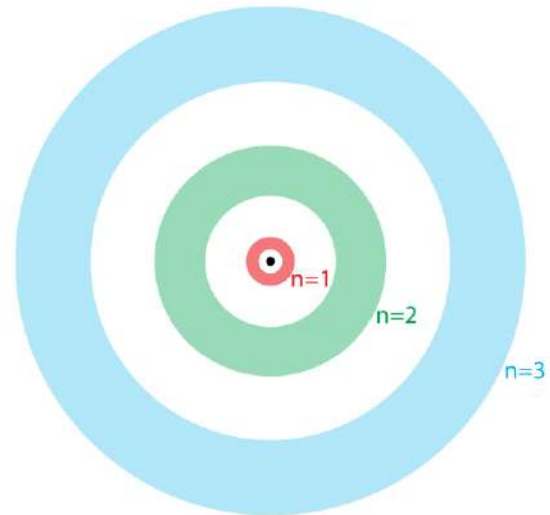
Deze theoretische waarden komen exact overeen met de experimenteel bepaalde golflengten. Zie figuur 33. Deze zeer goede overeenstemming is een sterk bewijs voor de geldigheid van de kwantummechanica.



Figuur 33 Waterstofspectrum met toekenning van de emissielijnen (boven) en absorptielijnen (onder).

Golffuncties van het waterstofatoom

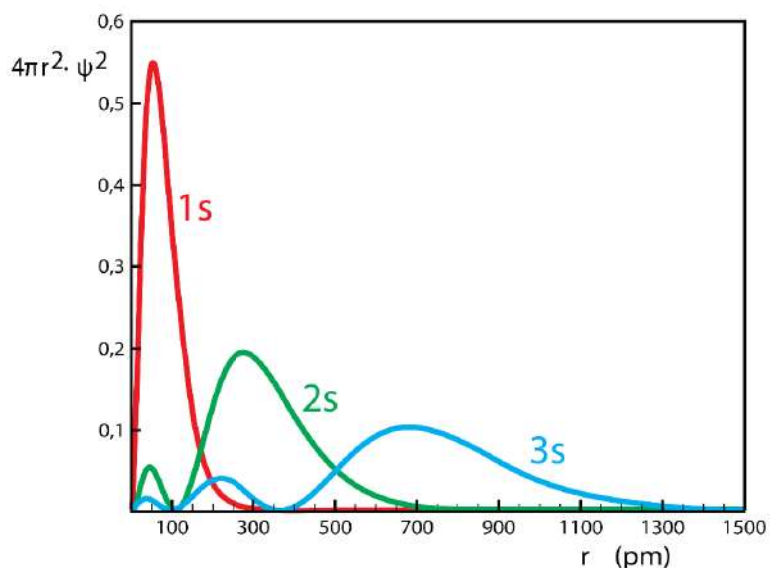
Omdat de energie niet afhankelijk is van de richting zijn de golffuncties bolvormig. In figuur 34 zie je dat de kans om een elektron aan te treffen schillen vormen om het proton. In het midden bevindt zich het proton (zwarte stip). De schil met $n=1$ (rood) heeft de laagste energie en noem je de grondtoestand. De kans om het elektron aan te treffen is in deze schil het grootst op een afstand van $5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ (52,9 pm) van het proton. Deze afstand is de "atoomstraal" van het H-atoom in zijn grondtoestand en wordt de **Bohrstraal** genoemd.



Figuur 34

Bohrstraal: $a_0 = 5,2917721 \cdot 10^{-11} \text{ m}$.

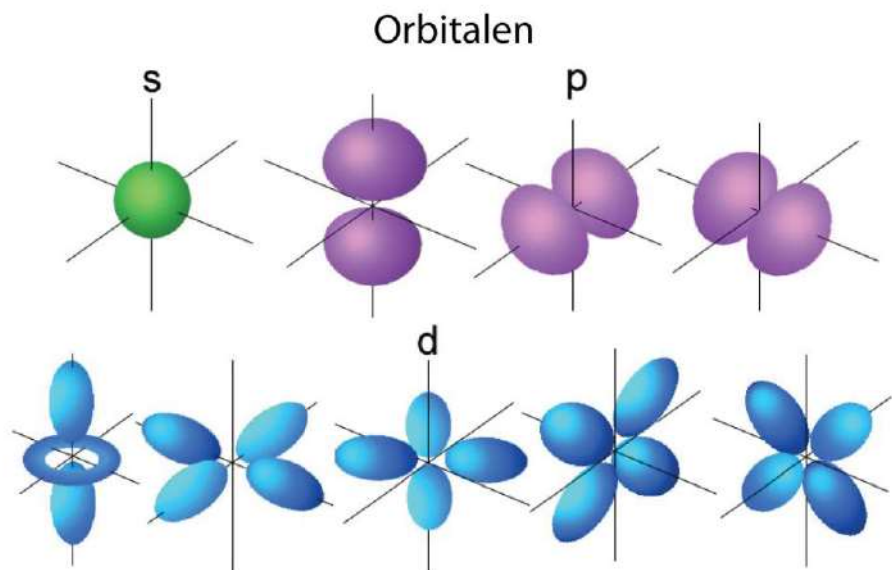
Bij de schil met $n=2$ (groen) is de kans om het elektron aan te treffen het grootst op 270 pm van het proton ($\approx 5 \cdot a_0$) en in de schil met $n=3$ (blauw) is de kans het grootst op 650 pm van het proton ($\approx 12 \cdot a_0$). Als we de kansverdeling $4\pi r^2 \psi^2$ uitzetten als functie van de afstand r krijgen we figuur 35. Let maar even niet op wat er precies op de verticale as staat. Je ziet dat de kans in de 1s schil ($n=1$, rood) een maximum heeft bij 52,9 pm. De kans in de 2s schil ($n=2$, groen) is meer uitgesmeerd en heeft een maximum bij 270 pm. De kans in de 3s schil ($n=3$, blauw) is heel erg uitgesmeerd en heeft een maximum bij 650 pm. Je kunt dus niet zeggen dat een elektron een vaste afstand tot de atoomkern heeft. Zo werkt de kwantummechanica niet. Je doet metingen en daarmee kun je bepalen wat de kans is om een elektron op een bepaalde afstand aan te treffen. In de grondtoestand is de kans het grootst op een afstand van 52,9 pm, maar dat wil niet zeggen dat het elektron zich altijd op die afstand bevindt. Vandaar dat ik het woord "atoomstraal" tussen haakjes heb gezet, want een atoom is niet een klein balletje.



Figuur 35 ψ^2 van de schillen van het H-atoom voor $n=1$, $n=2$ en $n=3$.

Bij het H-atoom heeft de $n=1$ toestand maar één golffunctie Ψ_1 , maar voor $n=2$, $n=3$, etc. is het aantal golffuncties met dezelfde energie gelijk aan n^2 . Voor $n=2$ zijn er vier golffuncties en voor $n=3$ zijn er negen, etc. De golffuncties worden **orbitalen** genoemd. Het kwadraat hiervan geeft de kansverdelingen van de elektronen om de atoomkern. Hieronder vind je een overzicht van de H-orbitalen voor $n=1$ t/m $n=3$. De letters s, p en d worden gebruikt om de vorm van de kansverdelingen (orbitalen) aan te geven. De s-orbitalen zijn bolvormig, de p-orbitalen en d-orbitalen hebben vreemde vormen. Zie figuur 36.

n = 1	→	1s								
n = 2	→	2s	2p₁	2p₂	2p₃					
n = 3	→	3s	3p₁	3p₂	3p₃	3d₁	3d₂	3d₃	3d₄	3d₅



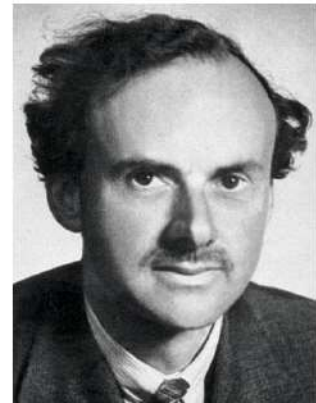
Figuur 36 Vorm van s-, p- en d orbitalen

17.8 Spin

In 1924 bedenkt **Wolfgang Pauli** (1900 – 1958) dat het elektron behalve massa, plaats, snelheid en lading nog een andere eigenschap moet hebben. Een jaar later in 1925 wordt aan de Universiteit van Leiden deze nieuwe eigenschap gevonden en krijgt het de naam "**spin**". Waarom het elektron spin heeft wordt pas duidelijk in 1928, als **Paul Dirac** (1902 – 1984) de kwantummechanica combineert met de relativiteitstheorie.



Wolfgang Pauli

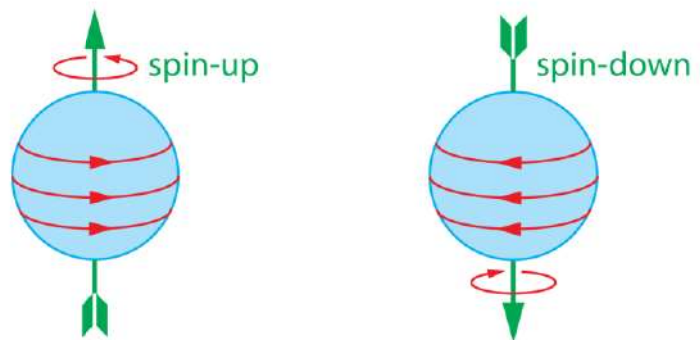


Paul Dirac

De spin van het elektron

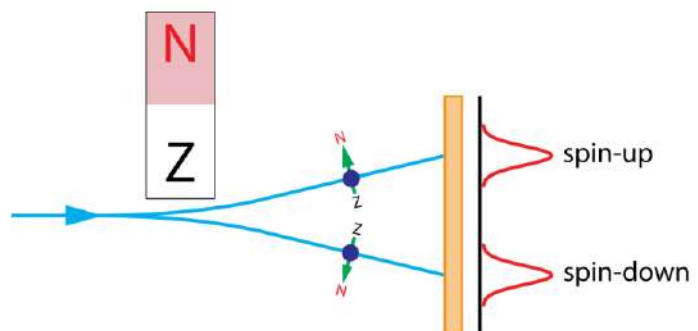
Wat je tot nu toe hebt geleerd is nog niet genoeg om het gedrag van kwantumdeeltjes te kunnen beschrijven. Er is nog één eigenschap en dat is het **magnetisme**. Naast elektrische krachten spelen ook magnetische krachten een rol. De oorzaak van dit magnetisme is gecompliceerd, maar met een beetje fantasie kun je je voorstellen dat een kwantumdeeltje om zijn eigen as draait. In het Engels heet om je as draaien "to spin" en vandaar dat we spreken over de **spin** van een deeltje. Bedenk wel dat een kwantumdeeltje niet echt om zijn as draait. Het is maar een beeld, want de werkelijkheid is een stuk ingewikkelder.

Gezien vanuit een bepaalde richting kan het elektron twee kanten opdraaien, rechtsonder of linksom. Dit zijn twee verschillende toestanden die we **spin-up** en **spin-down** noemen. Zie figuur 37. Opgevat als kleine magneetjes corresponderen de noordpool en de zuidpool met de richting van de spin.



Figuur 37 Het elektron voorgesteld als rondtollend deeltje.

De effecten van spin zijn duidelijk te merken als elektronen bewegen door een magnetisch veld waarin de veldsterkte varieert. Een elektronenbundel wordt dan gesplitst in twee bundels. Eén bundel buigt omhoog en één bundel buigt omlaag. Zie figuur 38.



Figuur 38 Een elektronenbundel passeert een staafmagneet en wordt hierdoor gesplitst in twee bundels.

Het uitsluitingsprincipe

Het uitsluitingsprincipe is in 1925 door Wolfgang Pauli bedacht en wordt daarom ook wel het **Pauliverbod** genoemd. Het Pauliverbod toegepast op elektronen houdt in dat in iedere orbitaal maximaal twee elektronen passen, één met spin-up en één met spin-down. Passen we het uitsluitingsprincipe toe op de orbitalen van het H-atoom dan vinden we dat er maximaal twee elektronen passen in de schil met $n=1$, acht in de vier orbitalen met $n=2$ en maximaal 18 in de negen orbitalen met $n=3$.

De elementen van het periodieke systeem hebben bij benadering dezelfde golffuncties als het H-atoom. Helium heeft twee elektronen en die passen samen in de 1s orbitaal, die nu helemaal is gevuld. Lithium heeft drie elektronen, waarvan er twee in de 1s orbitaal passen. De derde moet op het energieniveau $n=2$ worden gebracht en komt in de 2s orbitaal. En zo gaat het verder. Neon heeft tien elektronen, waarvan er twee in de 1s orbitaal passen, twee in de 2s orbitaal en zes in de drie 2p orbitalen. Alle orbitalen met $n=2$ zijn nu gevuld. Bij het volgende element (natrium) moet het elfde elektron op het energieniveau $n=3$ worden gebracht en komt in de 3s orbitaal. De verdeling van de elektronen over de orbitalen is de **elektronenconfiguratie**. Voor natrium noteer je dit als: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$.

Het principe dat elektronen in energieniveaus worden geplaatst, waarbij de niveaus met de laagste energie als eerste worden gevuld heet het **aufbau** (opbouw) principe, waarmee de structuur van het periodieke systeem volledig kan worden begrepen. Zie figuur 39.

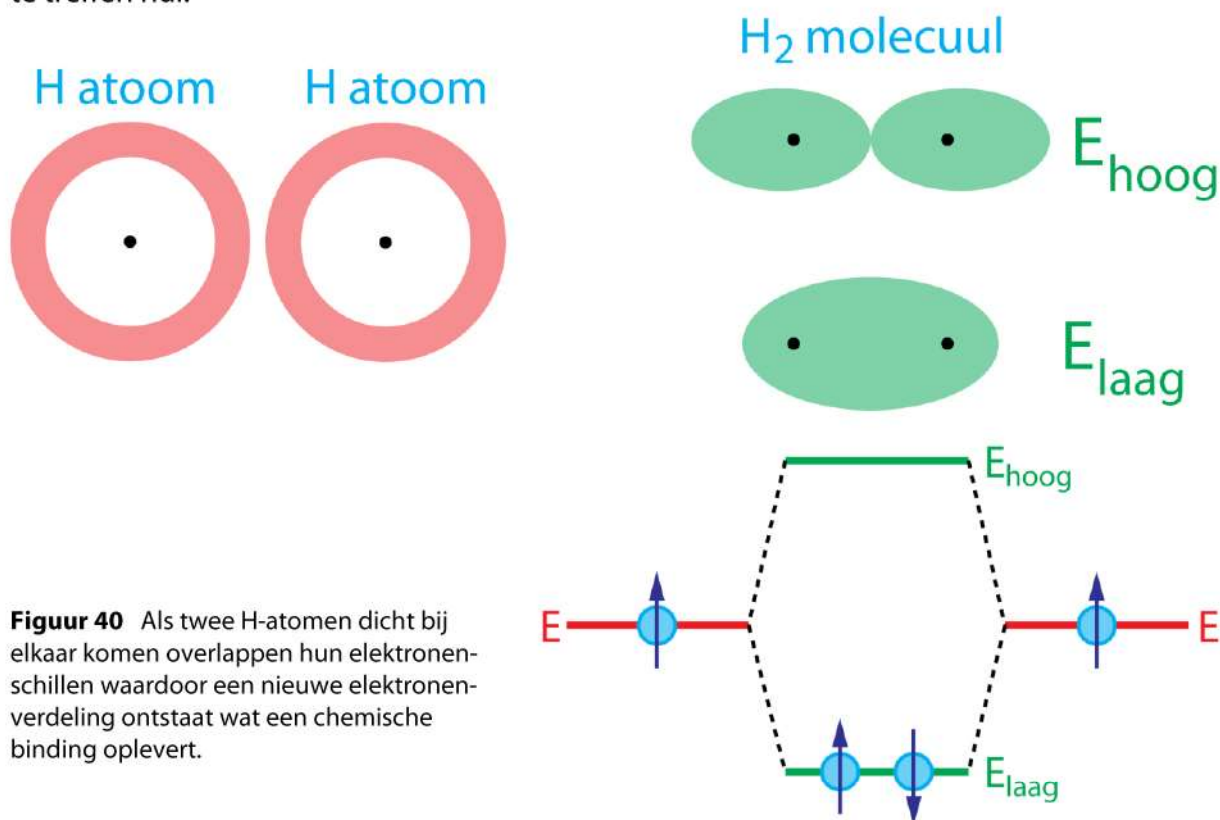
1 H 1s																	2 He 1s
3 Li 2s	4 Be 2s											5 B 2p	6 C 2p	7 N 2p	8 O 2p	9 F 2p	10 Ne 2p
11 Na 3s	12 Mg 3s											13 Al 3p	14 Si 3p	15 P 3p	16 S 3p	17 Cl 3p	18 Ar 3p
19 K 4s	20 Ca 4s	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn 3d	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As 4p	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb 5s	38 Sr 5s	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc 4d	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb 5p	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs 6s	56 Ba 6s	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re 5d	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi 6p	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr 7s	88 Ra 7s	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh 6d	108 Hs	109 Mt	110	111	112	113	114				
58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd 4f	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu				
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm 5f	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr				

Figuur 39
De opbouw van
het periodieke
systeem.

17.9 Moleculen en vaste stoffen

Chemische binding

Als atomen op korte afstand van elkaar komen kunnen ze een chemische binding aangaan en moleculen of vaste stoffen vormen. Chemische binding is gebaseerd op hoe elektronen zich verdelen over de kernen, en om deze verdeling te berekenen heb je kwantummechanica nodig. In figuur 40 zie je links twee losse H-atomen in de grondtoestand, waarbij het elektron zich op gemiddeld 52,9 pm afstand tot de kern bevindt. Als de afstand tussen de H-atomen minder wordt dan grofweg twee keer deze afstand, gaan de golffuncties van de atomen (rood) elkaar overlappen waardoor twee nieuwe golffuncties (groen) ontstaan. Bij één van deze nieuwe golffuncties hoort een lage energie E_{laag} en bij de andere een hoge energie E_{hoog} . De golffunctie met E_{laag} is de grondtoestand van het H_2 molecuul en de golffunctie met E_{hoog} is de eerste aangeslagen toestand. In grondtoestand is de kans om een elektron aan te treffen het grootst midden tussen de atomen, en in de eerste aangeslagen toestand zit midden tussen de atomen een knoop en is de kans om daar een elektron aan te treffen nul.



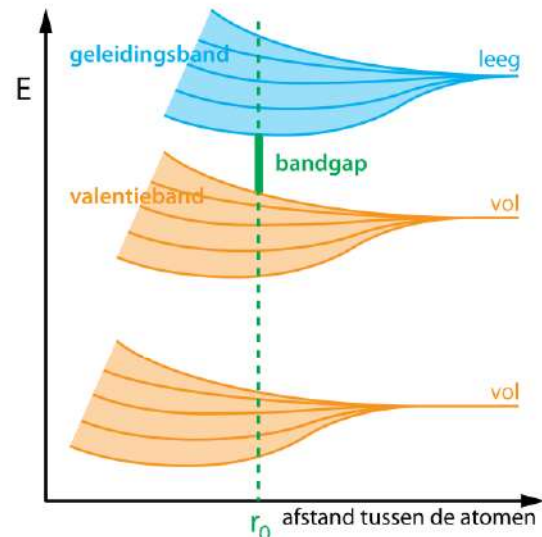
Figuur 40 Als twee H-atomen dicht bij elkaar komen overlappen hun elektronenschillen waardoor een nieuwe elektronenverdeling ontstaat wat een chemische binding oplevert.

Het H_2 molecuul heeft twee elektronen die beide in de E_{laag} orbitaal zitten. Bij één elektron staat de spin omhoog en bij het andere omlaag. Het E_{laag} niveau is helemaal gevuld, want een orbitaal kan hooguit twee elektronen bevatten. Verder zie je dat de energie van de elektronen in het E_{laag} niveau kleiner is dan de energie van de elektronen in het E niveau. Er is een stabiel H_2 -molecuul ontstaan met een **atoombinding** of **covalente binding** tussen de H-atomen. Door de vrijgekomen energie gaat het H_2 molecuul trillen wat warmte veroorzaakt, zodat de vorming van H_2 een **exotherme reactie** is.

Energiebanden

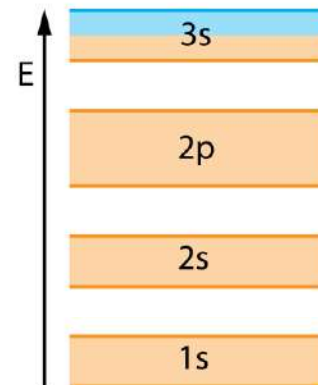
We kunnen natuurlijk ook meer dan twee atomen bij elkaar brengen. Stel dat we 1000 atomen bij elkaar brengen, dan ontstaan er 1000 E_{laag} en 1000 E_{hoog} niveaus. Deze niveaus hebben niet allemaal dezelfde energie. Er is een spreiding in energie, afhankelijk van de soort atomen en hun onderlinge afstanden. Omdat de 1000 niveaus dicht bij elkaar liggen zijn ze niet meer te onderscheiden. We spreken daarom van een **energieband**. Zie figuur 41.

Figuur 41 Vorming van energiebanden.



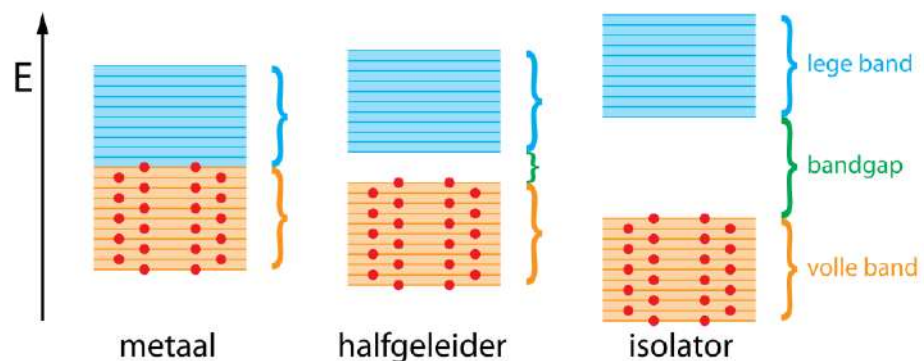
Als voorbeeld kijken we naar natrium. Het atoomnummer van natrium is 11 en er zijn dus 11 elektronen per atoom. Twee in de 1s orbitaal, twee in de 2s orbitaal, zes in de 2p orbitaal en één in de 3s orbitaal. In natrium metaal zijn deze orbitalen gecombineerd tot energiebanden. De 1s, 2s en 2p banden zijn helemaal gevuld. De 3s band is maar voor de helft gevuld, want er passen per atoom twee elektronen in deze band terwijl er maar één 3s elektron per atoom is. Zie figuur 42.

Figuur 42 Energiebanden in natrium metaal.



Vaste stoffen zijn in te delen in drie categorieën: **metalen**, **halfgeleiders** en **isolators**. Ze verschillen van elkaar door de wijze waarop de energiebanden zijn gevuld. Bij een metaal zitten de elektronen met de hoogste energie in een band die NIET volledig is gevuld en bij een halfgeleider en een isolator zitten de elektronen met de hoogste energie in een band die WEL volledig is gevuld. In figuur 43 zie je de verdeling van de elektronen over de banden bij een metaal (links), een halfgeleider (midden) en een isolator (rechts).

Figuur 43 Energiebanden. Links metalen, midden halfgeleiders en rechts isolators.



Bij halfgeleiders en bij isolators is er een energiekloof tussen de volledig gevulde band en de lege band erboven. Deze energiekloof is de **bandkloof** of **bandgap** (Engels). De grootte van de bandkloof bepaalt de elektrische eigenschappen van de stof.

Elektrische geleiders, halfgeleiders en isolators

Hoe goed een vaste stof elektriciteit geleid wordt bepaald door de grootte van de band kloof (bandgap). Elektronen kunnen namelijk alleen bewegen als ze energie kunnen opnemen. Bij halfgeleiders en isolators moeten de elektronen bovenin de volle band een sprong maken naar de lege band. De lege band heet daarom de **geleidingsband**. De volle band heet de **valentieband**.

– metalen –

Bij metalen is er geen bandkloof en kunnen de elektronen bovenin de gedeeltelijk gevulde band energie opnemen om in beweging te komen. Omdat er veel bewegende elektronen zijn kan elektrische lading snel worden verplaatst. Metalen hebben een grote elektrische geleidbaarheid en zijn daarom altijd goede elektrische geleiders. Omdat de bewegende elektronen op een speciale manier licht opnemen en uitzenden hebben metalen ook de kenmerkende metaalglans. Zie figuur 43 links.

– halfgeleiders –

Is de bandkloof niet al te groot, dan lukt het enkele elektronen bovenin de volle band (de valentieband) om genoeg energie op te nemen om de sprong naar de lege band (de geleidingsband) te maken. Deze elektronen zitten nu onderin de geleidingsband en kunnen gaan bewegen. Bovenin de valentieband zijn plaatsen vrijgekomen en deze lege plaatsen heten **elektronengaten** of kortweg **gaten**. Door de aanwezigheid van gaten kunnen elektronen bovenin de valentieband ook energie opnemen om in beweging te komen. Zowel de elektronen onderin de geleidingsband als de gaten bovenin de valentieband dragen bij aan de elektrische geleiding. Stoffen waarbij elektronen van de valentieband naar de geleidingsband kunnen springen heten **halfgeleiders**. Zie figuur 43 midden. Halfgeleiders worden toegepast in NTC-weerstanden, LDR-weerstanden, diodes, LED's, zonnecellen en transistoren. In de volgende paragraaf ga ik hier dieper op in.

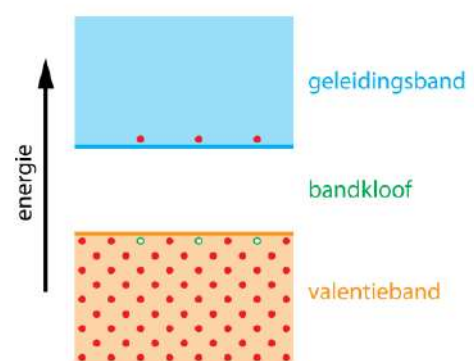
– isolators –

Is de bandkloof te groot, dan lukt het geen enkel elektron om genoeg energie op te nemen om de sprong naar de geleidingsband te maken. Er zijn nu geen elektronen die kunnen bewegen. Stoffen waarbij dit het geval is noem je **isolators**. Zie figuur 43 rechts.

Halfgeleiders

Vanwege de vele technologische toepassingen gaan we halfgeleiders in meer detail bekijken. Halfgeleiders hebben bij een temperatuur van 0 kelvin een volledig gevulde valentieband en een bandkloof tussen 0,5 en 3,0 eV ($1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$). In figuur 44 zie je nogmaals de energiebanden van een halfgeleider.

Is de bandkloof groter is dan 4,0 eV dan heb je te maken met een isolator. In onderstaande tabel vind je een aantal halfgeleiders met hun bandkloof.



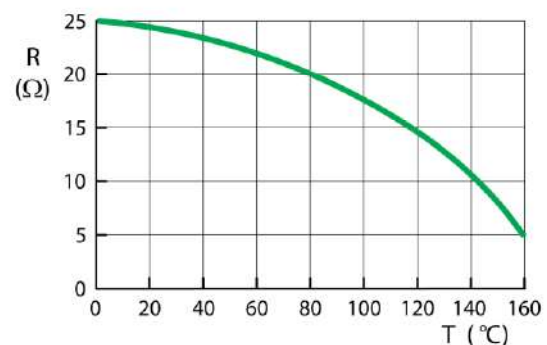
Figuur 44 Energiebanden van een halfgeleider.

materiaal	symbool	bandgap (eV)	materiaal	symbool	bandgap (eV)
diamant	C	5,5	aluminium nitride	AlN	6,3
silicium	Si	1,14	gallium nitride	GaN	3,4
germanium	Ge	0,67	gallium fosfide	GaP	2,26
cadmium sulfide	CdS	2,4	gallium arsenide	GaAs	1,42
cadmium selenide	CdSe	1,7	indium fosfide	InP	1,35
materiaal	symbool	bandgap (eV)	materiaal	symbool	bandgap (eV)
tin oxide	SnO	3,5	titanium dioxide	TiO ₂	3,2
indium oxide	In ₂ O ₃	2,9	zink oxide	ZnO	3,2
wolfram oxide	WO ₃	2,7	ijzer oxide	Fe ₂ O ₃	2,3
lood oxide	PbO	2,6	koper(11) oxide	Cu ₂ O	2,0

– NTC weerstanden –

Elektronen kunnen over de bandkloof springen, maar bij kamertemperatuur is de kans dat dit gebeurt klein. Hoe hoger de temperatuur is, hoe vaker een elektron uit de valentieband naar de geleidingsband springt, waarbij een gat in de valentieband ontstaat. Na een tijdje valt het elektron terug, waarbij het gat verdwijnt. Bij evenwicht springen er per seconde evenveel elektronen naar de geleidingsband als dat er terugvallen.

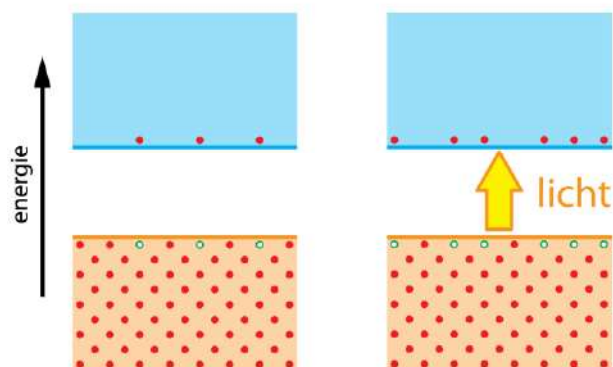
Als de temperatuur toeneemt lukt het elektronen vaker om naar de geleidingsband te springen. Omdat er nu meer elektronen in de geleidingsband en meer gaten in de valentieband zijn gaat de halfgeleider beter geleiden en neemt de soortelijke weerstand af. Als de weerstand afneemt bij een hogere temperatuur is er een **negatieve temperatuurcoëfficiënt**. Weerstanden gemaakt van halfgeleiders worden **NTC-weerstanden** genoemd.



Figuur 45 (R,T)-diagram van een NTC.

– LDR weerstanden –

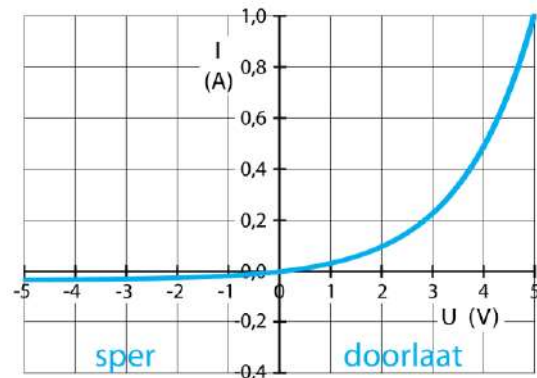
De elektronen- en gatenconcentraties nemen ook toe als je een halfgeleider belicht. Daarbij is het nodig dat het licht fotonen bevat met meer energie dan de bandkloof. Als een elektron bovenin de valentieband een foton opneemt springt het naar de geleidingsband en laat daarbij een gat in de valentieband achter. Belichting geeft dus hetzelfde effect als het stijgen van de temperatuur en veroorzaakt een afname van de weerstand.



Figuur 46 Een halfgeleider in het donker en onder belichting.

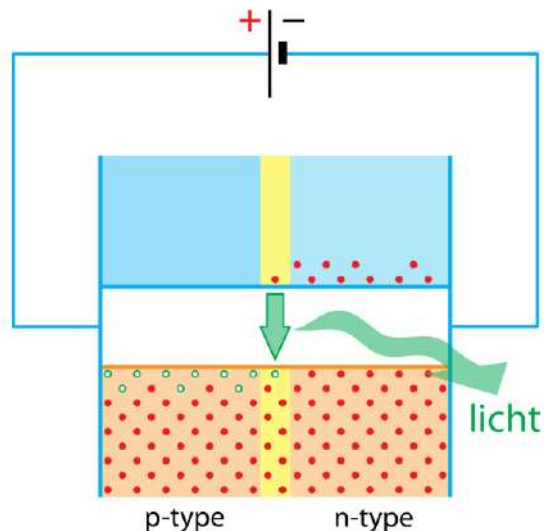
– Licht Emitterende Diodes (LED's) –

Ook diodes en licht emitterende diodes (LED's) worden gemaakt van halfgeleiders. Om te begrijpen hoe het werkt vergt wat meer uitleg en is voor ons niet zo belangrijk. Een diode laat elektrische stroom in één richting door en blokkeert de stroom in de tegengestelde richting. In figuur 47 zie je een (I, U)-diagram van een diode. Bij een positieve spanning loopt er stroom door de diode. Dit is de **doorlaatrichting**. Bij een negatieve spanning loopt er bijna geen stroom door de diode. Dit is de **sperrichting**.



Figuur 47 (I, U)-diagram van een diode.

Diodes worden toegepast als gelijkrichter. In een USB-adapter wordt wisselspanning van 230 V en 50 Hz omgezet naar 5,0 volt gelijkspanning. Nog belangrijker is de toepassing van **licht emitterende diodes (LED's)**. LED-lampen zijn veel efficiënter dan gloeilampen en zelfs efficiënter dan spaarlampen en TL-buizen. Licht opwekken in een LED gaat als volgt. Bij een positieve spanning worden er elektronen geïnjecteerd in de geleidingsband en gaten in de valentieband. Als een elektron een gat tegenkomt springt het van de geleidingsband naar de valentieband, waarbij energie vrijkomt in de vorm van licht.



Figuur 48 Licht emitterende diode (LED).

VOORBEELD afstandsbediening

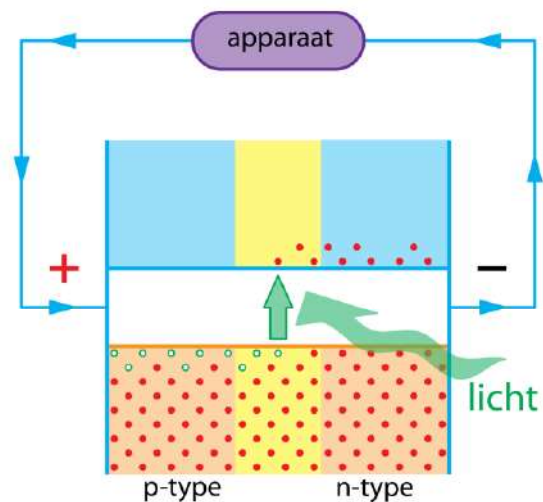
In een afstandsbediening zit een LED die licht uitstraalt met een golflengte van 940 nm. Dit licht wordt opgevangen door een fotodiode gemaakt van silicium. De bandkloof (bandgap) van silicium is 1,12 eV.

Controleer of de uitgestraalde fotonen genoeg energie hebben om in silicium een elektron van de valentie band naar de geleidingsband te exciteren.

- $E = h \cdot f \rightarrow E = h \cdot \frac{c}{\lambda}$
 - $E = 6,62607 \cdot 10^{-34} \cdot \frac{2,99792 \cdot 10^8}{940 \cdot 10^{-9}} = 2,11324 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
 - $E(\text{eV}) = \frac{2,11324 \cdot 10^{-19}}{1,60218 \cdot 10^{-19}} = 1,31898 \text{ eV}$
 - 1,32 eV is meer dan 1,12 eV $\rightarrow$ de fotonen hebben genoeg energie
- MERK OP dat dit onzichtbaar is, want ogen hebben een gevoeligheid tussen 400 nm en 700 nm.**

– Zonnecellen –

In een LED wordt elektrische energie omgezet in licht. Het omgekeerde gebeurt in een zonnecel, waarin licht wordt omgezet in elektrische energie. Om het allemaal te begrijpen is lastig, maar het komt erop neer dat net als bij een LDR-weerstand licht wordt opgenomen, waarbij elektronen van de valentie- naar de geleidingsband worden gebracht. Het licht moet daarbij fotonen bevatten met meer energie dan de bandkloof. De truc is om de elektronen af te tappen uit de geleidingsband, door het apparaat te sturen, en daarna terug te brengen naar de valentieband. Je tapt dus elektronen af met veel energie en brengt ze terug met minder energie. Zie figuur 49.



Figuur 49 Zonnecel.

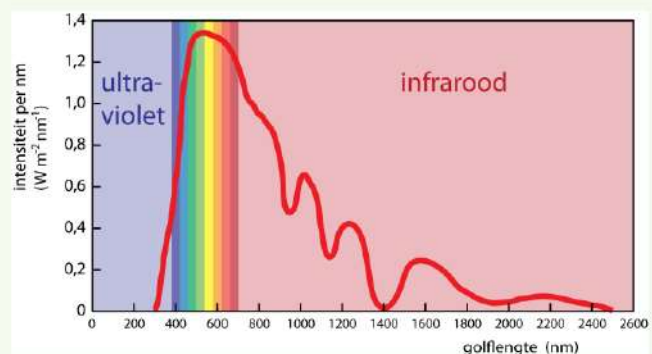
Zonnecellen hebben een rendement van 15% tot 20%. Op een zonnige dag heeft zonlicht een intensiteit van 1000 W/m^2 , waaruit volgt dat een zonnepaneel van 1 m^2 op zo'n dag een vermogen heeft van 150 W tot 200 W. Zonnecellen gaan een steeds belangrijkere rol spelen bij de opwekking van energie. Op dit moment wordt 10% van de elektriciteit in Nederland door zonnecellen opgewekt.



Figuur 50 Zonnepanelen.

VOORBEELD zonnecel

Zonlicht dat het oppervlak van de aarde bereikt heeft een breed spectrum. Zie figuur 51. Om een zonnecel zo efficiënt mogelijk maken mag de bandkloof niet te groot en niet te klein zijn. In het periodieke systeem staan de elementen koolstof, silicium en germanium onder elkaar.



Figuur 51 Spectrum van zonlicht op aarde

De bandkloven van deze stoffen zijn:

diamant (C) 5,5 eV | silicium (Si) 1,14 eV | germanium (Ge) 0,67 eV

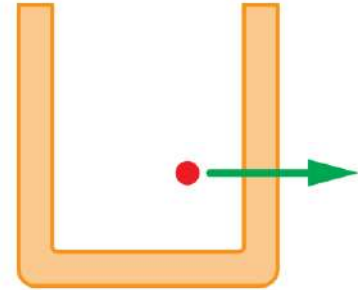
Leg uit welke van deze stoffen het meest geschikt is voor een zonnecel.

- tussen 400 nm en 1000 nm straalt de zon het meeste licht uit
- 400 nm fotonen hebben 3,1 eV energie en 1000 nm fotonen hebben 1,2 eV energie
- de bandkloof van diamant is te groot en die van germanium te klein
- silicium heeft de meest geschikte bandkloof

17.10 Tunnelen

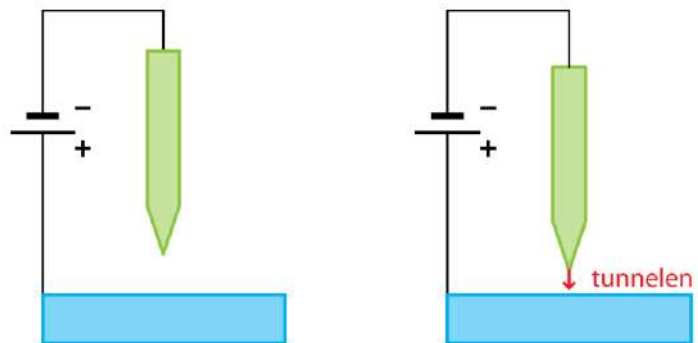
Kwantumdeeltje in een energieput

We zijn al heel wat vreemde dingen tegengekomen in de kwantumwereld en nu komt er nog een bij. Stel we sluiten een kwantumdeeltje op in een doosje waar het niet uit kan ontsnappen omdat het daarvoor te weinig energie heeft. Dan moet het deeltje dus in de doos blijven, maar dat doet het niet altijd. Want als de wand van de doos niet al te dik is kan het door de wand heen ontsnappen. Het lijkt alsof er een geheime tunnel in de wand is, en vandaar dat we dit ontsnappen **tunnelen** noemen. Zie figuur 52.



Figuur 52 Tunnelen

Een gebied waar je energie voor nodig hebt om het te passeren heet een **energiebarrière**. Je kunt je een muur voorstellen waarvoor je zwaarte-energie nodig hebt om er overheen te komen. Bij tunnelen gaat het kwantumdeeltje niet over de energiebarrière maar er dwars doorheen. Laten we kijken naar een voorbeeld. We plaatsen een naald boven een metalen oppervlak. Zie figuur 53. Tussen de naald en het oppervlak leggen we een spanning aan, waarbij de naald negatief is en het oppervlak positief. De elektrische energie is minder dan de uittree-energie en de elektronen kunnen daarom niet overspringen. Als we de naald vlak bij het oppervlak brengen is er nog steeds te weinig elektrische energie, maar elektronen kunnen nu van de naald naar het oppervlak tunnelen. Er gaat een tunnelstroom lopen die kan worden gemeten. Op dit idee is de **scanning tunneling microscoop (STM)** gebaseerd.

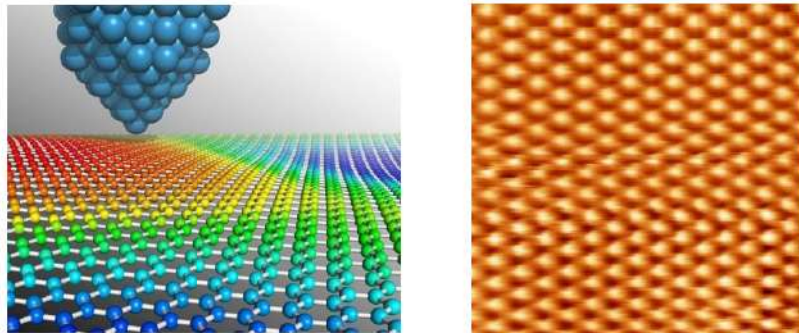


Figuur 53 Scanning Tunneling Microscoop (STM)

Scanning Tunneling Microscoop (STM)

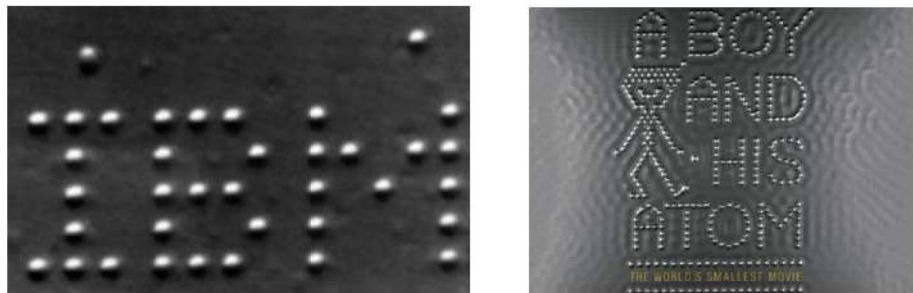
De scanning tunneling microscoop (STM) is rond 1980 ontwikkeld in het laboratorium van IBM in Zurich door Gerd Binnig (Duitsland, 1947) en Heinrich Rohrer (Zwitserland, 1933 – 2013) die hiervoor in 1986 de Nobelprijs hebben gekregen. In een STM wordt een naald langzaam over een oppervlak bewogen. Hierbij wordt de afstand tussen de naald en het oppervlak steeds aangepast, zodat de tunnelstroom constant blijft. De beweging van de naald volgt de structuur van het oppervlak. Omdat het tunnelen sterk afhankelijk is van de breedte van de energiebarrière kunnen kleine oneffenheden op het oppervlak worden waargenomen. De afstand tussen de naald en het oppervlak varieert tussen 0,4 en 0,7 nm en dit is genoeg om atomen te kunnen zien. In figuur 54 zie je links een illustratie en rechts een werkelijke STM opname van het oppervlak van goud, waarbij individuele goudatomen duidelijk zichtbaar zijn.

Figuur 54 STM illustratie (links) en werkelijke opname van het oppervlak van goud (rechts).



Met een STM kunnen ook individuele atomen worden verplaatst, zodat je met atomen kunt schrijven. In 1989 is de afkorting IBM geschreven met 35 xenon atomen op een nikkel oppervlak en in 2013 is er zelfs een tekenfilmpje gemaakt "*a boy and his atom*" door koolmonoxide moleculen te verplaatsen. Zie figuur 55. Meer dan tweeduizend jaar geleden kreeg Democritus (460–356 v. Chr) het idee dat voorwerpen uit atomen bestaan en pas 40 jaar geleden zijn ze voor het eerst gezien. Soms moet je lang wachten om waardering te krijgen.

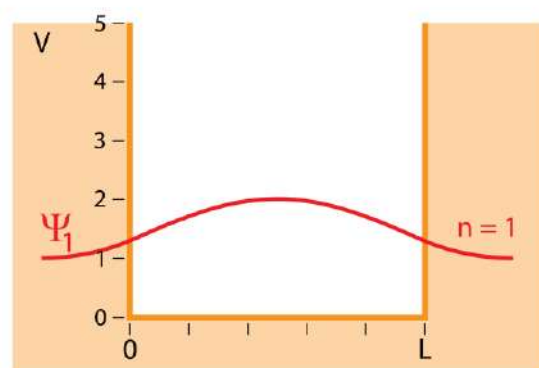
Figuur 55 Schrijven met atomen.



Golffuncties in een energieput

Nu we weten wat tunnelen is wordt het tijd om te onderzoeken waar het vandaan komt. Stel we brengen een kwantumdeeltje in een energieput, maar dit keer maken we de put niet oneindig diep. Het deeltje heeft bijvoorbeeld 1 eV energie en de put is 5 eV diep. Volgens de klassieke mechanica zit het deeltje gevangen in de put. Voor deze situatie gaan we de golffuncties berekenen.

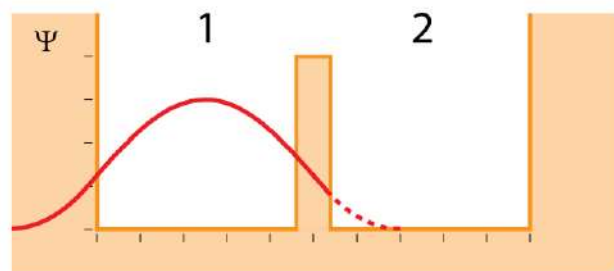
In figuur 56 zie je de golffunctie met $n = 1$, getekend op de hoogte van de bijbehorende energie. De golffunctie ziet er midden in de put hetzelfde uit als bij een oneindig diepe put, maar bij de randen is er een verschil. Want bij een oneindig diepe put is de golffunctie daar nul, maar bij een put met eindige diepte loopt de golffunctie buiten de put een stukje door. En omdat Ψ^2 de kans is om een deeltje aan te treffen kan het deeltje buiten de put komen. Het deeltje is dan heel even op een plaats waar de potentiële energie groter is dan de energie van het deeltje.



Figuur 56 Golffunctie met $n=1$ voor een deeltje in een eindige put.

Tunnelen tussen twee energieputten

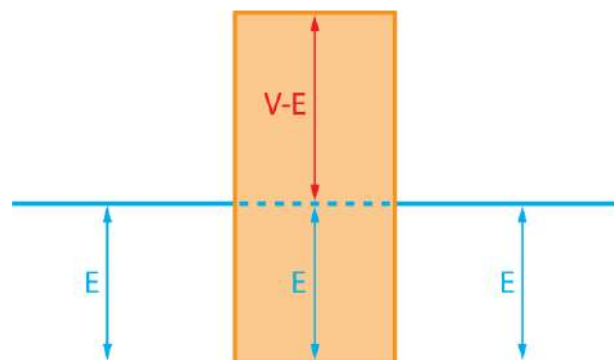
In figuur 57 zie je twee energieputten gescheiden door een dunne wand. In put 1 brengen we een kwantumdeeltje met te weinig energie om over de wand heen te kunnen. Toch kan het deeltje in put 2 komen, omdat de golffunctie doorloopt in put 2 en daar groter is dan nul. De kans Ψ^2 om het deeltje in put 2 te vinden is dus ook groter dan nul.



Figuur 57 Het tunnelen van een kwantumdeeltje.

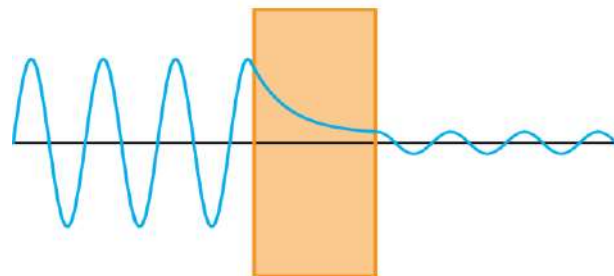
Tunnelen door een energiebarrière

In figuur 58 zie je een energiebarrière met hoogte V . Een kwantumdeeltje met energie E tunnelt door de barrière waarbij het geen energie verliest. Bij het tunnelen is de energie aan het eind altijd even groot als aan het begin. Het deeltje begint en eindigt dus met energie E . De barrière heeft hoogte V en het deeltje heeft een **energietekort** van $V - E$ om over de barrière heen te gaan.



Figuur 58 Een kwantumdeeltje met energie E tunnelt door een barrière met hoogte V .

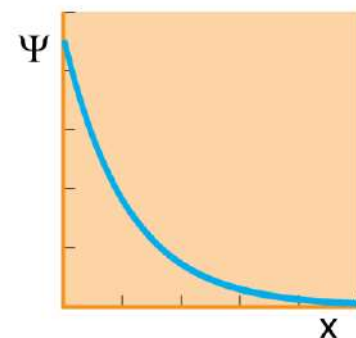
De golffunctie van een kwantumdeeltje die door een energiebarrière tunnelt zie je in figuur 59. Links en rechts van de barrière is de golffunctie sinusvormig. Binnen in de barrière is de potentiële energie V groter dan de energie E van het deeltje en is de golffunctie een exponentieel dalende functie.



Figuur 59 Golffunctie van een tunnelend kwantumdeeltje.

Exponentiële demping van de golffunctie

In de energiebarrière neemt de golffunctie snel af. De demping gaat volgens een exponentieel afnemende functie, wat een kleine indringdiepte geeft. Bij de absorptie van röntgenstraling en γ -straling heb je kennism gemaakt met de halveringsdikte. Dit is de dikte waarbij intensiteit van de straling met de helft is afgenomen. Op dezelfde manier kun je voor het tunnelen een **karakteristieke dikte d_e** definiëren. Dit is de dikte waarbij de amplitude van de golffunctie met $1/e$ is afgenomen. Hierin is e het grondtal van de natuurlijke logaritme: $e = 2,71828 \dots$



Figuur 60 Afname van de golffunctie in een energiebarrière.

In de barrière wordt Ψ snel kleiner en de kans Ψ^2 om het kwantumdeeltje aan te treffen daalt nog veel sneller. Bij één keer de karakteristieke dikte d_e is de tunnelkans 13,5%, bij twee keer d_e is dit 1,83% en bij drie keer d_e is het nog maar 0,248%. Voor het verloop van de golffunctie in een energiebarrière vinden we:

$$\Psi = \Psi_0 \cdot e^{-x/d_e} \quad \text{met} \quad d_e = \frac{h}{2\pi \cdot \sqrt{2m \cdot (V - E)}}$$

- Ψ is de golffunctie in de energiebarrière
- x is de afstand buiten de put gemeten tot aan de rand in meter (m)
- d_e is de afstand waarin de golffunctie met $1/e$ is afgenomen in meter (m)
- m is de massa van het deeltje in kilogram (kg)
- h is de constante van Planck: $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
- E is de energie van het deeltje
- V is de potentiële energie van de barrière

Samenvattend geldt voor tunnelen het volgende:

- 1) Bij het tunnelen verandert de energie van het deeltje niet.**
- 2) De tunnelkans neemt snel af met de dikte van de energiebarrière.**
- 3) De indringdiepte d_e wordt groter als de massa kleiner is.**
- 4) De indringdiepte d_e wordt groter als het energieverval $V - E$ kleiner is.**

VOORBEELD

Een elektron zit in een energieput met een energiebarrière $V - E$ van 1,0 eV.

Bereken de karakteristieke indringdiepte d_e .

$$\bullet \quad m = 9,109383 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad | \quad V - E = 1,0 \text{ eV} = 1,602177 \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad | \quad d_e = \dots \text{ m}$$

$$\bullet \quad d_e = \frac{h}{2\pi \cdot \sqrt{2m \cdot (V - E)}}$$

$$\bullet \quad d_e = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{2\pi \cdot \sqrt{2 \cdot 9,10938 \cdot 10^{-31} \cdot 1,60218 \cdot 10^{-19}}} = 1,9519 \cdot 10^{-10} = 2,0 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Dit is ongeveer de afstand tussen twee atomen.

Uit de formule van de golffunctie in een barrière kun je begrijpen dat het tunneleffect in het gewone leven niet waarneembaar is. Zowel de massa als de energieverval $V - E$ is voor gewone voorwerpen groot. Stel we nemen een steentje van 10 gram en een muur van 10 meter hoog. $E_z = m \cdot g \cdot h \rightarrow E_z = 0,01 \cdot 9,81 \cdot 10 = 1,0 \text{ J}$. Met deze barrièrehoogte $V - E$ vinden we $d_e = 7,5 \cdot 10^{-34} \text{ m}$. Zelfs een barrière van één atoom dik is al te veel om doorheen te tunnelen. De kleine waarde van h is hiervan de reden, want als h gelijk zou zijn aan 1 zou het steentje gemakkelijk door een 1 m dikke, 10 m hoge muur kunnen tunnelen.

17.11 Samenvatting

Grootheden en eenheden

- E_{foton} is de foton energie in joule (J)
- h is de constante van Planck (J·s) $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- f is de frequentie van het foton in hertz (Hz)
- E_{uit} is de uittree-energie in joule (J) of elektronvolt (eV)
- U_{rem} is de remspanning in volt (V)
- q is de lading van een elektron: $-1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ [elementair ladingsquantum](#)
- p is de impuls in kilogram keer meter per seconde (kg·m/s)
- m is de massa in kilogram (kg)
- v is de snelheid in meter per seconde (m/s)
- Δx is de onbepaaldheid in plaats in meter (m)
- Δp is de onbepaaldheid in impuls in kilogram keer meter per seconde (kg·m/s)
- Ψ is de golffunctie (afhankelijk van de plaats en van de tijd)

Weten

- Foto-elektrisch effect:
 - een elektrode in een vacuümbuis wordt bestraald met licht
 - als de fotonenergie groot genoeg is wordt per foton één elektron vrijgemaakt
 - met een spanning worden de vrijgemaakte elektronen versneld of afgeremd
 - de spanning waarbij een elektron tot stilstand komt is de remspanning
- De uittree-energie is de energie die nodig is om een elektron uit een metaal vrij te maken.
- De remspanning is de spanning waarbij een elektron tot stilstand wordt gebracht.
- Bij de remspanning is de kinetische energie van de vrijgemaakte elektronen gelijk aan de elektrische energie $\Delta E_K = q \cdot U_{\text{rem}}$.
- De impuls van een foton is omgekeerd evenredig met de golflengte.
- Kwantumdeeltjes kunnen zich als golf manifesteren. [de De Broglie golflengte](#)
- Interferentie van kwantumdeeltjes is waarneembaar op de schaal van de golflengte.
- De onbepaaldheid in plaats wordt groter als de onbepaaldheid in impuls kleiner wordt en omgekeerd. [onbepaaldheidsrelatie van Heisenberg](#)
- Een kwantumdeeltje heeft geen baan en geen eigen identiteit.
- Van een kwantumdeeltje kan alleen de kans om het ergens aan te treffen worden berekend.

- Ψ is de golffunctie. [oplossing van de Schrödingervergelijking](#)
- De kans om een deeltje aan te treffen is het kwadraat van de golffunctie $|\Psi|^2$
- Hoe een kwantumdeeltje zich zal gedragen kan niet worden voorspeld.
- Voor de (kinetische) energie van een kwantumdeeltje in een oneindig diepe put geldt:

$$E = n^2 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2} \quad \text{met } n = 1, 2, 3, \dots$$
- De energie van een kwantumdeeltje is altijd groter dan nul.
- Als de energieput groter is liggen de energiestappen dichter bij elkaar.
- Als n groter wordt neemt de afstand tussen de energiestappen bij een oneindig diepe energieput toe.
- Bij het absorberen en uitzenden van licht verandert het kwantumgetal n . $n_{\text{begin}} \rightarrow n_{\text{eind}}$
- Bij een harmonische oscillator is de afstand tussen de energiestappen gelijk.
- De straal van een H-atoom in de grondtoestand is de Bohrstraal (0,0529 nm)
- De energie van een H-atoom in de grondtoestand is $-13,60 \text{ eV}$
- Voor de energie van een H-atoom geldt: $E = -\frac{13,60 \text{ eV}}{n^2}$ met $n = 1, 2, 3, \dots$
- Als n groter wordt neemt de afstand tussen de energiestappen bij een H-atoom af.
- In een molecuul worden de energieniveaus gesplitst.
- In een vaste stof zijn de energieniveaus gegroepeerd in banden:
 - de band die helemaal gevuld is met elektronen heet de valentieband
 - de band boven de valentieband is leeg en heet de geleidingsband
 - bij halfgeleiders en isolators is er een energiekloof tussen de valentieband en de geleidingsband
- Een kwantumdeeltje kan door een energiebarrière tunnelen.
- De tunnelkans hangt af van:
 - de dikte van de barrière $\rightarrow$ exponentiële afname in tunnelkans
 - het energietekort $\rightarrow$ exponentiële afname met de wortel van energietekort (E-V)
 - de massa $\rightarrow$ exponentiële afname met de wortel van de massa

Formules

$$E_{\text{foton}} = h \cdot f \quad \text{de energie van een foton (lichtdeeltje)}$$

$$E_{\text{foton}} = E_{\text{uit}} + E_K \quad \text{met} \quad E_K = \frac{1}{2} m \cdot v^2 = q \cdot U_{\text{rem}}$$

$$\vec{p} = m \cdot \vec{v} \quad \text{alleen waar in de klassieke mechanica}$$

$$E_K = \frac{1}{2} m \cdot v^2 = \frac{p^2}{2m} \quad \text{alleen waar in de klassieke mechanica}$$

$$p_{\text{foton}} = \frac{h}{\lambda} \quad \text{een foton heeft geen rustmassa maar heeft wel impuls}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \rightarrow \lambda = \frac{h}{m_0 \cdot v} \quad \text{de debroglie golflengte} \rightarrow \text{de golflengte van een deeltje}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi} \quad \text{de onbepaaldheidsrelatie van Heisenberg}$$

$$E = n^2 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2} \quad \text{met} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \begin{array}{l} \text{(kinetische) energie van een kwantumdeeltje} \\ \text{in een oneindig diepe energieput} \end{array}$$

$$\Delta E = (n_{\text{eind}}^2 - n_{\text{begin}}^2) \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2} \quad \begin{array}{l} \text{energieovergang in een oneindig diepe} \\ \text{energieput} \end{array}$$

$$\lambda = \frac{2 \cdot L}{n} \quad \text{met} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \begin{array}{l} \text{golflengte van een kwantumdeeltje} \\ \text{in een oneindig diepe energieput} \end{array}$$

$$E = -\frac{13,60 \text{ eV}}{n^2} \quad \text{met} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{energieniveaus bij een waterstofatoom in eV}$$

$$\Delta E = \left(\frac{1}{n_{\text{eind}}^2} - \frac{1}{n_{\text{begin}}^2} \right) \cdot 13,60 \text{ eV} \quad \text{energieovergang in een waterstofatoom in eV}$$

Figuren

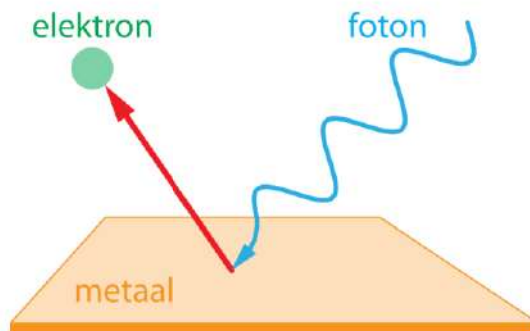
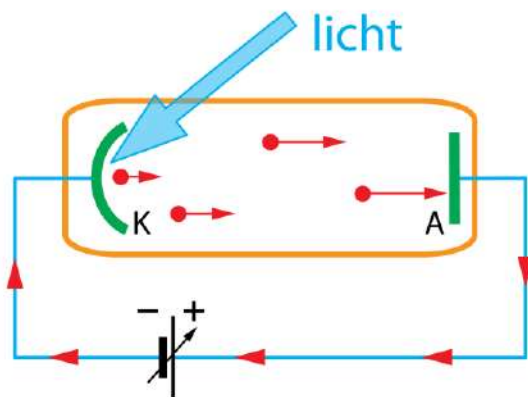
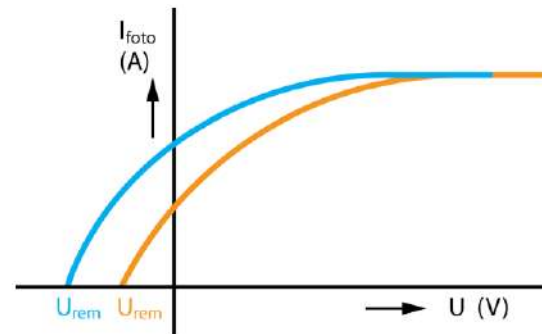
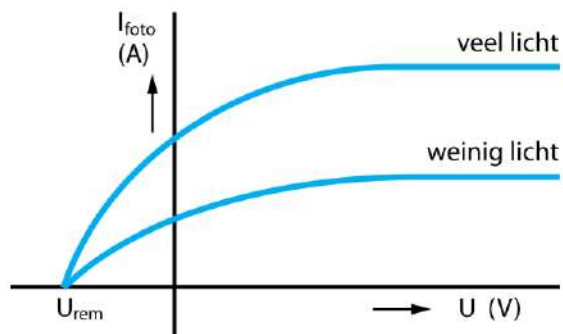
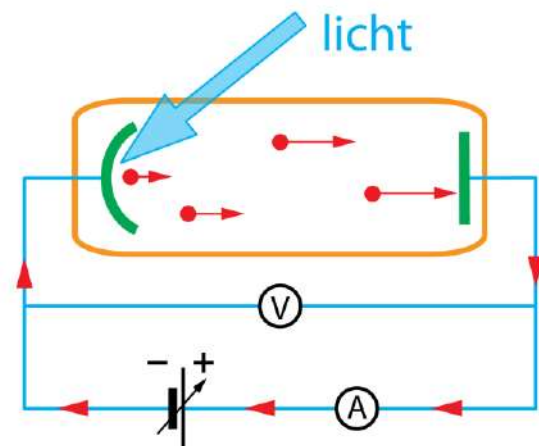


Foto-elektrisch effect.

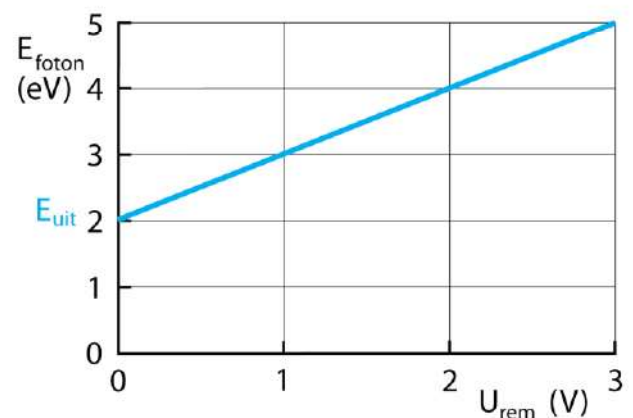


Het foto-elektrisch effect. Een elektrode wordt bestraald en als de fotonenergie groot genoeg is wordt er per foton één elektron vrijgemaakt.

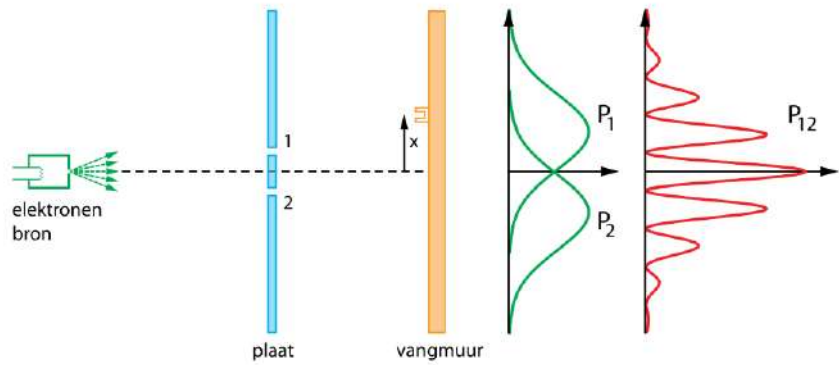


Met een spanning worden de vrijgemaakte elektronen versneld of vertraagd. Bij de remspanning U_{rem} komen de elektronen tot stilstand en is de fotostroom I_{foto} nul. Invloed van de lichtintensiteit (links) en van de fotonenergie (rechts).

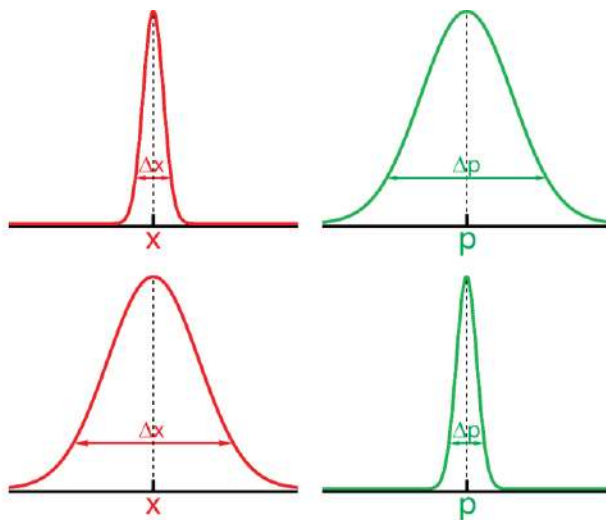
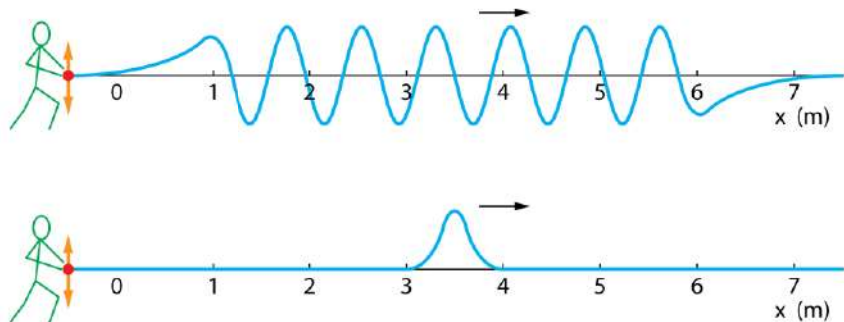
Fotonenergie als functie van de remspanning. Bij een fotonenergie van 3,0 eV hoort een remspanning van 1,0 V. $E_{\text{uit}} = 3 - 1 = 2,0$ eV (620 nm).



Dubbelspleet experiment met kwantumdeeltjes. Een kwantumdeeltje komt in zijn geheel aan in de detector. Onderweg gedraagt het zich als golf.

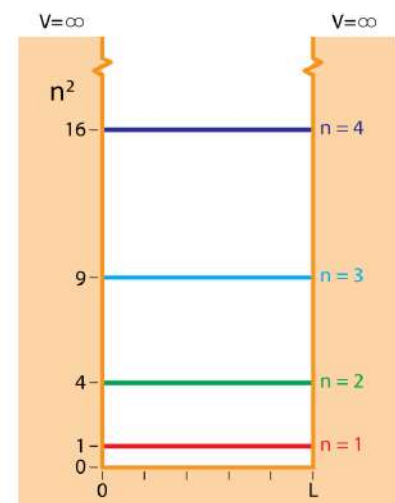


In het bovenste plaatje zie je een golf met een goed bepaalde golflengte, maar een slecht bepaalde plaats. In het onderste plaatje zie je een golf met een goed bepaalde plaats en een slecht bepaalde golflengte.



Onbepaaldheidsrelatie: Kansverdeling van de plaats (rood) en van de impuls (groen).

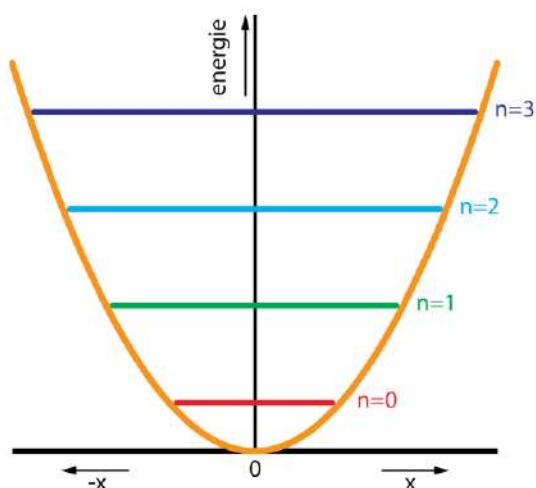
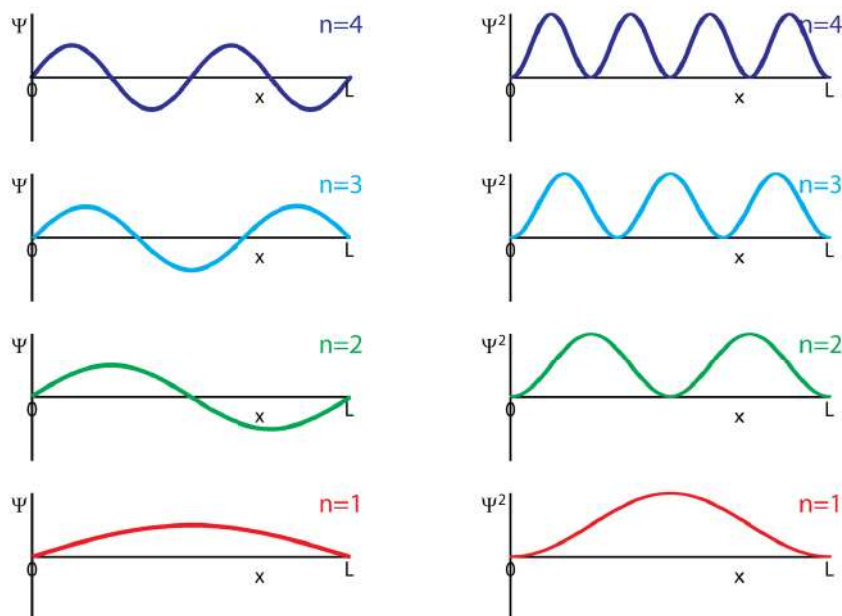
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$



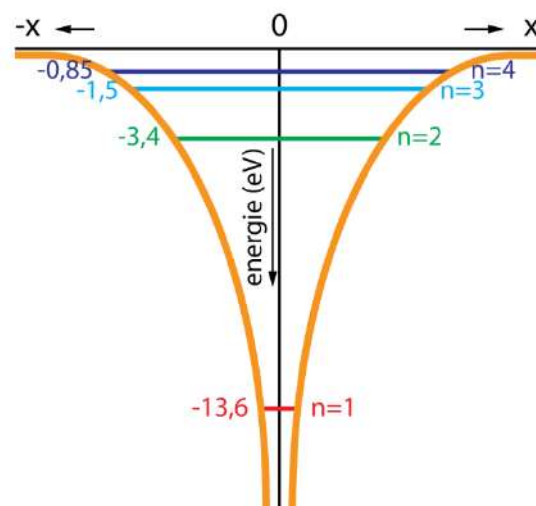
Toegestane energie in een oneindig diepe energieput

$$E = n^2 \cdot \frac{h^2}{8m \cdot L^2} \quad \text{met } n = 1, 2, 3, \dots$$

Golffuncties Ψ en kansverdelingen Ψ^2 van een deeltje in een oneindig diepe energieput met lengte L .

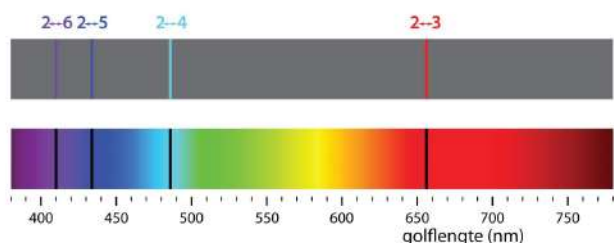


Energiewaarden bij een harmonische oscillator. De afstand tussen de energieniveaus is constant.

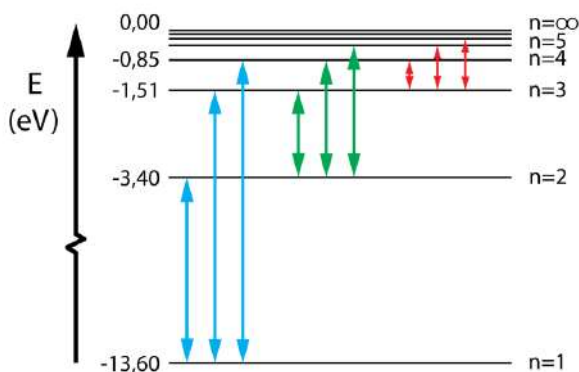


Energie van (een elektron bij) een waterstofatoom. Het kost 13,6 eV om vanuit de grondtoestand los te komen. Bij grotere energie wordt de afstand tussen de stappen kleiner.

$$E = -\frac{13,60 \text{ eV}}{n^2} \quad \text{met } n = 1, 2, 3, \dots$$



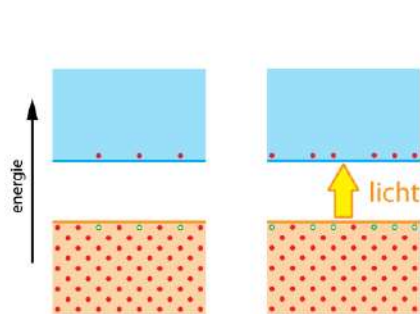
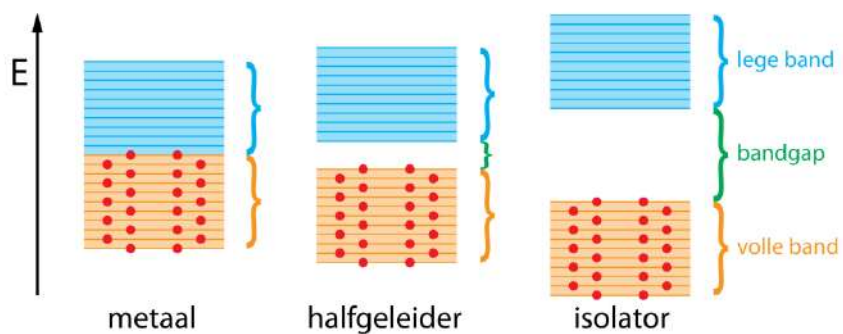
Het emissiespectrum (boven) en absorptiespectrum (onder) van waterstof.



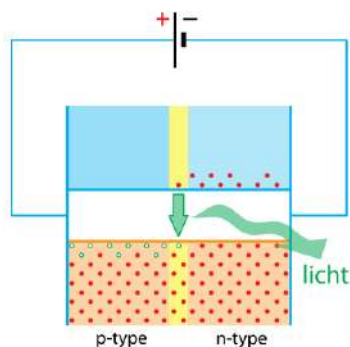
Lyman Balmer Paschen

Energieniveaus voor een waterstofatoom.

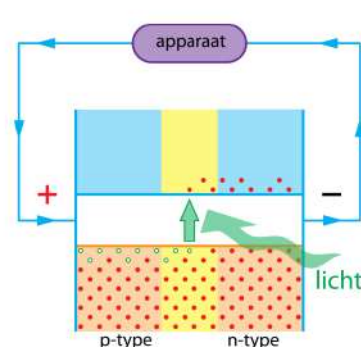
Energiebanden in een vaste stof.



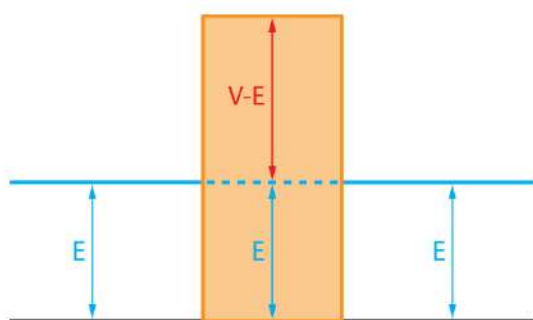
LDR-weerstand.



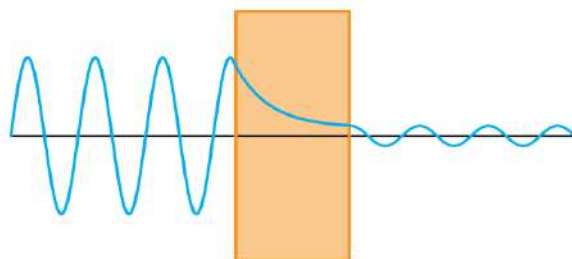
Licht-Emitterende Diode (LED).



Zonnecel.



Een kwantumdeeltje met energie E tunnelt door een barrière met hoogte V .



Golffunctie van een tunnelend kwantumdeeltje.