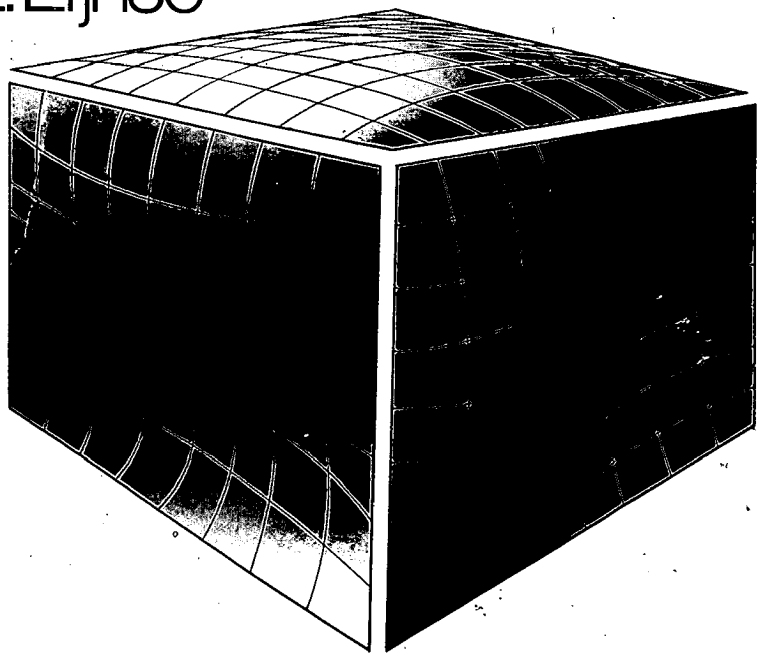


Kwantum- mechanica

Een eenvoudige inleiding

P.L. Lijnse



Behandeling op elementair niveau van de principes, achtergronden en betekenis van de kwantummechanica.

~~Wolters~~

~~Boeken~~

29/11

- Aula-Paperback 60
P. L. Lijnse **Kwantummechanica**



Kwantum- mechanica

Een eenvoudige inleiding

P.L.Lijnse



Uitgeverij Het Spectrum
Utrecht/Antwerpen

Vormgeving: Studio Spectrum
Figuren: Richards Studio
Illustratie omslag: Billy Leliveld
Eerste druk 1981

© 1981 by Het Spectrum B.V.

No part of this book may be reproduced in any form, by print, photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publisher.

Niets uit deze uitgave mag worden veeveelvoudigd en/of openbaar gemaakt door middel van druk, fotocopie, microfilm of op welke andere wijze ook zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de uitgever.

19-0060.01 D 1981/0265/88

CIP-gegevens

Lijnse, P. L. — Kwantummechanica: een eenvoudige inleiding / P. L. Lijnse. — Utrecht [etc.]: Spectrum. — Fig. — (Aula-paperback; 60)

Met reg.

SISO 531.5 UDC 530.145 UGI 590

Trefw.: quantentheorie.

ISBN 90-274-6214-3

Inhoud

Woord vooraf 9

1. Waarom kwantummechanica? 11

- 1.1 Wat verstaan we onder kwantummechanica? 11
- 1.2 De 'geboorte' van het kwantum 16
 - 1.2.1 Deterministisch wereldbeeld 16
 - 1.2.2 Zijn golven deeltjes? 18
 - a. Het probleem van de 'zwarte straling' 18
 - b. Het foto-elektrisch effect 22
 - c. Het Compton-effect 25
 - 1.2.3 Zijn deeltjes golven? 28
 - a. Het Rutherford-atoom 28
 - b. Het Bohr-atoom 31
 - c. De proef van Franck en Hertz 35
 - d. De Broglies hypothese 37
 - e. Het experiment van Davisson en Germer 38
- 1.3. Is er orde in de chaos? 42
 - 1.3.1 Het proces 42
 - 1.3.2 Rotsvaste zekerheden? 42
 - 1.3.3 Empirische en theoretische wetten 44
 - 1.3.4 Abstractieniveau 45
 - 1.3.5 Moraal 46
 - 1.3.6 Opnieuw het schema 47
 - 1.3.7 Het grote vraagteken 50

2. Het gedrag van fotonen en elektronen nader bekeken 51

- 2.1. Inleiding 51
- 2.2. Een experiment met kogeltjes 52
- 2.3. Een experiment met golven 54
- 2.4. Een experiment met fotonen en elektronen 56
- 2.5. Kijken naar elektronen 62
- 2.6. De onzekerheidsrelaties van Heisenberg 66
- 2.7. Het complementariteitsprincipe 74

3. Iets over het kwantummechanisch formalisme 80

- 3.1. Wat is een toestand? 80
- 3.2. Over toestandsfuncties en hun betekenis 82
- 3.3. Over stationaire toestanden en hun vergelijking 84
 - 3.3.1 Bij ons geen plaats voor de tijd 84

- 3.3.2 De Schrödinger-vergelijking 85
- 3.3.3 Waarom dit recept? 85
- 3.4 Over de put, het deeltje, en de kans dat het erin zit! 87
 - 3.4.1 Ons systeem 87
 - 3.4.2 Het oplossen 89
 - 3.4.3 Randvoorwaarden 90
 - 3.4.4 Verder met oplossen 91
 - 3.4.5 Kunnen we de oplossing begrijpen? 92
 - 3.4.6 Energiekwantisatie 95
 - 3.4.7 Hoe breder, hoe 'vrij' 95
 - 3.4.8 Nulpuntsenergie 97
 - 3.4.9 Nogmaals de golf functies 97
 - 3.4.10 Correspondentieprincipe 99
 - 3.4.11 De kleuren om ons heen 100
 - 3.4.12 De eindige put en haar toestanden 102
 - a. Het systeem 102
 - b. Energiewaarden en golf functies 103
- 4. Korreltjes van de oogst 108**
 - 4.1. Inleiding 108
 - 4.2. Het H-atoom 109
 - 4.2.1 Probleem in drie dimensies 109
 - 4.2.2 Bolsymmetrie 110
 - 4.2.3 De energieniveaus 112
 - 4.2.4 De grondtoestand 113
 - 4.2.5 Bolsymmetrische golf functies 115
 - 4.2.6 Het baanimpulsmoment 118
 - 4.2.7 Spinimpulsmoment 121
 - 4.2.8 Hoekafhankelijke golf functies 122
 - 4.2.9 Opnieuw de $P_{n,l}(r)$ 123
 - 4.2.10 Tenslotte: wat een toestanden! 127
 - 4.2.11 Oervormen der natuur 130
 - 4.3. Over helium... en de rest 130
 - 4.3.1 Meer elektronen 130
 - 4.3.2 Het Pauli-principe 131
 - 4.3.3 Belangrijk voor de atoombouw? 132
 - 4.3.4 En de golf functies? 135
 - 4.4. Iets over moleculen 137
 - 4.4.1 Het probleem 137
 - 4.4.2 Andere moleculen 140
 - 4.4.3 Model 142
 - 4.4.4 Voorbeelden 142
 - 4.4.5 Eenheid in de natuur 144
 - 4.4.6 Massaverschil 147

- 4.4.7 Van H tot DNA 148
- 4.5. Over vaste stoffen, kernen en de kwantumladder 149
 - 4.5.1 Vaste stoffen 149
 - 4.5.2 Kernen 154
 - 4.5.3 De kwantumladder 156

5. Tenslotte 159

- 5.1. Terugblik 159
- 5.2. Historische kanttekeningen 160
- 5.3. Filosofische kanttekeningen 164
- 5.4. Tot slot 171

Noten 175

Register 181

*Voor Yvonne,
de vervulling van mijn eigen complementariteitsprincipe!*

Woord vooraf

Dit boek is ontstaan uit een experiment. En wel uit een poging om na te gaan of kwantummechanica ook behandeld zou kunnen worden op onze middelbare scholen, in het bijzonder voor leerlingen in de zesde klas van het VWO. Uit mijn bemoeningen met dit experiment, dat overigens door alle betrokkenen als redelijk geslaagd wordt beschouwd, is uiteindelijk dit boek gegroeid. Dat betekent dat ik bij het schrijven een 'beginner' voor ogen heb gehad die een redelijke kennis heeft van de kern van de gebruikelijke middelbare-schoolnatuurkunde (op VWO-niveau), maar ook niet veel meer. Wel heb ik verondersteld dat hij daarnaast geïnteresseerd is in natuurkunde en dit onderwerp de moeite waard vindt om zich er in te verdiepen.

Dit aangenomen beginnersniveau betekent ook dat ik mij zeer heb moeten beperken ten aanzien van de mogelijke wiskundige diepgang. Zo heb ik bijvoorbeeld geen gebruik kunnen en willen maken van kennis omtrent complexe getallen, partiële differentiatie, functies van meer variabelen, vectorrekening enz. Voorwaar, een niet geringe beperking voor dit onderwerp!

Concreter gesproken denk ik dat dit boek inderdaad bruikbaar is voor geïnteresseerde VWO-leerlingen en hun leraren, maar daarnaast ook nog voor diverse andere groepen. Ik denk dan vooral aan studenten in diverse soorten van Hoger Beroeps Onderwijs en Wetenschappelijk Onderwijs. En waarom zou de 'middelbaar ontwikkelde leek' hierin niet ook iets van zijn gading vinden?

Het is overigens niet mijn bedoeling geweest om een leerboek te schrijven, waaruit je het kwantummechanisch formalisme zou kunnen leren.

Wat ik dan wél heb willen doen? Wel, ik heb meer een globaal beeld willen schetsen waaruit de lezer een idee overhoudt van de belangrijkste ideeën achter deze theorie. En ook enigszins van hoe ze 'werkt', wat ze wil en wat ze kan. Daarbij vond ik het belangrijk om ook ruime aandacht te besteden aan historische en filosofische aspecten. Immers, juist daardoor gaat het formalisme leven en wordt de zin ervan duidelijk. Te vaak wordt te veel aandacht besteed aan het leren van het formalisme en te weinig aan wat het betekent. Ook was het mijn bedoeling iets te laten zien van de ontwikkelingsgang van de natuurkunde. Een proces dat gemaakt wordt door mensen, met hun goede kanten en hun beperkingen. Zoals dat ook geldt voor het produkt dat zij scheppen. Een proces ook dat zeer internationaal

is. Vandaar dat ik met opzet gebruik heb gemaakt van veel onvertaalde citaten.

Tenslotte heb ik geprobeerd de behandeling in dit boek 'voorzichtig', stap voor stap, te laten plaatsvinden. Met steeds de nadruk op het waarom van die stapjes. Misschien dat de tekst daardoor af en toe langdradig is geworden. Dat spijt me dan zeer. Het nadeel dat behandeling in te grote stappen inhoudt, lijkt me echter nog ernstiger. Je zou kunnen zeggen dat ik die 'stap voor stap'-procedure vooral heb toegepast voor de onderwerpen die ik zelf eigenlijk nooit goed heb begrepen en waar ik maar met moeite enige greep op heb kunnen krijgen. Ik heb enige hoop dat dit een goede keuze is geweest. Een hoop die gesterkt is door het commentaar van diverse mensen die na het lezen van delen van het manuscript verklaarden dat ze 'er nu eindelijk iets van begonnen te snappen'. Moge het de lezer net zo vergaan!

Tenslotte wil ik een ieder danken die op enigerlei wijze heeft meegewerkt aan de totstandkoming van dit boek. In het bijzonder de medewerk(st)ers van de vakgroep natuurkunde-didactiek van de Utrechtse Universiteit. Zonder hun steun, uitleg en arbeid zou het niet zijn verschenen.

P. L. LIJNSE

1. Waarom kwantummechanica?

'...quantum theory dates 24 centuries further back, to Leucippus and Democritus. They invented the first discontinuity – isolated atoms in empty space.' – E. SCHRÖDINGER

1.1. Wat verstaan we onder kwantummechanica?

Het onderwerp van dit boek staat bij natuurkundigen bekend onder de naam: 'kwantummechanica'. Wat houdt dat in? Wat bedoelen we daarmee? Is dat iets belangrijks? En wat is het verband met de rest van de natuurkunde?

Deze vragen kunnen niet in enkele woorden beantwoord worden, daarvoor zijn ze te veel omvattend. En, zoals we nog zullen zien, het onderwerp is daarvoor ook te omvangrijk, en misschien vooral ook te moeilijk en te abstract. Toch zullen we een poging doen deze vragen althans in principe te beantwoorden. Het lijkt zeker de moeite waard om dit te proberen. We zullen daarbij slechts stap voor stap kunnen voortgaan. En omdat de theorie zelf veelvuldig gebruik maakt van zeer gecompliceerde wiskundige hulpmiddelen, zullen we ons zeker moeten beperken tot enkele sterk vereenvoudigde problemen. En ondanks deze vereenvoudigingen zal blijken dat het toch nog erg moeilijk is om echt te begrijpen waar het om gaat.

Waarom dan tóch al die moeite? Weisskopf, een van de bekendste hedendaagse fysici, geeft hierop het volgende antwoord. Hij noemt de kwantummechanica: *'A field of human thought that, more than any other scientific achievement, has deepened and broadened our understanding of the world in which we live.'*¹

Welnu, als dit waar is en als we inderdaad een goed beeld willen krijgen van de manier waarop we vanuit de natuurkunde de natuur om ons heen kunnen begrijpen, dan kunnen we er niet omheen deze theorie te behandelen. Dus dat gaan we dan ook doen, in de hoop het achteraf een beetje met Weisskopf eens te kunnen zijn.

Klassiek is niet genoeg

Volgens het woordenboek betekent het woord 'mechanica' de leer der wetten van evenwicht en beweging. Deze wetten hebben we in hun eenvoudigste vorm al leren kennen als 'de wetten van Newton'².

1. Zie voor de noten blz. 175 e.v.

Met als belangrijkste voorbeeld de regel die zegt dat een netto kracht die op een voorwerp werkt, dat voorwerp in een versnelde beweging brengt. En dat een voorwerp waarop geen netto kracht werkt, óf in een eenparige rechte lijnige beweging is óf in rust blijft. En we hebben deze wetten ook toegepast om de beweging te beschrijven van de voorwerpen om ons heen, of zelfs om de beweging te beschrijven van de planeten in hun baan om de zon. Wanneer we dit – achteraf – overzien, zouden we kunnen concluderen dat deze ‘newtonse’ mechanica kennelijk geldt in wat we de *macrofysische wereld* noemen. En dat is juist!

Het begrip ‘kwantum’ zijn we, zij het op beperkte schaal, ook al eerder tegengekomen. Bijvoorbeeld bij het spreken over fotonen en over de energieniveaus in een atoom, dus bij problemen uit de *microfysische wereld*. Als we nu deze betekenissen combineren, ligt het voor de hand te verwachten dat de kwantummechanica zich zal bezighouden met de beschrijving van de beweging van deeltjes in de *microfysische wereld*. Ofwel, het gedrag van de wereld op atomaire schaal.

Maar de vraag dringt zich dan op waarom dit eigenlijk een apart onderwerp is. Zijn de mechanica wetten zoals we die geleerd hebben van Newton, en die we nu ter onderscheiding zullen aanduiden met de term *klassieke mechanica*, dan niet geldig voor de beschrijving van deze atomaire wereld?

Het antwoord hierop kan inderdaad alleen maar ontkennend zijn. Het blijkt dat de natuur zich op atomaire schaal heel anders gedraagt dan volgens de regels die we als vanzelfsprekend hebben leren zien in onze ‘zintuiglijke ervaringswereld’. Het is dan ook juist het afwijken van wat we als ‘normaal’ beschouwen dat deze theorie in eerste instantie zo vreemd doet lijken. We moeten eraan leren wennen dat we door onze normale zintuiglijke ervaringen maar een *deel* van de werkelijkheid kunnen leren kennen. En dat juist de atomaire wereld daar buiten valt.

Communicatieprobleem

Misschien dat het volgende beeld dit kan verhelderen.³ Veronderstel dat ons op een dag radiosignalen bereiken die worden uitgezonden door intelligente wezens ergens in het heelal. Er ontstaat dan een buitengewoon gecompliceerd probleem: hoe kunnen we ons een beeld vormen van een wereld die totaal anders kan zijn dan de onze en die we waarschijnlijk nooit zullen zien? De uitgezonden signalen zullen waarschijnlijk een boodschap bevatten, maar in welke woorden en wat betekenen ze? Misschien hebben we wel niets gemeen met deze ‘andere-wereld-wezens’, zelfs niet dezelfde ideeën over kleuren, geluid en vormen. Onze woorden zullen nooit precies van toepassing

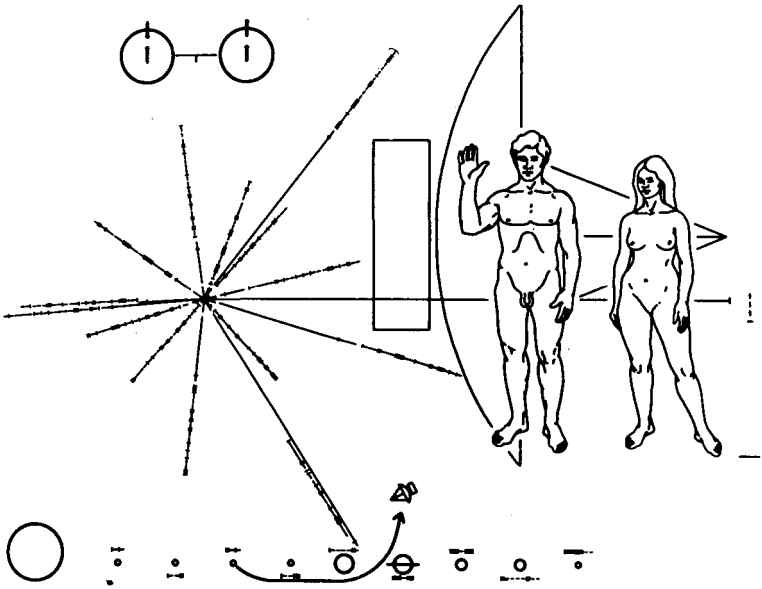


Fig. 1. De plaquette aan boord van het ruimtevaartuig Pioneer 10, dat in 1972 het heelal is ingeschoten. De boodschap op de plaquette is zodanig samengesteld dat ze door een technisch ver ontwikkelde beschaving zou moeten kunnen worden ontcijferd.

kunnen zijn op hun wereld, misschien zelfs niet eens bij benadering. Toch hebben we geen andere keuze dan woorden te nemen uit een of andere aardse taal en deze zo goed mogelijk te laten passen bij onze beperkte indrukken. Tot op zekere hoogte zullen die woorden en beschrijvingen wel toepasbaar zijn, maar er zal altijd een element van dubbelzinnigheid overblijven. Een wereld die zo ver weg is en zo verschillend van de onze, kan nooit helemaal begrepen worden.

Het probleem waar de moderne natuurkundige mee te worstelen heeft, lijkt hier erg veel op. Hij communiceert met het verre inwendige van een moleculaire wereld, dat te nietig is om direct waarneembaar te kunnen zijn. Hij heeft geen reden om te geloven dat de natuurkunde van deze wereld – die bekend is geworden onder de naam 'kwantumfysica' – meer dan hooguit oppervlakkig lijkt op de natuurkunde van de gewone, bekende wereld. Om met deze moleculaire wereld te kunnen communiceren gaat de natuurkundige naar zijn laboratorium. Zijn experimentele resultaten zijn de 'boodschappen' die hij ontvangt. Zij zijn gesteld in een taal die de natuurkunde al honderden jaren van dienst is geweest, een taal die past bij

de gebeurtenissen in het laboratorium en die vertelt over zulke dingen als deeltjes en golven, energie en impuls, plaats en tijd, continuïteit en discontinuïteit.

Maar bedenk wel dat dit woorden zijn uit onze aardse woordenschat, zonder volledige garantie dat ze ook geldig zijn in die andere wereld, de wereld van de kwantumfysica.⁴

Schaalverkleining

Hiermee wordt de kern van ons probleem duidelijk geïllustreerd. We moeten met één taal die bestaat uit symbolen die hun betekenis voornamelijk ontleen aan wat we ons er op grond van onze zintuiglijke ervaring bij hebben leren voorstellen, want iets anders hebben we niet, gebeurtenissen beschrijven die soms juist sterk afwijken van wat we in diezelfde ervaringswereld gewend zijn. Dat dit problemen op kan leveren, behoeft dan ook eigenlijk geen verbaazing te wekken. We zullen daarmee zo dadelijk dan ook kennis-maken.

Fig. 2 en fig. 3 illustreren nog eens de immense schaalverkleining die zich voordoet wanneer we van de dagelijkse voorwerpen om ons heen overgaan naar de atomaire wereld. Richard Feynman, een ander bekend hedendaags fysicus en Nobelprijswinnaar, beschrijft het probleem van de atomaire wereld als volgt.

“Quantum mechanics” is the description of the behavior of matter and light in all its details and, in particular, of the happenings on an atomic scale. Things on a very small scale behave like nothing that you have any direct experience about. They do not behave like waves, they do not behave like particles, they do not behave like clouds, or billiard balls, or weights on springs, or like anything that you have ever seen. Newton thought that light was made up of particles, but then it was discovered that it behaves like a wave. Later, however, it was found that light did indeed sometimes behave like a particle. Historically the

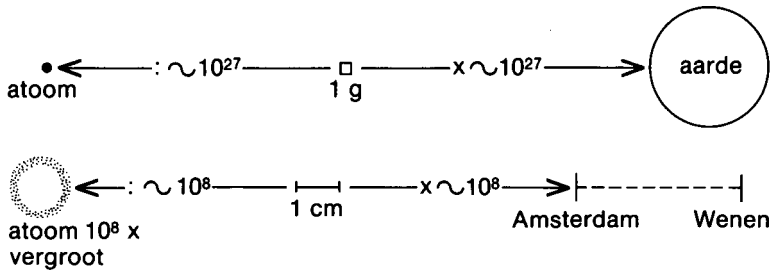


Fig. 2. Illustratie van de schaalverkleining, in massa en afstand, die nodig is voor het afdalen naar de atomaire wereld.

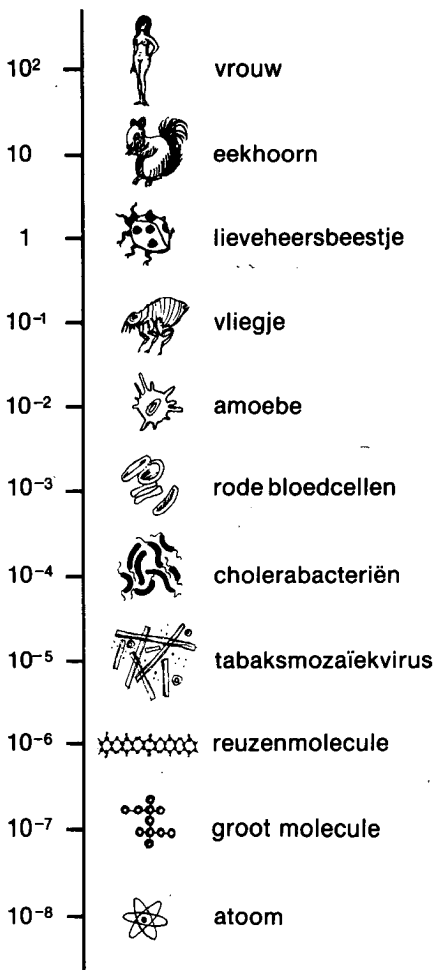


Fig. 3. De grootte der dingen (in cm).

electron, for example, was thought to behave like a particle and then it was found that in many respects it behaved like a wave. So, it really behaves like neither. Now we have given up. We say: "It is like neither."

Because atomic behavior is so unlike ordinary experience, it is very difficult to get used to, and it appears peculiar and mysterious to every one – both to the novice and to the experienced physicist. Even the experts do not understand it the way they would like to, and it is perfectly reasonable that they should not, because all of direct, human

experience and of human intuition applies to larger objects. We know how large objects will act, but things on a small scale just do not act that way. So we have to learn about them in a sort of abstract or imaginative fashion and not by connection with our direct experience.'⁵

Daarmee is ons onderwerp nu wel duidelijk: 'een introductie tot de theorie die het gedrag van de wereld op atomaire schaal tracht te beschrijven'.

1.2. De 'geboorte' van het kwantum

1.2.1 Deterministisch wereldbeeld

Einstein heeft eens gezegd:

'Het meest onbegrijpelijke in ons Heelal is dat het begrijpelijk is.'

Deze uitspraak weerspiegelt een zeker vertrouwen in het feit dat de mens ook inderdaad daartoe in staat zal zijn. Uiteindelijk is dit vertrouwen een van de redenen waarom er überhaupt wetenschappelijk onderzoek verricht wordt, en het wordt uiteraard stevig gevoed door de successen die diezelfde wetenschap inmiddels bereikt heeft. Aan het eind van de vorige eeuw ging dat vertrouwen zelfs zo ver dat men dacht dat alle grote natuurwetten al bekend waren. In de toekomst zou het er nog slechts om gaan 'aan de reeds bekende resultaten nog enkele decimalen toe te voegen'. De al bekende, maar nog onverklaarde verschijnselen betroffen, naar men toen dacht, eigenlijk slechts detailpunten die uiteindelijk zeker binnen het raam der bekende wetten verklaard zouden kunnen worden. Mits men er natuurlijk maar de tijd en de moeite voor zou willen nemen.

Zo gaat bijvoorbeeld het verhaal dat Max Planck, de latere grondlegger van de kwantumhypothese, in zijn jeugd werd afgeraden om zich met natuurkunde te gaan bezighouden. Immers, dit kon toch nauwelijks nog lonend zijn, gezien de vergevorderde staat waarin de natuurkunde zich bevond. Deze optimistische visie vond in breder verband vooral haar oorsprong in de succesrijke omwenteling die de opkomst van de industriële revolutie teweeg had gebracht. Maar, in enger natuurkundig verband, met name ook in de grote successen van de 18e- en 19e-eeuwse natuurkunde. Zo hadden bijvoorbeeld Faraday en Maxwell hun theorie van het elektromagnetisme ontwikkeld, waarbij vooral de interpretatie van licht als een vorm van elektromagnetische straling een spectaculaire sprong vooruit was. Anderzijds hadden mensen als Joule, Helmholtz, Kelvin, Boltzmann en vele anderen de 'kinetische gastheorie' en de zogeheten 'thermodynamica' ontwikkeld. Beide kunnen gelden als een groot

succes voor de klassieke mechanica zoals die voor het eerst door Newton was geformuleerd. Bovendien had de newtonse mechanica ook zijn grote waarde bewezen bij de verklaring van de planetenbeweging. Zozeer zelfs dat het bestaan van nieuwe planeten al voorspeld kon worden nog voordat ze waren waargenomen. Dit alles leidde tot het genoemde, welhaast ongebreidelde geloof in de juistheid en volledigheid van de menselijke kennis. Een karakteristieke uitspraak werd in dit verband gedaan door de wiskundige Laplace, die het volgende schreef:

'Une intelligence qui, pour un instant donné, connaîtrait toutes les forces dont la nature est animée et la situation respective des êtres qui la composent, si d'ailleurs elle était assez vaste pour soumettre ces données à l'Analyse, embrasserait dans la même formule les mouvements des plus grands corps de l'univers et ceux du plus léger atome: rien ne serait incertain pour elle, et l'avenir, comme le passé, serait présent à ses yeux.'

De enige reden waarom zo'n toekomstvoorspelling nooit echt zou kunnen, was, naar men dacht, slechts het menselijk gebrek aan voldoende rekensnelheid. Zo'n 'intelligence' kon dus niet bestaan, maar het verdere idee vond men juist. In deze uitspraak weerspiegelt zich ook nog een ander beeld, dat men nu aanduidt met de term *determinisme*. Hieronder verstaat men nu het 'geloof' dat in feite alles in de natuur vastligt. Of, anders gezegd, gegeven een bepaalde begintoestand en het hele scala van natuurwetten, dan volgt daaruit noodzakelijkerwijs altijd dezelfde eindtoestand. Eisenbud beschrijft dit als:

*'It is the principle of determinism that leads to the expectation that acorns will always grow into oaks and not, on occasion, into maple trees, mulberry bushes, or tulips and to the inference that the oaks and tulips in the park did not all develop from acorns.'*⁶

Is dat dan niet vanzelfsprekend, zul je je misschien bij het lezen van deze zinnen afvragen? Het antwoord hierop is in ieder geval minder vanzelfsprekend dan we misschien in eerste instantie geneigd zijn te denken. En ook hier is het weer het gedrag van de materie op atomaire schaal dat ons in dit verband voor gecompliceerde problemen stelt. In ieder geval kunnen we achteraf vaststellen dat het toenmalige zelfvoldane gevoel allesbehalve terecht is gebleken. Laten we daarom nog eens nagaan welke feiten tot deze 'natuurkundige revolutie' de eerste aanleiding hebben gegeven. Om de 'vreemdheid' van deze feiten op de juiste waarde te kunnen schatten, moeten we het volgende goed beseffen. In onze macrofysische wereld zijn alle verschijnselen altijd op slechts twee principes terug te voeren. Het gaat óf om de *beweging van deeltjes* óf om *golfverschijnselen*.

Dit zijn dan ook precies de 'bestanddelen' van de klassieke fysica,

zoals die toen bestond. De vraag wordt dan: was dat dan niet voldoende?

1.2.2 Zijn golven deeltjes?

a. Het probleem van de 'zwarte straling'

'Kurz zusammen gefasst kann ich die ganze Tat als einen Akt der Verzweiflung bezeichnen.' – M. PLANCK

Lord Kelvin (1824-1907) was iemand die in zijn tijd een grote autoriteit was op het gebied van de natuurkunde. Deze man verklaarde op een dag dat voor hem de natuurkunde een afgerond en volmaakt harmonisch geheel leek. Hij zag, zo zei hij, aan de horizon slechts 'twee donkere wolkjes'. Een van deze wolkjes was het probleem van het verklaren van het door een zogenaamd 'zwart lichaam' uitgezonden

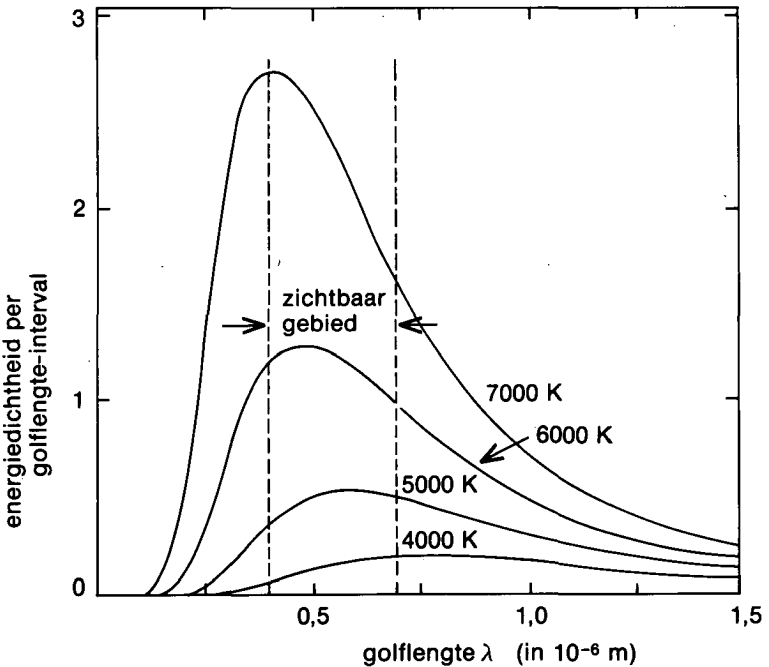


Fig. 4. De intensiteitsverdeling van de straling zoals die door een ideaal zwart lichaam bij verschillende temperaturen wordt uitgezonden. Het zichtbare gebied vormt, zoals aangegeven, slechts een klein deel van het totaal uitgezonden spectrum.

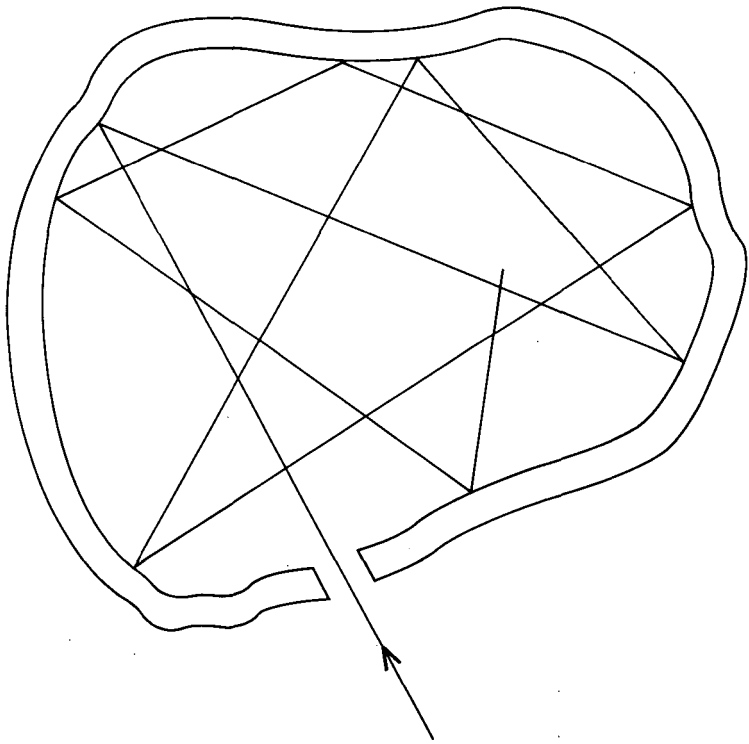


Fig. 5. Een 'doos met gat' als model voor een ideaal zwart lichaam. Alle straling die door de opening naar binnen valt, blijft ook binnen. Of, anders gezegd, alle door het gat vallende straling wordt geabsorbeerd, zodat het gat ideaal zwart is.

den stralingsspectrum.⁷ De ironie van het lot heeft echter gewild dat nu juist dit 'wolkje' het begin is geweest van de ontwikkeling van de kwantumtheorie. (Trouwens het andere wolkje was ook niet mis, hieruit is later de relativiteitstheorie ontstaan.)

Nu was het in die tijd, omstreeks 1900, bekend dat de straling die wordt uitgezonden door een zwart lichaam, alleen van de temperatuur, en niet van de verdere eigenschappen van dit lichaam afhankelijk moest zijn. Dit was bijzonder belangrijk omdat hierdoor gesuggereerd werd dat er een of andere fundamentele wet in het geding moest zijn. Vandaar dat het vinden van deze wet, en daarmee de oplossing van het zwarte-stralingsprobleem, veel aandacht trok. Zo had bijvoorbeeld in 1900, de Engelsman lord Rayleigh een formule afgeleid die de uitgestraalde energie van een zwarte straler als functie van de golflengte voorspelde. Deze formule werd enkele jaren

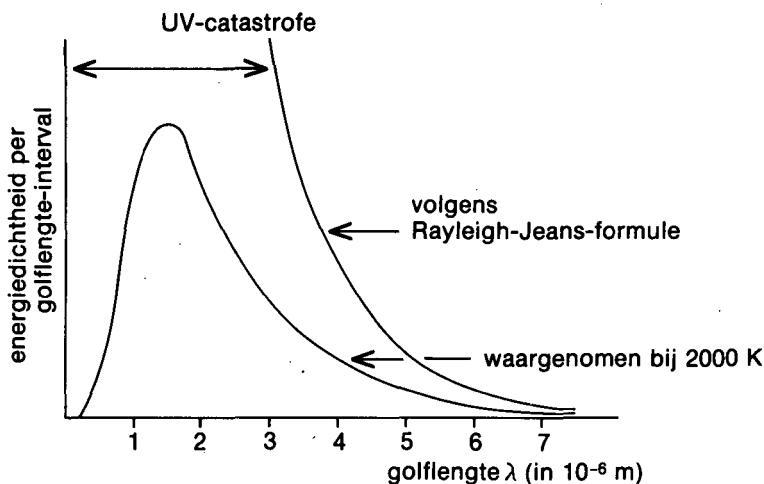


Fig. 6. De ultravioletcatastrofe gedemonstreerd. Het experimenteel waargenomen spectrum van een praktisch 'zwarte straler' bij 2000 K wordt hier vergeleken met de voorspellingen volgens Rayleigh en Jeans. Zoals te zien is, divergeert deze voorspelling naar oneindig voor kleine golflengten, wat zou inhouden dat ieder lichaam een oneindig hoeveelheid energie zou uitstralen.

later door Jeans gecorrigeerd en staat nu bekend als de Rayleigh-Jeans-formule. De uitdrukking van Rayleigh was in het gebied van grote golflengten in goede overeenstemming met de bekende experimentele gegevens. Echter, volgens deze 'klassiek' afgeleide formule, zou de uitgestraalde energie per eenheid van golflengte, λ , evenredig moeten zijn met $1/\lambda^2$. En daarmee oneindig groot worden voor kleine golflengten. Dit laatste moet uiteraard in strijd zijn met de werkelijkheid (zie fig. 6). Dit probleem staat nu bekend in de literatuur als de *ultravioletcatastrofe*.

Ook de Duitse natuurkundige Max Planck (1858-1947) voelde zich, juist vanwege het fundamentele karakter, aangetrokken tot dit probleem. Want, zoals hij later zei:

'Da das Suchen nach dem Absoluten mir stets als die schönste Forschungsaufgabe erschien, so machte ich mich mit Eifer an ihre Bearbeitung.'

Het moet hem dan ook veel voldoening hebben geschonken dat hij er tenslotte inderdaad in slaagde een formule af te leiden die het verloop van het zwarte-stralingsspectrum kon beschrijven. Echter, het verbazende en volledig onbegrijpelijke was, dat dit slechts lukte wanneer hij aannam dat een stralend lichaam alleen energie kan absorberen of uitzenden in kleine, ondeelbare hoeveelheden. Deze

kregen later de naam 'energiekwanten'. Zelf omschreef hij deze aanname later als een wanhoopsdaad, waartoe hij alleen maar zijn toevlucht nam omdat er hoe dan ook, tegen elke prijs, een verklaring van het stralingsspectrum gevonden moest worden.

Tussen de energie E van zo'n kwantum en de frequentie f van het daarbij behorende uitgezonden of geabsorbeerde licht, moest dan de volgende relatie bestaan:

$$E = hf$$

De daarbij door hem ingevoerde evenredigheidsconstante h staat nu algemeen bekend als de constante van Planck ($h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Js). Dit was een geweldige doorbraak, 'destined to change the course of theoretical physics'⁸, waarvan de consequenties echter toentertijd nog lang niet waren te overzien. In zijn rede, bij de aanvaarding van de hem hiervoor in 1920 toegekende Nobelprijs, zei Planck zelf:

'...bis sich nach einigen Wochen der angespanntesten Arbeit meines Lebens das Dunkel lichtete und eine neue, ungeahnte Fernsicht aus-zudämmern begann.'

Ook gaat het verhaal dat Planck, tijdens een wandeling door de bossen rond Berlijn, tegen zijn zoon moet hebben gezegd dat hij een ontdekking had gedaan die misschien alleen maar te vergelijken was met de ontdekkingen van Newton.

Wie nu echter denkt dat Plancks theorie met gejuich werd ontvangen, vergist zich deerlijk. Zijn idee werd in de eerste jaren nauwelijks serieus genomen, of in het beste geval alleen vermeld als een niet onaardige gedachte, die echter zo spoedig mogelijk door een betere vervangen diende te worden. Met 'beter' werd dan uiteraard bedoeld een weer *klassiek* begrijpelijke, dus juist zonder de eigenaardige kwantisatie van de stralingsenergie. Dit soort tegenstand, die hij ook al eerder ontmoet had, ontlokte Planck eens de volgende uitspraak, die een wat schril licht werpt op de vaak zo veel geprezen 'objectiviteit' van natuurwetenschappers:

'Eine neue wissenschaftliche Wahrheit pflegt sich nicht in der Weise durchzusetzen, dass ihre Gegner überzeugt werden und sich als belehrt erklären, sondern vielmehr dadurch, dass die Gegner allmählich aussterben und dass die heranwachsenden Generation von vornherein mit der Wahrheit vertraut gemacht ist.'

Wellicht dat bij het lezen van dit verhaal de vraag is opgekomen waarom we niet wat dieper ingaan op de feitelijke theorie zoals die door Planck is afgeleid. Het antwoord daarop is misschien wat onbevredigend, maar helaas is het zo dat de theorie van de zwarte straling te gecompliceerd is om er hier op in te gaan. Dit zou ons te ver afvoeren van ons doel waar we uiteindelijk naar toe willen. Deze complexiteit is niet alleen voor ons een probleem, maar was het zelfs

ook voor de toenmalige natuurkundigen, Jammer zegt daarover: *'There can be no doubt that much intellectual effort could have been saved on the part of the early quantum theorists, if a conceptually less involved issue had initiated the development of the theory.'*⁸

Laten we eens kijken hoe die ontwikkeling dan wél in zijn werk is gegaan.

b. Het foto-elektrisch effect

Het dient hier benadrukt te worden dat ook Planck zelf de energiekwantisatie, zoals door hem ingevoerd, zag als een eigenschap van het absorberende of uitstralende voorwerp. Hij trok nog niet de consequentie dat deze kwantisering ook een eigenschap was van het elektromagnetisch stralingsveld zelf. Ofwel: dat de straling zelf gekwantiseerd zou zijn in energiepakketjes.

Deze stap werd pas gezet door Albert Einstein in 1905. Einstein, een tot dan toe onbekend figuur, was een van de weinigen die Plancks hypothese serieus namen, en hij breidde deze zelfs aanzienlijk uit. In een beroemd geworden artikel in het tijdschrift *Annalen der Physik*, met als onderwerp weer het stralingsprobleem, schreef hij:

'Nach der hier ins Auge zu fassenden Annahme ist bei Ausbreitung eines von einem Punkte ausgehenden Lichtstrahles die Energie nicht kontinuierlich auf grösser und grösser werdende Räume verteilt, sondern es besteht dieselbe aus einer endlichen Zahl von in Raumpunkten lokalisierten Energiequanten, welche sich bewegen, ohne sich zu teilen und nur als Ganze absorbiert und erzeugt werden können.'

Je ziet, Einstein laat er geen twijfel over bestaan dat volgens hem de straling zelf gekwantiseerd moet zijn. Ofwel: hier werd voor het eerst het begrip 'foton' geïntroduceerd, alhoewel deze naam pas in 1926 door G. N. Lewis werd bedacht. Natuurlijk realiseerde Einstein zich terdege dat zijn idee volledig in strijd leek met de gevestigde golftheorie van het licht. Hij schreef:

*'Die mit kontinuierlichen Raumfunktionen operierende Undulationstheorie des Lichtes hat sich zur Darstellung der rein optischen Phänomene vortrefflich bewährt und wird wohl nie durch eine andere Theorie ersetzt werden. Es ist jedoch im Auge zu behalten, dass sich die optischen Beobachtungen auf zeitliche Mittelwerte, nicht aber auf Momentanwerte beziehen, und es ist trotz der vollständigen Bestätigung der Theorie der Beugung, Reflexion, Brechung, Dispersion, etc. durch das Experiment wohl denkbar, dass die mit kontinuierlichen Raumfunktionen operierende Theorie des Lichtes zu Widersprüchen mit der Erfahrung führt, wenn man sie auf die Erscheinungen der Lichterzeugung und Lichtverwandlung anwendet.'*⁹

We zien dat hier het probleem van de 'golf-deeltje-dualiteit', dat wil zeggen: het op een of andere manier naast elkaar bestaan van golf-

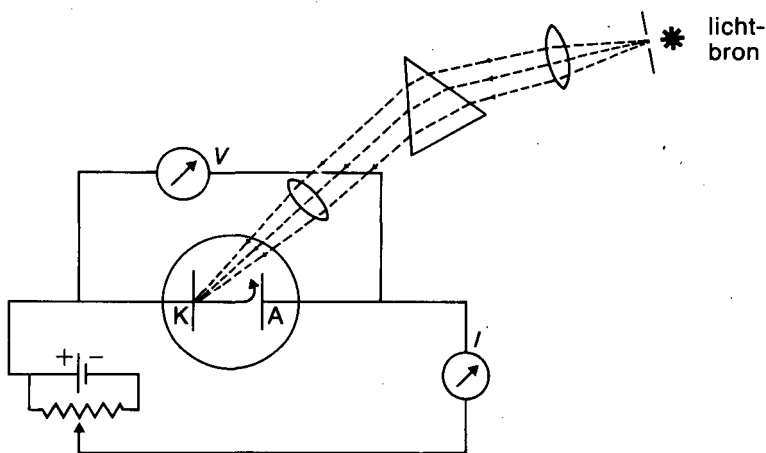


Fig. 7. Opstelling waarmee het foto-elektrisch effect gedemonstreerd en de constante van Planck bepaald kan worden. Met behulp van het prisma wordt één bepaalde kleur licht (een klein frequentiegebiedje) uitgeselecteerd. Dit licht valt vervolgens op de kathode K en maakt daaruit elektronen vrij. Deze elektronen gaan naar de anode A, zodat een stroom I kan worden gemeten. Door een tegenspanning V tussen A en K aan te leggen, worden de elektronen afgeremd. Als deze V groot genoeg is, de remspanning, wordt de stroom I nul. De grootte van deze remspanning is afhankelijk van de frequentie van het opvallende licht.

en deeltjes-eigenschappen van straling, voor het eerst zijn kop opsteekt. Overigens was er in die tijd nog nauwelijks experimentele steun voor Einsteins idee. Afgezien dan van een experimenteel gevonden effect dat men nog niet had kunnen verklaren met de elektromagnetische stralingstheorie van Maxwell. Dit foto-elektrisch effect, zoals het genoemd werd, was voor het eerst waargenomen door Heinrich Hertz in 1887. Hertz deed toen zijn beroemde experimenten die het bestaan van elektromagnetische golven aantoonde. En waarmee hij de experimentele kroon zette op het theoretisch werk van Maxwell. Als bijverschijnsel van zijn experimenten ontdekte hij echter een effect, dat hij overigens niet begreep, maar dat alras de aandacht trok van vele onderzoekers. Het doet weer ironisch aan dat juist de verklaring van dit foto-elektrisch effect – want dat was het – de stoot gaf tot het blootleggen van de tekortkomingen van Maxwells theorie.

Dit foto-elektrisch effect was het verschijnsel dat elektromagnetische straling in staat bleek elektronen vrij te maken uit een metaal (zie fig. 7). Ofwel: er bleek een experimentele koppeling mogelijk tussen licht en elektrische stroom. Een koppeling trouwens die se-

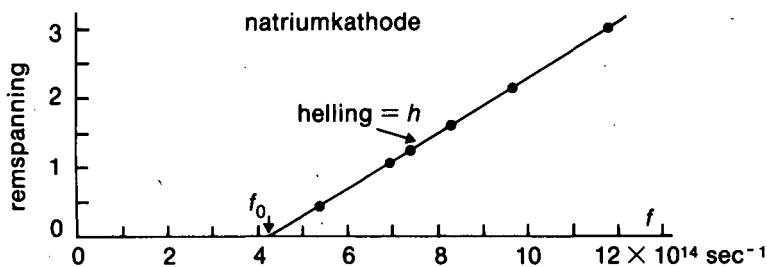


Fig. 8. Tussen de remspanning en de frequentie van de op de kathode vallende straling bestaat een lineair verband. In deze figuur wordt dit verband gedemonstreerd. Uit de helling van de gemeten lijn volgt de waarde van h en uit de afsnijding met de f -as de waarde van de grensfrequentie f_0 (in dit geval voor natrium).

dertdien ruime toepassing heeft gevonden, zoals tegenwoordig vooral in zonnecellen. Op zich behoefde dit effect niet zo'n verwondering te wekken. Je kunt je immers voorstellen dat een elektron geleidelijk aan energie absorbeert uit de opvallende straling, net zo lang tot het in staat is, zich los te maken uit het metaal. Het vreemde was echter dat deze verklaring niet voldeed. Wanneer de golflengte van het opvallende licht groter was dan een bepaalde grensgolflengte, bleek er nooit een elektron vrijgemaakt te kunnen worden, hoe groot de stralingsintensiteit ook gemaakt werd. En deze grensgolflengte bleek voor ieder metaal een andere waarde te hebben. Maar juist het optreden van deze grensgolflengte bleek niet te passen in de klassieke stralingstheorie. Einsteins verklaring was echter even simpel als direct. Om een elektron uit een metaal vrij te maken, is een zekere hoeveelheid energie nodig, zeg E_0 . Dat vrijmaken kan dus gebeuren door absorptie van straling. Maar omdat volgens Einstein straling gekwantiseerd is in fotonen, moet zo'n uittredend elektron dus minstens één foton absorberen. En de frequentie van dat foton moet dan minstens gelijk zijn aan de frequentie die volgt uit:

$$E_0 = hf_0$$

Voor lagere frequenties, dus langere golflengten, zijn de fotonen gewoon niet energierijk genoeg om ook maar enige kans op succes te hebben. Voor hogere frequenties krijgen de uittredende elektronen het overschot aan energie mee als kinetische energie, volgens:

$$E_{\text{kin}} = hf - f_0$$

Daarmee hebben we een formule die de mogelijkheid biedt deze verklaring van Einstein experimenteel te toetsen. Als je immers kans

ziet om de kinetische energie van de uittredende elektronen als functie van de frequentie f te meten, dan moet je een lineair verband vinden tussen E_{kin} en f . Bovendien kun je dan de waarde van f_0 meten en uit de helling van de te vinden rechte krijg je dan de waarde van h . Deze procedure is precies wat indertijd door Millikan is gedaan en correct bevonden (fig. 7 en fig. 8).

Echter, Einsteins verklaring was niet in staat de wetenschappelijke wereld te overtuigen. Nog in 1909 beschreef Planck de veronderstelling dat lichtgolven een deeltjesstructuur zouden hebben en daardoor niet meer zouden voldoen aan de theorie van Maxwell, als:

'...ein Schritt, der in meiner Auffassung noch nicht als notwendig geboten ist.'

En in 1913 schreef Planck zelfs, samen met drie andere bekende natuurkundigen in een aanbevelingsbrief voor Einstein:

'Dass er in seinen Spekulationen auch einmal über das Ziel hinausgeschossen haben mag, wie zum Beispiel in seiner Hypothese der Lichtquanta, wird man ihm nicht allzusehr anrechnen dürfen. Denn ohne einmal ein Risiko zu wagen, lässt sich auch in der exaktesten Naturwissenschaft keine wirkliche Neuerung einführen.'

Wanneer we dan zien dat in 1921 Einstein de Nobelprijs kreeg toegewezen, juist voor zijn verklaring van het foto-elektrisch effect, dan blijkt wel dat er in die korte tijd een nogal stormachtige ontwikkeling heeft plaatsgevonden. Een belangrijke stimulans voor die ontwikkeling werd gegeven door de genoemde experimenten van Robert Millikan. Alhoewel Millikan niet geloofde in Einsteins fotonen, had hij zich toch tot taak gesteld om de voorspellingen die Einstein gedaan had, experimenteel te toetsen. Millikan zei hierover later:

'I spent ten years of my life testing that 1905 equation of Einstein's, and, contrary to all my expectations, I was compelled in 1915 to assert its unambiguous experimental verification in spite of its unreasonableness?'

Deze metingen resulteerden tevens in de eerste directe en nauwkeurige metingen van de waarde van h . Hiervoor, en voor zijn bekende meting van de elementaire lading, kreeg ook Millikan in 1923 de Nobelprijs toegewezen.

c. Het Compton-effect

Er kwamen inmiddels steeds meer aanwijzingen die pleitten voor de juistheid van de fotonhypothese. Het zou echter te ver voeren om deze allemaal te bespreken. Laten we ons daarom beperken tot het werk van Arthur Compton, die in 1923 zijn metingen publiceerde over de verstrooiing van röntgenstralen aan elektronen. Dit experiment, nu bekend als het Compton-effect, overtuigde uiteindelijk

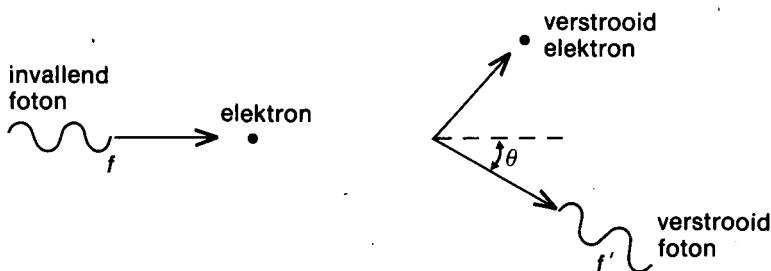


Fig. 9. Het Compton-effect.

Een foton met frequentie f botst met een elektron. Het foton wordt daardoor verstrooid over een hoek θ : na de botsing is de frequentie (f') kleiner dan de oorspronkelijke waarde f (en de golflengte langer).

ook de laatste twijfelmoedigen van de kennelijke realiteit van het foton. Compton liet in zijn experiment een bundel zeer harde röntgenstraling, dit is elektromagnetische straling van zeer hoge frequentie, op een blok paraffine vallen. Daarbij vond hij niet alleen dat er elektronen met grote kinetische energie uit het blok paraffine werden vrijgemaakt, maar ook dat de invallende röntgenstraling in alle richtingen verstrooid werd. Echter, de frequentie f' van deze verstrooide straling bleek kleiner dan de frequentie f van de invallende bundel. En wel des te kleiner naarmate de verstrooiingshoek groter was. Deze resultaten zijn alleen te verklaren als je de bundel röntgenstraling opvat als een bundel *deeltjes* waaraan je een normale impuls kunt toekennen. Dus fotonen, opgevat als deeltjes die voldoen aan de 'normale' impulsbehoudswetten zoals we die ook toepassen bij botsingen tussen biljartballen (fig. 9 en fig. 10). Op een conferentie van de American Physical Society presenteerde Compton zijn experimentele resultaten en de door hem gevonden verklaring. Hij zei daarbij:

'The present theory depends essentially upon the assumption that each electron which is effective in the scattering, scatters a complete quantum. It involves also the hypothesis that the quanta of radiation are received from definite directions and are scattered in definite directions.'

Dit laatste slaat op het feit dat hij, voor het eerst, aan een lichtkwant ook een 'deeltjesimpuls' had toegekend. Ook de wet van behoud van impuls bleek voor deze kwanten toepasbaar. Na een felle discussie – 'Compton you are a good debater, but the truth is not in you' – tussen voor- en tegenstanders, werd zijn resultaat uiteindelijk, ruwweg een jaar later, unaniem geaccepteerd. Elektromagnetische golven gedragen zich kennelijk op de een of andere onbegrepen manier ook als deeltjes!

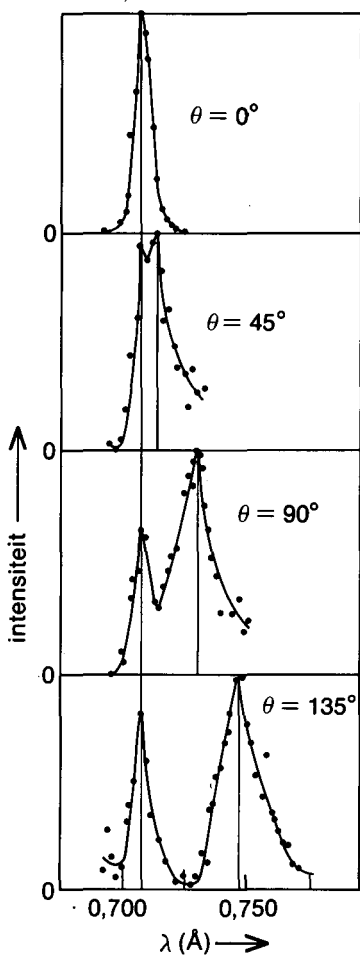


Fig. 10. Het resultaat van Comptons experiment. De figuren tonen twee pieken: van fotonen die niet gebotst hebben ($\theta = 0^\circ$) en van fotonen die wel gebotst hebben ($\theta = 45^\circ, 90^\circ$ en 135°). Hoe groter de verstrooiingshoek, hoe groter de fotongolflengte is geworden.

Het is wellicht nuttig om hier nog eens te vermelden dat de 'vijanden van het foton', waaronder ook zeer gerenommeerde natuurkundigen, daarvoor goede redenen hadden. Zo waren er, onder andere, experimenten die zouden aantonen dat een foton minstens een meter lang moest zijn. Hoe kan het dan, vroeg bijvoorbeeld Lorentz zich af, dat het menselijk oog kan zien. Immers, het menselijk oog kan dan slechts een fractie van zo'n kwantum bevatten, terwijl de kwan-

tumhypothese juist impliceert dat minstens één heel kwantum nodig is om ook maar iets te kunnen zien. En hoe zit het met reflectie en breking van licht? Blijkt daaruit niet duidelijk dat een kwantum deelbaar moet zijn? En buigings- en interferentieverschijnselen waren nog steeds alleen verklaarbaar met behulp van de golftheorie. Jammer beschrijft de toenmalige moeilijkheden als volgt:

*'This state of affairs was well characterized by Sir William Bragg when he said that physicists are using on Mondays, Wednesdays, and Fridays the classical theory, and on Tuesdays, Thursdays and Saturdays the quantum theory of radiation. The use of two such mutually exclusive, and therefore contradictory, notions was rightfully regarded as a serious dilemma at the very foundations of physical science!'*⁸

1.2.3 Zijn deeltjes golven?

'I was perfectly aware when I put forward the theory of the nuclear atom that according to classical theory the electron ought to fall into the nucleus...' – ERNEST RUTHERFORD¹⁰

a. Het Rutherford-atoom

Tot nu toe hebben we het alleen gehad over het 'deeltjesgedrag' van elektromagnetische straling als het in wisselwerking treedt met materie. Maar over het gedrag van de materie zelf hebben we eigenlijk nog niet gesproken. Echter, ook wat dat betreft waren er problemen opgedoken. Daar willen we nu eerst wat nader op ingaan.

Wanneer we het hebben over deeltjes als bouwstenen van de materie, dan komt direct de vraag naar voren: hoe kunnen we begrijpen dat de materie is, zoals ze is? Dit is een minder gemakkelijke vraag dan het misschien lijkt. Weisskopf¹ zegt bijvoorbeeld:

*'One must be impressed by the fact that pure materials show identical properties, no matter where they come from or what their previous history has been. Two pieces of gold, mined at two different locations and treated in very different ways, cannot be distinguished from one another. All the properties of each individual gold atom are fixed and completely independent of its previous history. It is the existence of well-defined specific qualities, in which nature abounds, that runs counter to the spirit of classical physics.'*¹

Laten we eens concreter nagaan waarom de klassieke natuurkunde dan niet het gedrag van atomen kan verklaren. Tot 1911 was het atoommodel zoals dat in 1904 was voorgesteld door J. J. Thomson, het meest geaccepteerde (plumpuddingmodel). Thomson had gesuggereerd dat een atoom zou bestaan uit een soort bol van positieve elektrische lading, met daar binnenin een gelijke hoeveelheid negatieve lading, verdeeld over een aantal elektronen. Met dit model was

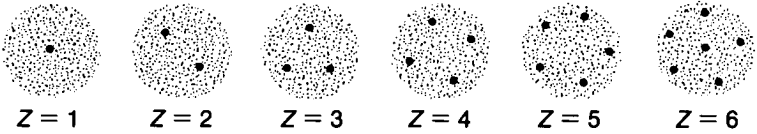


Fig. 11. Het atoommodel van Thomson.
Een aantal mogelijke, stabiele configuraties van negatieve elektronen in een bol van positieve lading. Als krenten in een plumpudding.

Thomson is staat om te berekenen dat alleen bepaalde elektronenconfiguraties in de 'positieve bol' een stabiele toestand konden opleveren. Dit was natuurlijk een eerste vereiste om het bestaan van stabiele atomen te kunnen verklaren, terwijl toch rekening werd gehouden met het experimentele gegeven dat het elektron een atombouwsteen moest zijn.

Dit Thomson-atoom was in staat om een aantal eigenschappen, vooral van chemische aard, althans kwalitatief begrijpelijk te maken, hoewel er toch ook nog veel problemen onbegrepen bleven. De doodsteek voor Thomsons model werd echter gegeven door de experimenten van Ernest Rutherford, over de verstrooiing van α -deeltjes (1911). Rutherford beschreef dit later als volgt (zie ook fig. 12 en fig. 13):

'One day Geiger came to me and said: "Don't you think that young Marsden whom I am training in radioactive methods, ought to begin a small research?" Now I had thought that too, so I said: "Why not let him see if any α -particles can be scattered through a large angle?" I

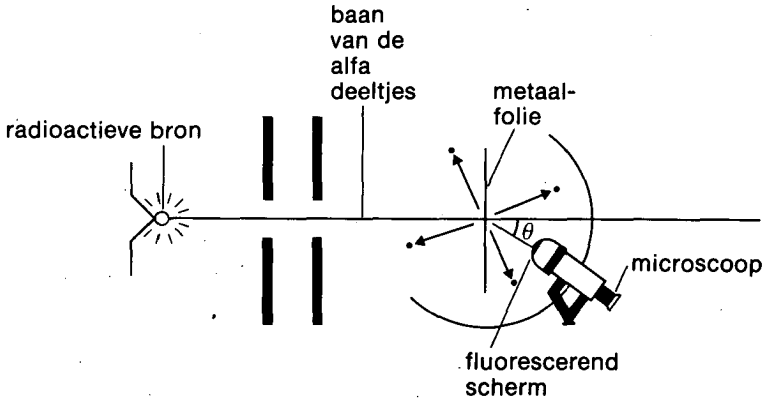


Fig. 12. Het experiment van Geiger en Marsden.
Alfadeeltjes worden op een metaal-folie geschoten en met een microscoop wordt waargenomen over welke hoeken ze verstrooid worden.

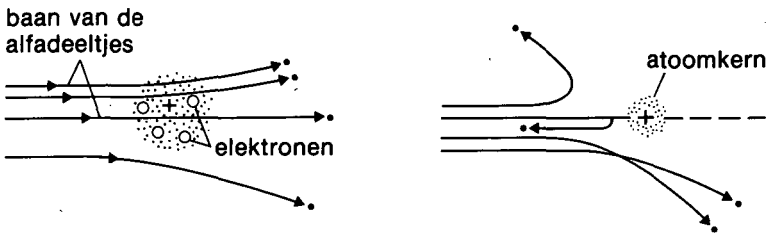


Fig. 13. Verstrooiing van alfadeeltjes door het Thomson-atoom en door het Rutherford-atoom. In het Thomson-atoom zat geen harde kern zodat er geen alfadeeltjes afgebogen worden over grote hoeken. Om dat te verklaren, voerde Rutherford juist de atoomkern in.

*may tell you in confidence that I did not believe that they would be, since we knew that the α -particle was a very fast, massive particle, with a great deal of (kinetic) energy, and you could show that if the scattering was due to the accumulated effect of a number of small scatterings, the chance of an α -particle being scattered backward was very small. Then I remember two or three days later Geiger coming to me in great excitement and saying: "We have been able to get some of the α -particles coming backward..." It was quite the most incredible event that has ever happened to me in my life. It was almost as incredible as if you fired a 15-inch shell at a piece of tissue paper and it came back and hit you. On consideration, I realized that this scattering backward must be the result of a single collision, and when I made calculations I saw that it was impossible to get anything of that order of magnitude unless you took a system in which the greater part of the mass of the atom was concentrated in a minute nucleus. It was then that I had the idea of an atom with a minute massive centre, carrying a charge.'*¹⁰

En hiermee deed het begrip atoomkern zijn intree in de geschiedenis. Hoe succesvol dit model ook was voor het verklaren van de verstrooiingsexperimenten, het riep ook veel nieuwe vragen op. Hoe is de verdeling van de elektronen rond de kern? Als een atoom bestaat uit een positief geladen kern, omgeven door negatief geladen elektronen, hoe kan het dan blijven bestaan? Waarom vallen de elektronen vanwege de aantrekkende Coulomb-kracht tussen kern en elektronen niet direct op de kern? Deze laatste vraag doet ons misschien direct denken aan ons zonnestelsel. De planeten vallen niet op de zon, omdat ze er in banen omheen draaien en de gravitatiekracht tussen de zon en de planeten juist voldoende is om de centripetale kracht te leveren die de planeten in hun baan kan houden. Het Rutherford-model van het atoom zou dus een soort atomair zonne-

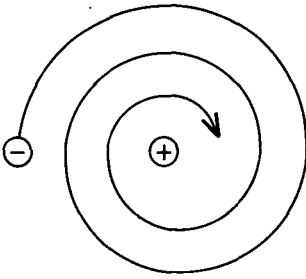


Fig. 14. Een elektron dat rond de kern beweegt, moest in het model van Rutherford onder uitzending van straling steeds dichtër naar de kern spiraliseren.

stelsel moeten zijn. Maar dat loste niet alle problemen op, integendeel. Volgens de klassieke stralingstheorie zendt een geladen deeltje dat versneld wordt, elektromagnetische straling uit. Het verliest daarmee dus energie. Dit zou betekenen dat een elektron dat rond de kern draait, dit in een spiraalbaan moet doen, om na korte tijd toch op de kern te vallen (zie fig. 14).

Het Rutherford-model kon dus niet stabiel zijn. Maar er was nog meer, namelijk juist datgene wat Weisskopf, zoals we eerder zagen, de *identiteit* van een atoom noemt. En deze identiteit, bijvoorbeeld dat een atoom goud *altijd en overal* een atoom goud is en niets anders, is niet te verklaren met Rutherfords model. De identiteit van individuele atomen is heel duidelijk niet in overeenstemming met wat we van een mechanisch systeem, bijvoorbeeld zoals ons zonnestelsel, kunnen verwachten. De vorm en grootte van de banen zouden dan sterk moeten afhangen van de geschiedenis van het systeem. En het zou buitengewoon onwaarschijnlijk zijn om twee atomen te vinden met precies dezelfde vorm en grootte. Dit probleem wordt heel duidelijk als we een gas, zoals lucht, beschouwen. De atomen in lucht botsen vele miljoenen malen per seconde. Volgens de klassieke mechanica zou elk van deze botsingen de baan van de elektronen grondig veranderen. In werkelijkheid echter blijken de atomen na iedere botsing volledig onveranderd te blijven.

b. Het Bohr-atoom

Het was dus duidelijk dat het Rutherford-atoom slechts een tussenstap kon zijn naar een beter model. Maar de vraag was dan wel hoe dit eruit zou kunnen zien. Het was de Deen Niels Bohr, die de volgende belangrijke stap zette. Hij liet zich daarbij leiden door Rutherfords ideeën, maar vooral ook door de hypothesen van Planck en Einstein. Bovendien waren er toentertijd al vele experimentele gegevens bekend betreffende de spectraallijnen die door

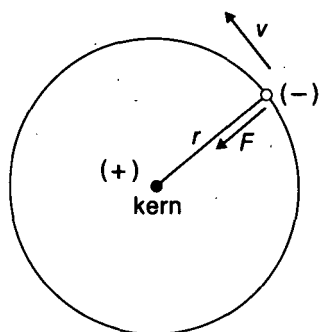


Fig. 15. Het Bohr-atoom.

Het elektron draait in een cirkelbaan rond de kern, waarbij de aantrekkende Coulomb-kracht juist de benodigde centripetale kracht levert.

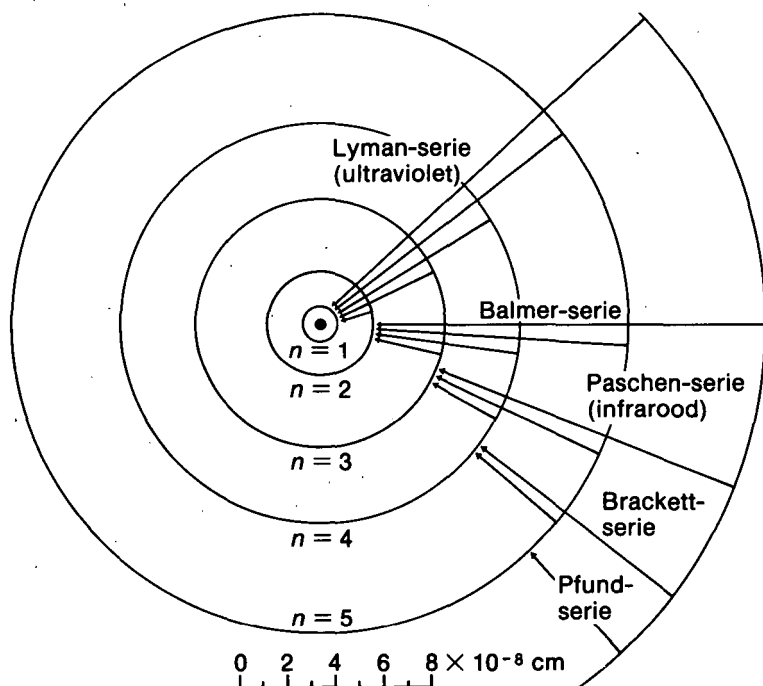


Fig. 16. In het H-atoom kan, volgens Bohr, het elektron in verschillende banen rond de kern draaien, aangegeven met het kwantumgetal n . Vanuit een bepaalde baan kan het terugspringen naar iedere meer naar binnen gelegen baan, onder uitzending van straling. Al deze mogelijke spectraallijnen zijn gerangschikt in spectraalseries (op grond van de eindbaan van het elektron) en genoemd naar hun ontdekkers.

verschillende atomen worden uitgezonden. Deze spectra waren wel op zeer ingenieuze wijze geordend tot allerlei spectraalseries, maar de achtergrond daarvan werd totaal niet begrepen. Zo was bijvoorbeeld J. J. Balmer, een leraar uit Bazel, er al in 1885 in geslaagd een relatie te ontdekken tussen de golflengten van een viertal lijnen uit het waterstofspectrum en deze relatie uit te drukken in een wiskundige formule. Maar deze formule had hij eigenlijk alleen kunnen vinden vanwege zijn voorliefde voor gegoochel met cijfers en zeker niet omdat de achtergrond van deze relatie begrepen werd. Bohr zei daarover later echter:

'As soon as I saw Balmer's formula, the whole thing was immediately clear to me.'

Dit bracht Bohr er in 1913 toe om te postuleren dat een atoom alleen kan bestaan in bepaalde 'stationaire toestanden' waarin de elektronen zich rond de kern bewegen zonder dat er stralingsenergie wordt uitgezonden. Dit laatste is, zoals we gezien hebben, volledig in strijd met de 'klassieke' theorie van Maxwell. Bohr hield echter, net als Planck, zo lang mogelijk vast aan de vertrouwde klassieke mechanica, ook voor zijn model. Daarom veronderstelde hij dat de beweging van een elektron in een bepaalde stationaire baan, wel beschreven moest worden door de wetten van Newton, alhoewel het toegelaten zijn van *juist die* baan, hierdoor *niet* verklaard werd.

Op deze manier werd dus de 'identiteit' van een atoom, zoals eerder omschreven, als het ware min of meer gepostuleerd. Een ander postulaat was dat er alleen straling kan worden uitgezonden wanneer het atoom overgaat van de ene stationaire toestand (met energie E_1) in de andere (met energie E_2). Daarbij wordt dan een energiekwantum uitgezonden, volgens:

$$E_1 - E_2 = hf$$

Dit postulaat is een hoeksteen om het grote succes van Bohrs model te kunnen begrijpen. Immers, juist hierdoor leek het mogelijk om, althans in principe, die raadselachtige regelmatigheid in alle bekende spectraalseries, terug te voeren tot één oorzaak. J. J. Balmer had wat dit betreft al in 1885 profetische woorden gesproken door te verklaren dat naar zijn mening waterstof, meer dan enig andere substantie, was voorbestemd om nieuwe wegen te openen naar de kennis van de structuur en eigenschappen van de materie. Hij leek volledig gelijk te krijgen toen Bohr het waterstofspectrum met grote nauwkeurigheid kon verklaren. Zo was bijvoorbeeld de afwijking tussen de door Bohr voorspelde en de experimenteel bepaalde waarde van de Rydberg-constante slechts van de orde van 0,004%.¹¹ Aanvankelijk werd, ondanks de vermelde successen, Bohrs model toch met gemengde gevoelens ontvangen. Zo zei Von Laue tijdens

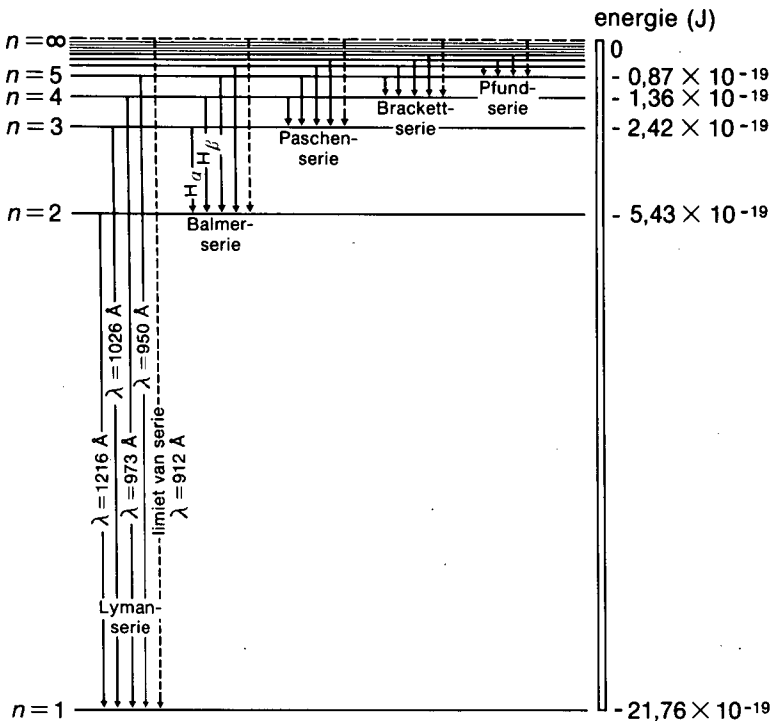


Fig. 17. Het energieniveauschema van het H-atoom, met de mogelijke energieovergangen en bijbehorende spectrale golflengten, gerangschikt in spectraalseries.

een discussie over Bohrs theorie:

‘Das ist Unsinn, die Maxwellschen Gleichungen gelten unter allen Umständen, ein Elektron auf Kreisbahn muss strahlen.’

Waarop Einstein, die ook aanwezig was, opstond en verklaarde:

‘Sehr merkwürdig, da muss etwas dahinter sein; ich glaube nicht dass die Rydbergkonstante durch Zufall in absoluten Werten ausgedrückt richtig heraus kommt.’

Deze laatste mening bleek al snel de overhand te krijgen. En ook zelfs vurige supporters, zoals bijvoorbeeld James Jeans, die zei:

‘Dr. Bohr has arrived at a most ingenious and suggestive, and I think I must add, convincing explanation of the laws of the spectral series.’

Zo begon Bohrs model zijn geschiedenis. Een geschiedenis die een heel duidelijk begin had, maar ook een einde. Want ook Bohrs model zou uiteindelijk niet langer voldoen. Ook dit bleek slechts een stap, zij het een uiterst belangrijke, in een lange ontwikkeling. Het zou tenslotte vervangen worden door het ‘kwantummechanische

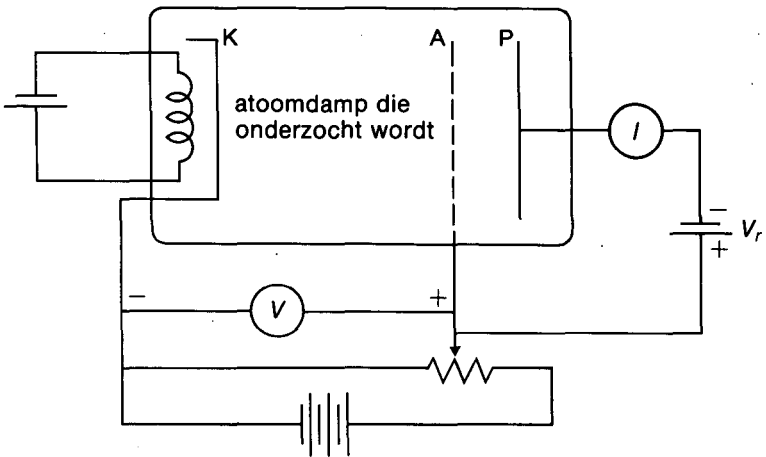


Fig. 18. De opstelling van Franck en Hertz.

Vanwege de aangelegde variabele positieve spanning V worden elektronen uit de kathode K door de anode A aangetrokken. De meeste elektronen vliegen echter door de roosteranode heen om daarna de plaat P te treffen. Deze heeft een kleine negatieve spanning V_r (≈ 1 V) ten opzichte van de anode. Als de spanning V nu juist gelijk is aan de aanslagenergie van de dampatomen, dan verliezen de meeste elektronen hun kinetische energie bij een aanslagbotsing. Ze zijn daarna niet meer in staat de negatieve spanning V_r te overwinnen. Als gevolg daarvan daalt dan de plaatstroom I .

atoom'. Maar zover zijn we nog niet.

c. De proef van Franck en Hertz

De meest directe bevestiging voor Bohrs postulaten werd verkregen uit een serie experimenten die vanaf 1914 werden gedaan door James Franck en Gustav Hertz. Franck en Hertz lieten de door een kathode K (zie fig. 18) uitgezonden elektronen, versneld door de aangelegde anodespanning V , door een hoeveelheid kwikdamp naar een anode A lopen. De door de plaat P opgevangen elektronenstroom I werd gemeten, waarbij P een iets lagere spanning had dan de anode. De gemeten plaatstroom I had een verloop als getekend in fig. 19. Steeds om de 4,9 V bleek een sterke daling op te treden. De verklaring die hier uiteindelijk voor werd bedacht, is dat elektronen met een kinetische energie van 4,9 eV juist in staat zijn om het eerste energieniveau van kwikatomen aan te slaan. De elektronen die aldus inelastisch hebben gebotst, hebben daarna onvoldoende kinetische energie over om nog de plaat P te kunnen bereiken. En vandaar dat de gemeten stroom dus sterk daalt, steeds bij een anodespanning die een veelvoud van 4,9 V is.

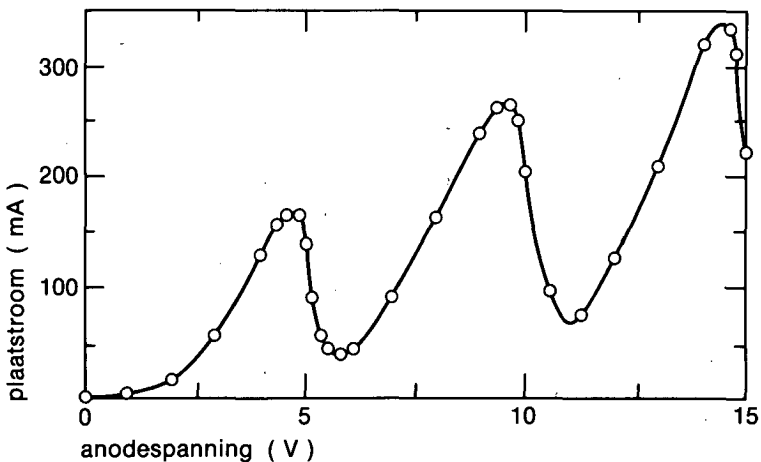


Fig. 19. Resultaat van de proef van Franck en Hertz.

De afstand tussen de minima bedraagt steeds ongeveer 4,9 V. Het eerste minimum echter ligt, vanwege apparatuurtechnische details, bijna bij 6 V.

Met deze experimenten was er nu, ook vanuit een geheel andere hoek dan de lijnenspectra, een duidelijke aanwijzing voor het bestaan van stationaire toestanden in een atoom. Overigens hadden Franck en Hertz dit zelf nog niet in de gaten toen zij hun experimenten uitvoerden. Zij interpreteerden hun metingen op een heel andere manier, namelijk alsof de elektronen bij een spanning van 4,9 V de kwikatoemen zouden ioniseren. Toen Bohr van deze metingen hoorde, kon hij echter al vlug aantonen dat 4,9 eV een veel te kleine hoeveelheid energie is om als ionisatie-energie te kunnen fungeren. De verklaring volgde direct uit zijn model. De gemeten energiewaarde moest gelijk zijn aan de energie die nodig is om het kwikatoom van de grondtoestand in de eerste stationaire toestand te brengen. In een interview, gehouden in 1961, lichtte Franck zijn vergissing als volgt toe:

'It might interest you that when we made the experiments that we did not know Bohr's theory. We had neither read nor heard about it. Nobody discussed Bohr's paper. Why not? The reason is that fifty years ago one was so convinced that nobody would, with the state of knowledge we had at that time, understand spectral line emission, so that if somebody published a paper about it, one assumed, "probably it is not right". So we did not know it...'

Toch hadden hun experimenten zo'n belangrijke invloed op het aanvaarden van Bohrs model dat Franck en Hertz hiervoor in 1925 de Nobelprijs mochten delen.

d. De Broglies hypothese

Bohrs model vond enerzijds steeds meer experimentele ondersteuning, maar anderzijds doken er toch ook voortdurend nieuwe problemen op. Dit leidde er dan ook toe dat Bohrs model steeds opnieuw moest worden aangepast en verfijnd. Een belangrijke verbetering werd bijvoorbeeld gegeven door Sommerfeld, die beargumenteerde dat behalve cirkelbanen, ook ellipsbanen van de elektronen moesten worden toegelaten (het Bohr-Sommerfeld-atoom). Maar ondanks alle verbeteringen bleven er fundamentele vragen met betrekking tot het Bohr-model overeind staan. De belangrijkste daarvan, zouden we als volgt kunnen formuleren.

1. *Waarom* zijn juist de toegestane stationaire toestanden mogelijk en geen andere? Welke regel is bepalend voor de 'toelating' van een toestand?

2. *Waarom* en *hoe* wordt er straling uitgezonden? Wat is de diepere reden dat een elektron 'overspringt' van de ene toestand naar de andere?

Het waren de antwoorden op deze vragen waar koortsachtig naar gezocht werd. Er werden allerlei 'kwantumregels' ingevoerd, vooral als antwoord op de eerste vraag, maar de diepere achtergrond van deze regels was veelal duister. Verreweg de belangrijkste stap in de goede richting werd in 1924 gezet door de Franse prins Louis-Victor de Broglie. Oorspronkelijk had hij geschiedenis gestudeerd, maar hij was door zijn broer Maurice, die natuurkundige was, al vroeg in aanraking gekomen met de toenmalige fundamentele problemen in de natuurkunde. Later zei hij:

Je m'étais promis de consacrer tous mes efforts à comprendre la véritable nature des mystérieux quanta que Max Planck avait introduits dans la Physique Théorique, mais dont on n'apercevait pas encore la signification profonde.'

Juist zijn diepe belangstelling voor filosofische problemen bracht hem ertoe om de geschiedenis vaarwel te zeggen en over te stappen naar de natuurkunde. Misschien was het wel vooral die filosofische instelling die hem uiteindelijk tot zijn belangrijke ideeën heeft gebracht. Zo was hij zeer geïmponeerd door Einsteins idee omtrent de invoering van fotonen, en daarmee van de golf-deeltje-dualiteit van het licht. De Broglie liet zich in zijn redeneringen vooral leiden door algemene, fundamentele principes. Dit moest ook wel omdat er nog geen experimenten gedaan waren waar hij zich op kon beroepen.

Zijn redenering laat zich in het kort als volgt weergeven. Alles wat we op aarde, of elders, tegenkomen bestaat uit materie en straling. Voor straling had Einstein, zoals gezegd, het golf-deeltje-dualisme geïntroduceerd. De Broglie was nu zozeer overtuigd van het feit dat alles in de natuur onderworpen moet zijn aan een fundamentele

symmetrie, dat hij, op grond daarvan ook een deeltje-golf-dualisme voor materie postuleerde. Geleid door deze overtuiging, ging De Broglie aan de slag. Uitgaande van Einsteins relativiteitstheorie, kwam hij uiteindelijk tot de nu zo beroemde 'De-Broglie-vergelijking':

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Aan elke deeltje met massa m en snelheid v kende hij ook een golfkarakter toe, waarbij de golflengte λ van deze 'materiegolven' door deze formule gegeven wordt. Het bleek al direct dat De Broglies idee geen slag in de lucht kon zijn. Immers, met gebruikmaking van deze formule was direct in te zien, waarom er in een atoom slechts bepaalde toestanden stationair konden zijn. De 'Bohrse banen' hadden daarmee een verklaring gevonden: voor een elektron waren alleen die banen mogelijk waarop juist een geheel aantal golflengten past (zie fig. 20). Is dat niet het geval, dan treedt destructieve interferentie op en kan de baan dus niet stationair zijn. Om geen verkeerd idee te laten groeien, moet ik onmiddellijk toevoegen dat ook dit beeld van het atoom achteraf niet juist is gebleken. Maar het was ongetwijfeld weer een enorme stap in de goede richting. Ook al waren er veel problemen met de 'materiegolven'. Zelfs De Broglie zelf wist eigenlijk ook niet hoe hij zijn 'golven' precies moest interpreteren. 'Wat er nu precies golfde' was ook hem onbekend. Desalniettemin vond hij onmiddellijk steun voor zijn idee bij Einstein, die verklaarde dat, volgens hem, De Broglie '*has certainly lifted a corner of the great veil*'. Het zal dan ook nu niemand meer verbazen dat in 1929 De Broglie aan de beurt was om zijn Nobelprijs in ontvangst te nemen. Maar daar was eerst nog iets aan vooraf gegaan.

e. Het experiment van Davisson en Germer

Het was al bij voorbaat duidelijk dat De Broglies idee pas volledig geaccepteerd zou kunnen worden als er ook experimentele aanwijzingen zouden zijn die het bevestigden. De Broglie zelf realiseerde zich dat maar al te goed. Tegelijk met zijn theorie gaf hij ook aan waar men experimenteel het best zou kunnen gaan zoeken. Hij schreef:

'Un flot d'électrons traversant une ouverture assez petite présenterait des phénomènes de diffraction. C'est de ce côté qu'il faudra peut-être chercher des confirmations expérimentales de nos idées.'

Het bleek precies de goede richting te zijn die De Broglie had aangegeven. Zij het dan dat het, vooral vanwege de technische moeilijkheden die deze experimenten toen met zich meebrachten, nog tot 1927 duurde voordat het overtuigende bewijs geleverd werd. In dat jaar

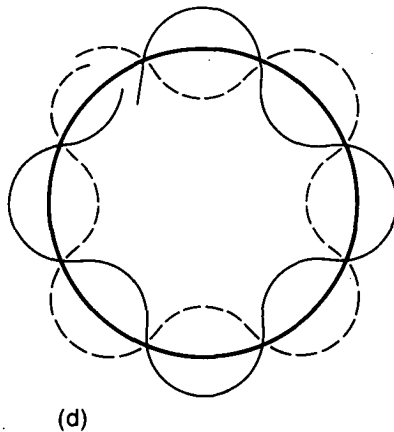
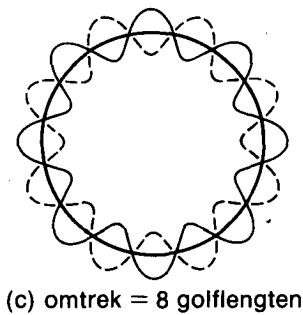
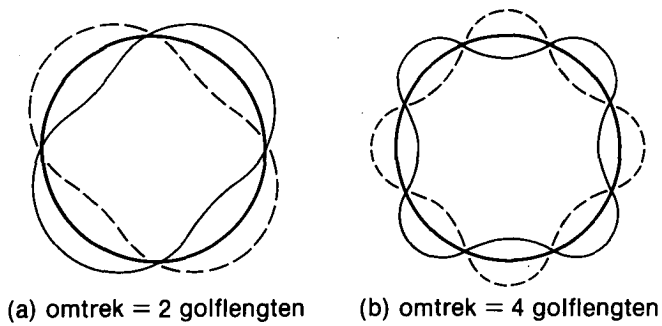


Fig. 20. Verklaring van de 'Bohrse banen' volgens De Broglie. Als de baanomtrek juist een geheel aantal malen de elektrongolflengte bedraagt, is een stabiele baan mogelijk. Anders niet.

publiceerden Davisson en Germer enerzijds en G.P. Thomson anderzijds hun nu beroemde, maar uiterst moeilijke experimenten. Deze heren lieten een bundel versnelde elektronen uit een elektro-

nenkanon, loodrecht op een nikkelkristal vallen (zie fig. 21). Met een detector keken ze hoeveel elektronen er in een bepaalde, variabele, richting (gegeven door de hoek θ) verstrooid werden, waarbij ze ook nog de versnelspanning van de elektronen konden variëren. Hun

invallende
elektronenbundel

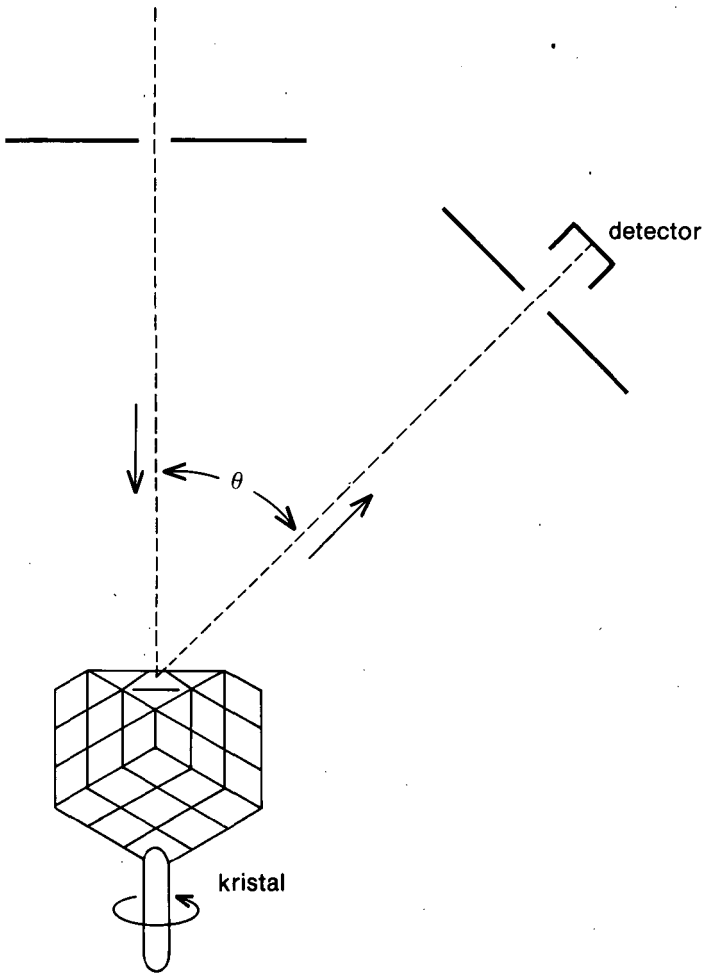


Fig. 21. Experiment van Davisson en Germer. Een elektronenbundel valt loodrecht op een nikkelkristal. Met een detector wordt gemeten hoeveel elektronen er in een bepaalde richting, gegeven door de hoek θ , verstrooid worden.

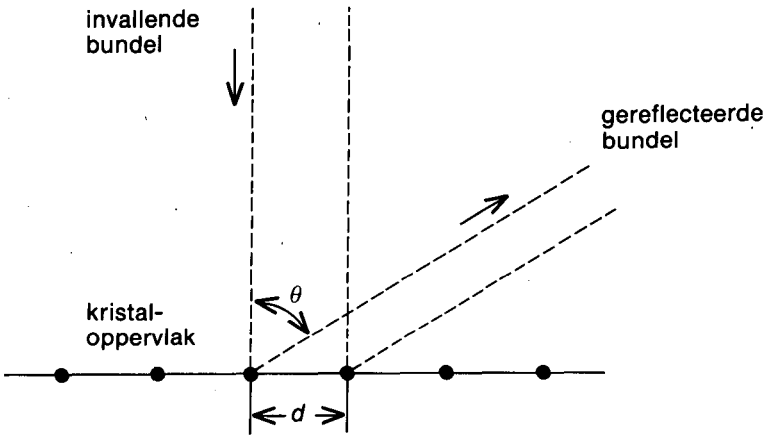


Fig. 22. Elektronen die verstrooid worden aan verschillende atomen van het kristaloppervlak, interfereren constructief als hun weglengteverschil ($2d \sin \theta$) een geheel aantal maal hun golflengte bedraagt.

verrassende resultaten konden ze alleen interpreteren wanneer ze aannamen dat elektronen zich gedragen als golven die aan de verschillende atomen van het kristal verstrooid worden. De maxima in het diffractiepatroon blijken op te treden in die richtingen waarvoor $2d \sin \theta$ gelijk is aan een geheel veelvoud van de elektronengolflengte (zie fig. 22).

Deze experimenten waren in die tijd vooral zo moeilijk vanwege de benodigde vacuümtechniek, die nog slecht ontwikkeld was. Maar, toen het dan toch uiteindelijk gelukt was, kon een tevreden Davisson het volgende verklaren:

‘During the last few years we have come to recognize that there are circumstances in which it is convenient, if not indeed necessary, to regard electrons as waves rather than as particles, and we are making more and more frequent use of such terms as diffraction, reflection, refraction and dispersion in describing their behaviour.’

Uiteraard kwam ook hier weer een Nobelprijs aan te pas. Davisson en Thomson deelden deze in 1937. Achteraf bleek trouwens dat er toch ook al eerder experimentele aanwijzingen waren geweest voor het bestaan van ‘materiegolven’, maar dat ze alleen niet als zodanig waren herkend. Na Davissons experimenten was in ieder geval De Broglies idee overtuigend bewezen. Naast het golf-deeltje-dualisme voor elektromagnetische straling bestond ook een deeltje-golf-dualisme voor materie. Dit was een belangrijk resultaat. Maar hoe moest het nou verder? Wat waren de fundamentele regels die dit begrijpelijk konden maken? Aan het antwoord op deze vragen werd

inmiddels hard gewerkt. En er waren ook al belangrijke vorderingen gemaakt. Maar daar gaan we straks op in.

1.3. Is er orde in de chaos?

1.3.1 Het proces

In het voorgaande heb ik in grote lijnen enkele van de belangrijkste natuurkundige ontwikkelingen geschetst zoals deze in het begin van deze eeuw plaatsvonden. Daarbij heb ik nog veel belangrijke zaken onbesproken gelaten. Zo is er, om een paar voorbeelden te noemen, nog niets gezegd over de vragen die zich voordeden bij de pogingen om het verschijnsel van de chemische binding te verklaren; of van de opbouw van het periodiek systeem; of van de waargenomen moleculspectra. Ook zijn we niet ingegaan op alle verschijnselen die *niet* verklaard konden worden door Bohrs atoommodel, zelfs niet in 'aangepaste' vorm. En toch waren er zulke verschijnselen, en wat erger was, er kwamen er steeds meer.

Ondanks deze beperkingen, of eigenlijk liever, juist dank zij deze beperkingen, hoop ik toch dat de 'moraal' van het verhaal is overgekomen. Deze moraal zou je kunnen samenvatten door te zeggen dat de natuurkunde in de geschetste periode in een revolutionair stadium was terechtgekomen. Van de rustige zekerheid van de vorige eeuw was weinig overgebleven. En de grote vraag was dan ook hoe men weer opnieuw in rustiger vaarwater terecht zou kunnen komen. Rustiger betekent dan in dit verband dat men weer het gevoel kon hebben de natuur te begrijpen, zonder opnieuw voor grote verrassingen te komen staan. In fig. 23 op blz. 48 heb ik nogmaals alle besproken onderwerpen bij elkaar gezet. Dit schema bedoelt echter meer te zijn dan alleen maar een chronologisch overzicht van afzonderlijke 'gebeurtenissen'. Het wil ook de samenhang tussen al deze gebeurtenissen nadrukkelijk demonstreren. En daardoor wil het tevens een illustratie zijn van de manier waarop de natuurkunde zich ontwikkelt; dus van 'het proces dat natuurkunde heet'.

1.3.2 Rotsvaste zekerheden?

Maar fig. 23 heeft nog een bedoeling; een diepere achtergrond zo je wilt. Immers, in het schema zijn de diverse gebeurtenissen verbonden door verschillende lijnen. Wat wordt daar mee bedoeld?

Om dit te kunnen verklaren, wil ik eerst wat dieper ingaan op de manier waarop de natuurkundige kennis is opgebouwd. Of, om het anders te zeggen, op de structuur van de natuurkunde als weten-

schap. Als leidraad daarbij kunnen we ons de vraag stellen: wat wil de natuurkunde eigenlijk? ¹² Wat is het doel ervan?

Wat slordig geformuleerd zouden we kunnen zeggen dat de natuurkunde een wetenschapsgebied is dat probeert ons inzicht te verrijken in de 'wereld waarin we leven'. En dat zich daarbij vooral beperkt tot de eigenschappen van de 'dode materie'. Hoe doet ze dat; hoe gaat ze daarbij te werk? Wel, er gebeuren allerlei dingen om ons heen, en het minste wat we kunnen doen om deze gebeurtenissen te begrijpen, is ze eerst zorgvuldig bestuderen. Meestal doen we dat omdat bepaalde gebeurtenissen onze nieuwsgierigheid opwekken. Er dringt zich dan een vraag aan ons op, een probleem dat we willen oplossen. En daartoe moeten we allereerst die gebeurtenissen nauwkeurig waarnemen. In zijn eenvoudigste vorm betekent dit waarnemen dat we dingen zien, of horen; of ruiken en proeven; of voelen; kortom zintuiglijke waarnemingen.

De eerste taak van een natuurkundige is nu dat hij al deze afzonderlijke waarnemingen nauwkeurig beschrijft en probeert te ordenen. En daarbij vooral dat hij probeert te ontdekken of er niet een zekere 'regelmaat' in te bespeuren valt. Als dat zo is, dan is het zaak om zo'n regelmaat zo nauwkeurig mogelijk te formuleren. En daarmee heeft hij dan, zoals hij zegt, een 'natuurwet' gevonden. Hij heeft een zekere orde ontdekt in iets wat eerst niet ordelijk leek. En daarmee vaak een oplossing voor het gestelde probleem of de nieuwsgierige vraag. Deze natuurwetten kunnen nog erg eenvoudig zijn, zoals bijvoorbeeld: 'de winter volgt altijd na de zomer', of: 'een voorwerp dat je loslaat, valt altijd naar beneden', maar ook veel ingewikkelder zoals: 'het spectrum van waterstof is een lijnenspectrum'. Zo heeft een ieder ongetwijfeld al heel wat natuurwetten leren kennen.

Echter, uit het voorgaande volgt direct een principiële moeilijkheid, die zich misschien het best als volgt laat omschrijven. De formulering van elke natuurwet is noodzakelijkerwijs altijd gebaseerd op een *beperkt* aantal eerder gedane waarnemingen. En toch neem je op grond van zo'n beperkt aantal waarnemingen aan dat de wet die je

... zekerheid ...



gevonden hebt, altijd en overal zal gelden. Het is duidelijk dat hier een probleem zit, dat je van de absolute juistheid van een wet strikt genomen nooit volstrekt zeker kunt zijn.¹³ Het kan in principe altijd gebeuren dat je bij de analyse van je waarnemingen bepaalde oorzaken over het hoofd hebt gezien. Bijvoorbeeld omdat hun gevolgen zich pas op zeer lange termijn openbaren. Of er kunnen zich andere verrassende ontwikkelingen voordoen, die je niet kende op het moment dat je je waarnemingen deed. Wie weet er bijvoorbeeld zeker dat er nooit een zeer grote meteor tegen de aarde zal botsen en haar uit haar baan om de zon stoten? Zal dan nog steeds na elke winter een zomer volgen? En de ruimtevaarder in zijn ruimteschip zal stellig ontkennen dat alles wat je loslaat, ook naar beneden valt. Wat we uit deze, misschien wat overdreven voorbeelden kunnen leren, is dat we altijd bereid moeten zijn om de formulering van onze natuurwetten in het licht van nieuwe waarnemingen opnieuw te bezien. En dat is een conclusie die we moeten onthouden!

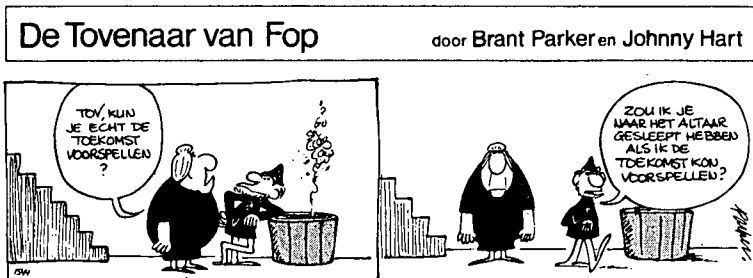
1.3.3 Empirische en theoretische wetten

Een volgende vraag die we kunnen stellen is: wat doen we met zo'n natuurwet? Wat is het nut ervan? Het antwoord hierop is in zekere zin tweeledig, en wel: verklaren en voorspellen. Laat ik dat weer aan hetzelfde eenvoudige voorbeeld toelichten.

De wet 'na elke winter volgt een zomer' geeft ons de gelegenheid om in het vervolg te voorspellen wat er gebeurt na een winter. Dit is natuurlijk een geweldig belangrijk gebruik van natuurwetten, want hierdoor kunnen we ons voorbereiden op wat komen gaat. Anderzijds heeft deze wet ook een verklarende 'potentie'. Als het zomer wordt, kunnen we zeggen: 'O, ja natuurlijk, dat klopt ook, want de winter is voorbij, dus moet het nu inderdaad zomer worden.'

Nu hoor ik al van diverse kanten protesten klinken, onder het motto: 'Dat is flauw, dat is toch nauwelijks een verklaring!' Dat

... voorspellen ...



lijkt, oppervlakkig gezien, misschien een terechte opmerking. En daarmee zijn we dan aangekomen bij een punt dat ook bijzonder belangrijk is voor het begrijpen van de kwantummechanica.

De genoemde 'zomer-winterwet' is een wet die is ontstaan uit het ordenen van directe zintuiglijke waarnemingen. Ze doet eigenlijk niet meer dan deze directe waarnemingen ordelijk beschrijven. De 'verklarende en voorspellende kracht' van zo'n wet, die ook wel een empirische wet wordt genoemd, is dan ook beperkt. Je kunt er eigenlijk nauwelijks iets uit afleiden, wat al niet in de directe formulering zit opgesloten. Toch zijn dit soort wetten het begin, en in zekere zin ook het einde, van alle natuurwetenschap. Maar de natuurwetenschap stelt zich niet tevreden met het formuleren van empirische wetten. Men wil deze wetten ook *begrijpen*, dat wil zeggen: men stelt steeds opnieuw de vraag naar het 'hoe' van de verschijnselen die men waarneemt. Men zoekt dus naar oorzaken *achter* de verschijnselen. Ofwel: men zoekt naar dieperliggende regels en principes, die de 'oppervlakteverschijnselen' verklaren. Het formuleren van zulke dieperliggende regels of wetten, is wat men gewoonlijk aanduidt met 'het opstellen van een theorie'. Het zijn vaak deze 'theoretische wetten' die ons het gevoel geven dat we onze waarnemingen pas echt begrijpen. Een theoretische wet geeft dus een diepere en meer bevredigende verklaring. Dit 'dieper zijn' van de verklaring uit zich ruwweg in twee aspecten.

Allereerst verwachten we van een theoretische wet, of van een theorie, dat ze liefst een heleboel verschijnselen, en dus ook empirische wetten, met elkaar in verband brengt. Anders gezegd, dat ze van vele waarnemingen een gemeenschappelijke oorzaak bloot legt. Dit betekent dat de verklarende, en vooral ook de voorspellende kracht van een theoretische wet meestal veel groter is dan van een empirische wet.

1.3.4 Abstractieniveau

Een tweede reden waarom we een theoretische verklaring 'dieper' willen noemen, is omdat het abstractieniveau van een theoretische wet veelal hoger zal zijn. Hieronder verstaan we bijvoorbeeld het volgende. In een theorie kunnen begrippen worden ingevoerd die alleen *indirect* waarneembaar zijn. Neem bijvoorbeeld, als duidelijk geval, het begrip 'elektron'. Niemand heeft ooit een elektron *direct* waargenomen. Toch nemen we aan dat ze bestaan. Waarom? Wel, wanneer je aanneemt dat het elektron bestaat, en bepaalde eigenschappen heeft – zoals massa, lading enz. – dan blijken ineens een heleboel experimentele *waarnemingen* begrijpelijk te worden. Je kunt deze waarnemingen verklaren door het 'theoretische elektron'

in te voeren. En je kunt het begrip elektron vervolgens gebruiken om nieuwe *verschijnselen* te voorspellen. En als je die dan vervolgens ook weer waarneemt, dan voel je je gesterkt in de juistheid van je theorie. Maar het blijft een feit dat het elektron zelf nog nooit gezien is! Kortom, het is en blijft een abstract, theoretisch begrip.

Welnu, de gang van zaken binnen de natuurkunde is zo geweest dat men, beginnend aan de oppervlakte, geprobeerd heeft steeds dieper te graven. Steeds probeert men nieuwe theoretische wetten in te voeren die nog dieper gaan en nog 'fundamenteler' zijn dan die we al hebben. Op die manier hoopt men een eenheid te scheppen in zo veel mogelijk verschijnselen. Ofwel: op die manier probeert men de basisprincipes van de natuur steeds meer te ontraadselen. Want bij dit steeds dieper graven wordt men geleid, of misschien beter gezegd gedreven, door een geloof. Een geloof in het feit dat de schepping ordelijk en systematisch in elkaar zit. En vooral dat het de moeite waard is om deze orde te ontdekken.

Dit brengt ons op een tweede aspect van het toenemende abstractie-niveau van theorieën. Als men probeert steeds dieper te graven in de natuur, dan komt men met het opstellen van theorieën steeds verder af te staan van de direct waarneembare werkelijkheid. Er worden dan theoretische begrippen ingevoerd die hun betekenis alleen ontleenen aan hun plaats te midden van de andere theoretische begrippen en die alleen heel indirect met waar te nemen verschijnselen verbonden zijn. Het is dan ook begrijpelijk dat we zulke begrippen slechts zeer indirect kunnen kennen. En dat we hun eigenschappen niet meer kunnen beschrijven met onze waarnemingstaal, want daar staan ze immers zeer ver vanaf. Onze normale taal gaat dan te kort schieten, en in de plaats daarvan blijkt de wiskunde te komen. Als we vanuit natuurkundig standpunt diep doordringen in de natuur, kunnen we er eigenlijk alleen nog eenduidig in wiskundige termen over spreken. Omdat, zoals Heisenberg, een van de grondleggers van de kwantummechanica zegt, *'de wiskunde het oerbeeld is van de schoonheid van deze wereld'*.¹⁴

Toch – en dat is een uiterst essentieel punt – ligt de rechtvaardiging van de invoering van alle abstracties alleen daarin dat ze ons helpen om onze directe waarnemingen te begrijpen. Uiteindelijk zijn het onze op experimenten gebaseerde waarnemingen die beslissen over het bestaansrecht van een theorie en de daarin voorkomende begrippen.

1.3.5 Moraal

Wellicht dat langzamerhand de draad van het verhaal verloren is geraakt. Dat is niet zo erg. Het verhaal van deze paragraaf en de

bedoeling ervan is wellicht niet direct te plaatsen. Het is dan ook veel meer een verhaal dat je langzaam moet laten doordringen en laten 'rijpen'. Af en toe als verderop de vraag opkomt wat je met die kwantummechanica aan moet, moet je het nog eens lezen. En misschien dat dan langzaam de structuur zichtbaar wordt die aanwezig is in de natuurkunde. Dat dan duidelijker wordt hoe je tegen natuurkundige wetten en feiten aan moet kijken.

Misschien ook rijst de vraag wat dit verhaal nu eigenlijk met kwantummechanica te maken heeft. Ook dat is een begrijpelijke vraag. En het antwoord zou kunnen luiden: alles en niets. Niets, in die zin dat we nog niets gezegd hebben over de kwantummechanische theorie zelf. Alles, in die zin dat dit verhaal toch wel noodzakelijk is om de plaats en de structuur van de kwantummechanica een beetje te kunnen begrijpen.

1.3.6 Opnieuw het schema

Laat ik dat, om te beginnen, nu maar eerst eens toelichten aan de hand van het al eerder genoemde schema, weergegeven in fig. 23. In dit schema zijn, zoals eerder gezegd, alle eerder besproken onderwerpen nog eens bij elkaar gezet. Dit is gebeurd in twee dimensies. Als horizontale dimensie is eenvoudig gekozen voor de tijdsdimensie. Dat betekent dus dat alle onderwerpen hierdoor chronologisch geordend zijn, wat de procesgang – of, zo je wilt, de vooruitgang in de natuurkundige kennis – laat zien. Daarbij zijn de namen van sommige experimenten 'ergens' in een streepjeslijn, gezet. Hiermee wordt bedoeld dat het desbetreffende experiment, dan niet een geïsoleerde, op zichzelf staande gebeurtenis is geweest. Maar dat het veel meer moet worden gezien als bijdrage tot, of eventueel als sluitstuk van een hele reeks experimenten die betrekking hadden op hetzelfde onderwerp of op nauw verwante onderwerpen. Dit laatste is veelal de regel, het eerste meestal de uitzondering.

Als tweede dimensie in de figuur, dus in verticale richting, is gekozen voor het 'niveau van abstractie', zoals we daar al eerder over gepraat hebben. Deze verticale dimensie moet niet al te letterlijk opgevat worden. 'Niveau van abstractie' is op zich een moeilijk abstract begrip, dat in ieder geval niet eenvoudig kwantificeerbaar is. Dat betekent dat je bijvoorbeeld zeker niet kunt zeggen dat 'twee keer zo diep' correspondeert met 'twee keer zo abstract'. Maar wel kun je misschien over het abstractieniveau kwalitatief praten, dus in globale termen. Je kunt wel globaal zeggen dat 'hoe dieper' een begrip ligt, 'hoe abstracter' het zal zijn. En abstracter betekent dan iets in de zin van 'hoe verder het weg staat van onze alledaagse ervaringen', of 'hoe moeilijker en gevaarlijker het is er iets concreets bij voor te

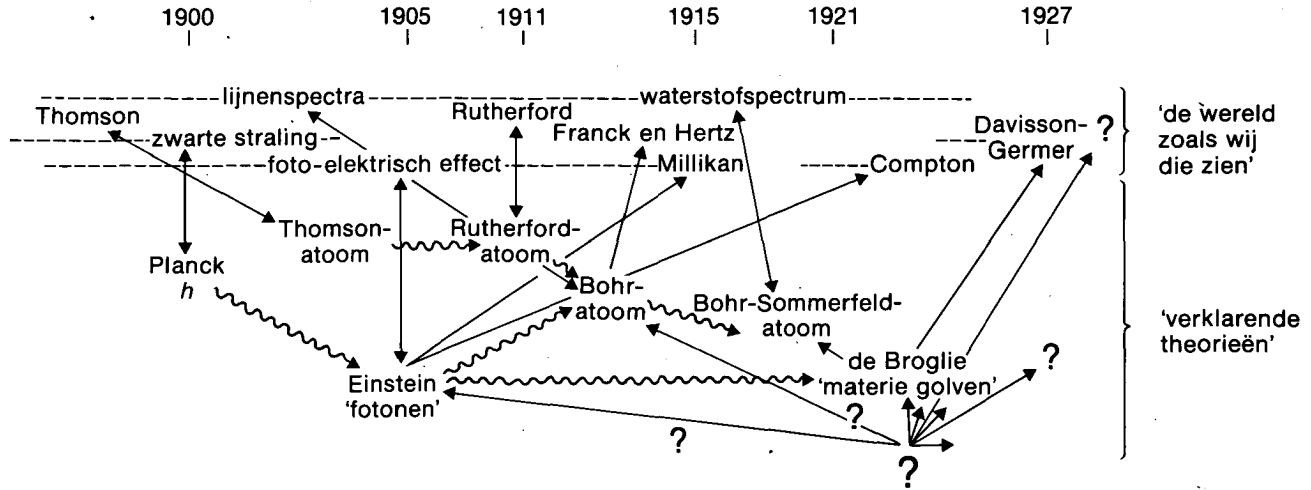


Fig. 23. De feiten nog eens op een rijtje gezet.

stellen'. En ook zou je kunnen zeggen dat de dieper-liggende begrippen fundamenteeler zijn dan de begrippen die erboven liggen: En *fundamenteeler* op te vatten in die zin dat je de 'onderliggende' nodig hebt om de 'bovenliggende' te verklaren.

Zo heb ik alle besproken experimenten samengebracht in een brede band aan de 'oppervlakte' van de figuur. Deze band representeert 'de wereld zoals we die zien'. Ofwel de wereld van de waarneembare verschijnselen. Hierbij mag waarneembaar ook best betekenen: meetbaar, met behulp van een misschien wel ingewikkeld apparaat. Deze oppervlakteband is alleen om duidelijkheidsredenen als band aangegeven; niet omdat ook hierin een toenemende abstractie zou optreden in verticale richting. De namen van de experimenten in deze oppervlakteband symboliseren ook tevens de empirische wetten die uit deze experimenten te formuleren zijn. Voorbeelden hiervan zijn onder andere: de Balmer-formule voor het waterstofspectrum; het optreden van een grensgolflengte bij het meten van het foto-elektrisch effect; enz.

Onder de oppervlakte, en alleen waarneembaar via deze oppervlakte, liggen de theoretische begrippen. Of anders gezegd: de verklarende theorieën. Dit brengt ons nu op de betekenis van de diverse lijnen in het schema. De rechte getrokken lijnen betekenen dat er een direct verband bestaat tussen begin- en eindpunt. Maar er valt nog meer over te zeggen. Een pijl van boven naar beneden, dus 'van de oppervlakte de diepte in', betekent dat het betreffende experiment de directe aanleiding is geweest tot het invoeren van het daarmee verbonden theoretisch begrip. Zo waren bijvoorbeeld de zwarte-stralingsexperimenten de directe aanleiding voor de invoering van de constante van Planck. Omgekeerd verklaart deze constante – via de bijbehorende stralingswet – de vorm van dit spectrum, en dit wordt aangegeven door de pijl die naar boven wijst. Bij de pijlen van beneden naar boven kunnen we globaal nog twee richtingen onderscheiden. Schuin naar voren stelt strikt genomen een 'voorspellende lijn' voor. En schuin naar achteren betekent dan een 'verklarende lijn'. Behalve de getrokken lijnen zijn er ook nog golflijntjes getekend. Deze golflijntjes willen uitdrukken dat het begrip aan het begin van de golflijn wel van grote invloed is geweest op de invoering van het begrip aan het eind (bij de pijlpunt), maar tevens dat er geen verklarend verband bestaat tussen beide. Zo gebruikte bijvoorbeeld Bohr in zijn atoommodel wel Einsteins fotonhypothese, maar je kunt niet zeggen dat deze hypothese Bohrs model verklaart. Het een kan niet uit het ander afgeleid worden.

1.3.7 Het grote vraagteken

Als we nu het totaalschema (zie fig. 23) overzien, dan zien we twee duidelijke eindpunten, namelijk de hypothesen van Einstein en De Broglie. Ofwel: het golf-deeltje-dualisme van de materie en de elektromagnetische straling. Dit waren inderdaad de 'eindpunten' van de fysica in die tijd (\pm 1925).

Maar het was toen al duidelijk dat dit niet het einde kon blijven. Men had niet het gevoel dat men werkelijk begreep hoe de natuur in elkaar zat. De bestaande theorieën waren meer een samenraapsel van 'ad hoc'-hypothesen waarin men geen duidelijke eenheid en structuur kon ontdekken. De voorspellende kracht van de toenmalige theorie was ook gering. Kortom, het 'klikte' niet; er ontbrak iets. Of zoals Lorentz, de 'grand old man' van de toenmalige fysica het in een toespraak (in 1923) uitdrukte:

'Dit alles heeft een grote schoonheid en is uitermate belangrijk, maar jammer genoeg begrijpen we het niet echt. We begrijpen de hypothese van Planck niet en evenmin waarom niet-stationaire elektronenbanen moeten worden uitgesloten. En we begrijpen niet, hoe in feite, volgens Bohrs theorie, licht wordt geproduceerd. Er kan dan ook geen twijfel over bestaan, 'EEN MECHANICA VAN KWANTA' moet nog steeds worden gemaakt.'

Hiermee zitten we bij de kern van ons betoog. De nieuwe theorie die nog gemaakt moest worden, moest weer een eenheid scheppen in de natuur. Moest dus weer het gevoel geven dat de natuur te begrijpen was. Eén ding was al duidelijk. Als zo'n theorie gevonden kon worden, dan moest ze nog abstracter zijn, nog dieper liggen dan wat er was. En daardoor zou ze nog verder afliggen van onze normale ervaringen. En ze zou zich moeten bedienen van nieuwe termen en begrippen, die nauwelijks voorstelbaar zouden zijn. Maar die vooral 'besproken' moesten worden in de taal die zich daar wel voor leent, dat wil zeggen in wiskundige uitdrukkingen en formules. Deze theorie ontstond nog vrij plotseling, voortbouwend op het geschetste fundament, omstreeks 1925. Laten we daarom nu (eindelijk!) overgaan tot het grote vraagteken in ons schema: de kwantummechanica.

2. Het gedrag van fotonen en elektronen nader bekeken

2.1. Inleiding

Op een examen werd aan een leerling over de formule $E = hf$ de volgende vraag gesteld:

'Wat is f ?'

'De constante van Planck.'

'En h ?'

'De lengte van de Plank!'¹⁵

Uit het vorige hoofdstuk is het hopelijk duidelijk geworden dat, hoe de kwantummechanica ook precies in elkaar zit, ze in ieder geval in staat moet zijn 'waarneembare verschijnselen' te verklaren. En dan met name de verschijnselen die ter verklaring noodzakelijkerwijs teruggevoerd moeten worden op het gedrag van de materie op atomaire schaal. Ook hebben we gezien dat er inderdaad zulke waarneembare 'atomaire effecten' zijn. En op grond daarvan hebben we al de vraag gesteld of 'deeltjes golven zijn', of omgekeerd. Het antwoord op deze vraag hebben we echter tot nu toe in het midden gelaten. Daar gaan we nu dieper op in. Voor we dat gaan doen, wil ik eerst nog enkele experimenten beschrijven. Op grond van deze experimenten krijgen we dan misschien nog een beter beeld van wat we van de theorie mogen verwachten. Hoe meer we van het 'oppervlaktegedrag' weten, hoe duidelijker het is wat de 'dieptetheorie' moet kunnen verklaren. Helaas is het in de meeste gevallen erg moeilijk deze experimenten ook werkelijk uit te voeren. Niet omdat het altijd principieel onmogelijk is, maar meestal omdat het een kostbare en ingewikkelde opstelling vergt. Daarom zullen we ons veelal beperken tot het bespreken van 'gedachtenexperimenten', waarvan we de uitkomsten betrekkelijk eenvoudig kunnen beschrijven.

Ik wil beginnen met een heel simpel experiment dat we allemaal kennen. Een lichtbundel valt via een diafragma op een halfdoorlatende spiegel (zie fig. 24). Een deel van de bundel wordt doorgelaten en opgevangen door fotocel 1, en het andere deel wordt afgesplitst en opgevangen door fotocel 2. Kortom, een redelijk vertrouwde-situatie die door de klassieke golftheorie gemakkelijk verklaard kan worden. Althans de splitsing bij de spiegel; natuurlijk niet de detectie met de fotocellen! Immers, we weten dat we met een fotocel in

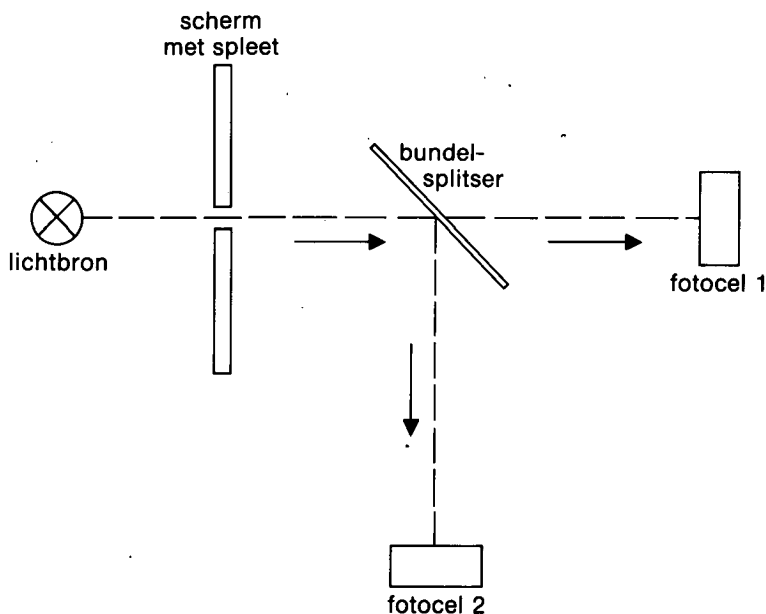


Fig. 24. Een 'simpel' experiment.

ieder geval *fotonen* detecteren en geen klassieke golven. Dus de lichtbron zendt fotonen uit. Maar hoe zit dat dan bij de spiegel? Wordt daar elk foton gesplitst? Maar dan zou de energie van elk foton toch verdeeld moeten worden over twee 'gesplitste'? En daardoor kan de energie van de twee 'splittingsfotonen' beneden de grenswaarde komen die nodig is om nog door de fotocel gedetecteerd te kunnen worden. Dus dat kan niet goed zijn, want we meten wel iets. Maar hoe zit het dan wel? 'Klassiek' kunnen we de splitsing verklaren, maar niet de detectie. En 'met fotonen' kunnen we wel de detectie verklaren, maar nog niet de splitsing.

Wel, het heeft er kennelijk alle schijn van dat er nog iets ontbreekt in onze gedachtengang en dus in onze kennis omtrent het gedrag van fotonen. Laten we daarom nog wat verder experimenteren.

2.2. Een experiment met kogeltjes¹⁶

Stel dat we met een machinegeweer op volkomen toevallige tijdstippen kogeltjes afschieten. En stel dat deze kogeltjes volkomen toevallig verdeeld zijn over een aantal snelheidsrichtingen, zoals getekend in fig. 25. En stel dat op een zekere afstand van het geweer een muur

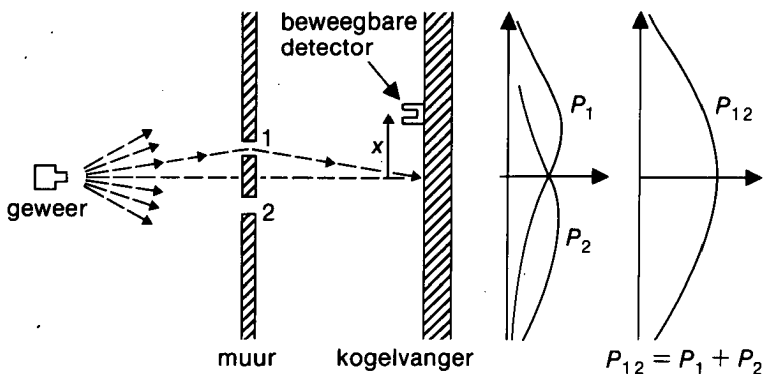


Fig. 25. Een experiment met kogeltjes.

staat waarin twee afsluitbare gaten zijn geboord waar een kogeltje juist doorheen kan. En stel ook nog dat achter deze muur een kogelvanger geplaatst is, met voor de kogelvanger een kogeltjesdetector, die in staat is de kogeltjes op te vangen en te tellen. Bovendien is deze detector in staat op en neer te bewegen langs de wand van de kogelvanger (de x -richting). Stel dat dit allemaal zo is opgesteld, dan hebben we daarmee een experiment dat ons een antwoord kan geven op de volgende vraag: 'Wat is de kans dat een kogeltje de kogelvanger treft op een bepaalde afstand x van het centrum?'

Wel, zul je zeggen, dat hangt er vanaf welk gaatje geopend is. Okee, natuurlijk, dat is waar. In feite moeten we onderscheid maken tussen drie verschillende situaties, namelijk: gaatje 1 open en gaatje 2 dicht; gaatje 1 dicht en gaatje 2 open; en beide gaatjes open.

Maar, waarom vragen we eigenlijk naar de *kans* om een kogeltje aan te treffen? Wel, je moet je goed realiseren dat we hier alleen over de kans (of waarschijnlijkheid) kunnen spreken, omdat we het experiment zo hebben ingericht dat we van tevoren nooit kunnen weten waar een kogeltje terecht zal komen. Juist vanwege die toevallig verdeelde begintijdstippen en richtingen! En door een hardere of zachtere botsing met de wand van de gaatjes kan zo'n kogeltje de kogelvanger in principe praktisch overal treffen. Dus vandaar de noodzaak om over de *kans* te praten.

Maar nu de vraag: hoe *bepalen* we die *kans*? Dat kan als volgt: gedurende een bepaalde tijd schieten we kogeltjes af en tegelijk tellen we ze. Stel dat dit aantal gegeven wordt door N . In dezelfde tijd hadden we onze detector ter plekke x staan en deze detector heeft dus geteld hoeveel er daar zijn aangekomen. Stel dat dit aantal wordt gegeven door n . Dan zeggen we: de *kans* dat een kogeltje de kogelvanger ter plaatse x treft, wordt gegeven door n/N . We noteren

nu deze gemeten kans ter plaatse x als $P(x)$. Overigens merken we nog even op dat onze detector natuurlijk altijd een *heel* kogeltje detecteert. Of de detector telt op een gegeven moment niets, óf hij telt een kogeltje, maar als hij dat doet, dan is het ook een *compleet* kogeltje, nooit een half of een kwart of wat voor gedeelte dan ook! Welnu, op de aangegeven manier kunnen we met ons experiment drie *kansverdelingen* meten. Met *kansverdeling* bedoelen we nu de functie $P(x)$ van x , die dus de verdeling van kansen als functie van de plaats beschrijft. In fig. 25 zie je de uitkomsten van ons experiment getekend. P_1 is de kansverdeling met alleen gaatje 1 geopend; P_2 met alleen gaatje 2, en $P_{1,2}$ wanneer *beide* gaten open zijn. En je ziet direct uit de figuur dat we als belangrijk resultaat hebben gekregen dat:

$$P_{1,2} = P_1 + P_2$$

dat wil zeggen: *de kansen tellen gewoon op*. Eigenlijk is dit precies wat we al verwachtten; er is dus gewoon niets bijzonders aan de hand!

2.3. Een experiment met golven

Laten we nu eens een experiment doen met watergolven, zoals bijvoorbeeld getekend in fig. 26. We gebruiken daarvoor een golfbak, waarin we golven maken door een klein voorwerp regelmatig op en neer te bewegen in het water. Rechts van de golfbron is weer een muur met twee gaten (of spleten), en daarachter worden de golven 'opgevangen' door een zacht glooiend 'strand', dat voorkomt dat de

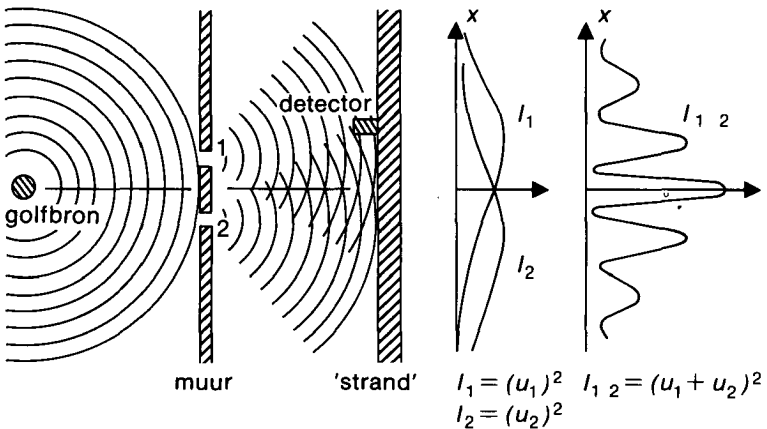


Fig. 26. Een experiment met watergolven.

golven reflecteren. Dit om de toestand niet onnodig ingewikkeld te maken. Voor het strand plaatsen we weer een heen en weer bewegbare detector. Deze detector is zo geconstrueerd dat hij een uitslag geeft die evenredig is met de golfenergie op de plaats waar hij zich bevindt. En zoals we weten, is bij een harmonische golfbeweging de energie van de golf evenredig met het kwadraat van de amplitude van de golf. Om wat preciezer te zijn, onze detector meet eigenlijk niet de energie op één bepaald tijdstip, maar de gemiddelde energie over een hele periode van de golfbeweging. We zijn weer geïnteresseerd in de energieverdeling, of anders genoemd: de verdeling van de intensiteit I langs het strand. En die kunnen we nu meten door onze detector langzaam langs het strand heen en weer te bewegen. Eerst wanneer alleen de eerste spleet open is, dan met de tweede spleet open, en tenslotte met beide spleten open. En onze detector meet daarbij achtereenvolgens I_1 , I_2 en I_{12} . Wat ons nu direct opvalt is dat:

$$I_1 + I_2 \neq I_{12}$$

Gelukkelijk verbaast ons dat, bij enig nadenken, niet in het minst, want we weten tenslotte dat de golffronten die uit beide spleten vertrokken zijn, onderweg met elkaar zullen interfereren. Laten we iets preciezer kijken hoe dat gaat. Wanneer we in een bepaald punt x op het strand de golf die uit spleet 1 komt, schrijven als:

$$u_1 = R_1 \sin \left(2\pi \frac{t}{T} \right)$$

dan geldt voor de intensiteitsverdeling:

$$I_1 \sim R_1^2$$

mits spleet 2 gesloten is. (Hierbij stelt u de uitwijking en R de amplitude van de golf voor.) Evenzo kunnen we de golf die afkomstig is uit spleet 2, in hetzelfde punt x , voorstellen door:

$$u_2 = R_2 \sin \left\{ 2\pi \left(\frac{t}{T} + \phi \right) \right\}$$

Hierbij is ϕ het faseverschil tussen beide golven in het punt x ten gevolge van het verschil in afstand van de beide spleten tot dit punt. Dit faseverschil is dan ook een functie van de plaats x . Met alleen de tweede spleet open, vinden we dus voor de intensiteitsverdeling langs het strand:

$$I_2 \sim R_2^2$$

Maar hoe is nu de intensiteitsverdeling met beide spleten open? Wel, zoals we weten, kunnen we die vinden door beide golfuitwijkingen in het punt x op te tellen, ofwel:

$$u_{12} = u_1 + u_2 = R_1 \sin\left(2\pi\frac{t}{T}\right) + R_2 \sin\left\{2\pi\left(\frac{t}{T} + \phi\right)\right\}$$

Wat betekent dit nu voor de intensiteitsverdeling? Dit laat zich, na enig rekenwerk dat nu niet zo belangrijk is, betrekkelijk gemakkelijk vinden:

$$I_{12} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 \cdot I_2} \cos 2\pi\phi$$

En dit is een belangrijk resultaat. We zien dat de intensiteitsverdeling met beide spleten open wordt gegeven door de som van de beide 'afzonderlijke' intensiteiten *plus* nog een derde term, de zogenaamde *interferentieterm*. Het is nu erg belangrijk je te blijven realiseren dat deze interferentieterm komt vanwege het feit dat we *niet* gewoon de intensiteiten van beide golven mogen optellen, maar de *golfuitwijkingen*. En ook dat de interferentie in een bepaald punt wordt veroorzaakt door twee golven die dit punt langs *verschillende wegen* hebben kunnen bereiken. Tot zover ons experiment met watergolven; *optellen van golfuitwijkingen verklaart dat golven interfereren!*

2.4. Een experiment met fotonen en elektronen

We herhalen nu ons experiment nog een keer, maar nu met een monochromatische lichtbundel (zie fig. 27). Nu gebruiken we een detector die zo geconstrueerd is dat elke keer als een foton de detector bereikt, we via een luidspreker een 'klik' horen. Als we nu ons experiment uitvoeren, is het eerste dat ons opvalt dat we 'klik-

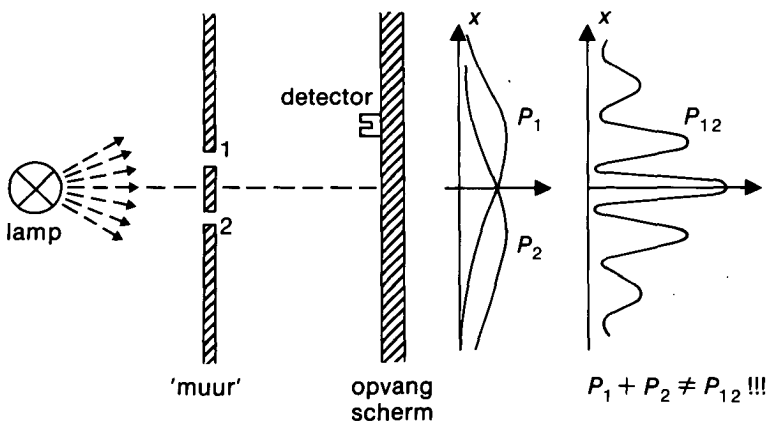


Fig. 27. Ons experiment met fotonen.

ken' horen die volkomen willekeurig verdeeld zijn in de tijd, zoiets als:

..... klik klik klik klik .. klik ... klik enz.

Alle klikken zijn even hard, er zijn dus geen 'halve' bij of 'dubbele' of 'kwarten'. Maar het totale aantal dat we binnen een bepaalde tijd horen, hangt wel af van de plaats van de detector op het scherm.

Dit zelfde gedrag hebben we eerder gevonden, namelijk bij ons experiment met kogeltjes. Toen hebben we gezegd dat we alleen konden spreken over de *kans* dat een kogeltje op een bepaalde plaats arriveert. *Kennelijk geldt hetzelfde voor fotonen!* Wat we meten, is blijkbaar de *kans* dat een foton op een bepaalde plaats aankomt.

Wel, nu we ons dit gerealiseerd hebben, kunnen we het experiment verder gaan uitvoeren. We bepalen weer eerst de *kansverdeling* met alleen spleet 1 open, en vinden dan P_1 . Dan spleet 2 open, dat geeft P_2 . Tenslotte krijgen we P_{12} als beide spleten open zijn. En wat blijkt nu?

$$P_1 + P_2 \neq P_{12} !!!$$

We vinden, ondanks het feit dat we deeltjes dachten te tellen, toch een *interferentiepatroon*. Misschien denk je nu: dat wisten we toch allang. Licht bestaat toch uit elektromagnetische golven, dus natuurlijk vind je interferentie. En over het *golf-deeltje*-dualisme van fotonen is ook al eerder gesproken. Een foton 'gedraagt zich' soms als deeltje en soms als golf (!?) Op grond van het deeltjeskarakter van fotonen verwachten we *geen* interferentie, net als bij de kogeltjes, en op grond van het golfkarakter verwachten we *wel* interferentie, net als bij watergolven. Blijkbaar 'wint' om een of andere reden in ons experiment het golfkarakter!

Zó simpel is het echter niet, en het is de moeite waard hier wat langer bij stil te staan. We hebben, ook met beide spleten open, uitsluitend 'klikken' gehoord en, zoals gezegd, steeds dezelfde 'klikken'. Kennelijk hebben we steeds 'fotondeeltjes' gedetecteerd. Maar als we alleen fotonen gedetecteerd hebben, dan lijkt het duidelijk dat elk foton óf door de ene spleet óf door de andere moet zijn gegaan. Dus zou je dan verwachten dat je beide kansverdelingen P_1 en P_2 gewoon zou mogen optellen. Echter, het experiment wijst uit dat er bepaalde plaatsen zijn waar met twee spleten open *minder* fotonen komen dan met één spleet open. Maar dat zou alleen kunnen wanneer een foton dat door de ene spleet gaat, *weet* dat de andere spleet open of dicht is. Of gaat een foton misschien op de een of andere manier door beide spleten tegelijk? Of 'transformeert' het foton zich als het bij de spleten aankomt, vlug in een brede golf, om zich zodra het de spleten gepasseerd is, weer vlug in zijn 'fotonhuid' terug te trekken? Of zou

het zo zijn dat twee fotonen, die ieder door een andere spleet gaan, elkaar kunnen beïnvloeden? Dat zijn zomaar een aantal wilde veronderstellingen die niet allemaal even zinvol lijken. Maar wat dan?

Laten we eerst nog eens verder experimenteren. Bijvoorbeeld als volgt: we verminderen de intensiteit van onze lichtbron (in fig. 27) steeds meer en meer. Tenslotte is de intensiteit zo laag geworden dat we kunnen berekenen dat de lamp bijvoorbeeld nog maar zoiets als één foton per seconde uitzendt. Maar dat betekent dan dat ieder foton, praktisch zeker, afzonderlijk zijn weg aflegt tussen de bron en de detector. En dus kunnen nu de afzonderlijke fotonen elkaar zeker niet beïnvloeden. Als we nu weer in deze situatie de intensiteitsverdeling gaan meten, horen we eerst zo nu en dan, ergens op het scherm, een klik. Aanvankelijk lijkt dit patroon volledig willekeurig. Elk foton lijkt overal op het scherm te kunnen aankomen. Naarmate we echter ons experiment langer laten duren, blijkt er geleidelijk aan toch structuur in het patroon te komen.

Wanneer het totaal aantal fotonen die een voor een het scherm treffen, maar groot genoeg is, zien we tenslotte toch weer ons vertrouwde interferentiepatroon verschijnen. Eerst nog wat aarzelend, maar tenslotte zeer overtuigend (zie fig. 28).

Blijkbaar 'weet' elk foton afzonderlijk dat er bepaalde plaatsen zijn op het scherm waar het wel, en andere waar het niet mag aankomen.

Hoe kan dat? We zeggen nu: op de een of andere manier *interfereert elk foton met zichzelf*, maar dit brengt ons natuurlijk nauwelijks een

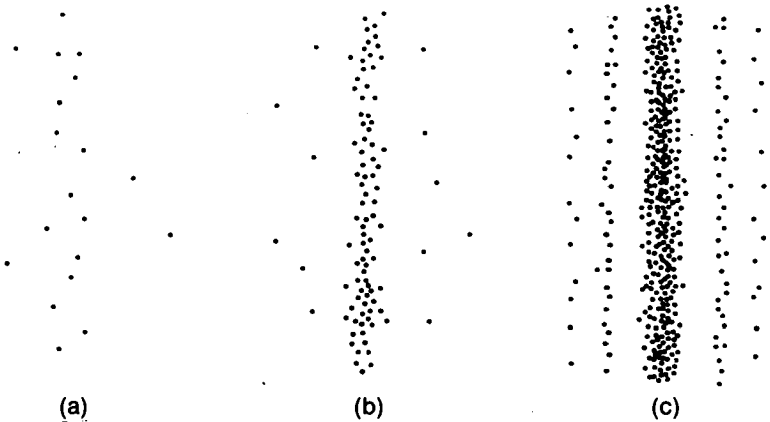
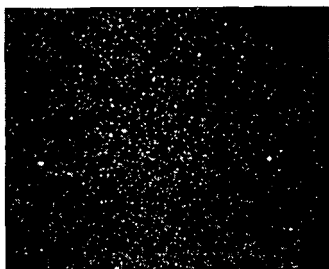
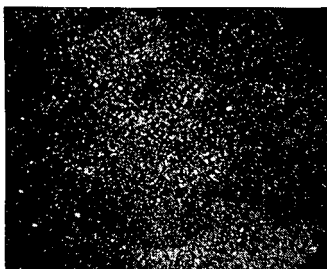


Fig. 28. Als steeds meer fotonen door de spleten zijn gegaan, wordt het interferentiepatroon tenslotte toch goed herkenbaar; (a), (b) en (c) geven het interferentiepatroon op drie opeenvolgende tijdstippen.



aantal fotonen (a) 3×10^3



(b) $1,2 \times 10^4$



(c) $9,3 \times 10^4$



(d) $7,6 \times 10^5$



(e) $3,6 \times 10^6$



(f) $2,8 \times 10^7$

Fig. 29. Een serie foto's, die demonstreert hoe de kwaliteit van het beeld afhangt van het aantal fotonen waaruit het wordt opgebouwd. (A. Rose 1957, *Adv. in biol. and med. phys.*, 5, 211).

stap verder. Ook zeggen we, en dat is wel belangrijk: *het gedrag van fotonen is alleen statistisch te beschrijven*. Dit houdt in dat we omtrent het gedrag van één foton kennelijk niets kunnen zeggen. De enige uitspraak die we wel kunnen doen, is omtrent het *gemiddelde gedrag* van een *groot aantal* fotonen. Dit statistisch gedrag van fotonen wordt fraai geïllustreerd met de serie foto's uit fig. 29. Hier zie je duidelijk wat het abstracte gepraat over de 'kans van een foton

To see how strange all this is, consider the following peculiar story.

A harbour master is told that there has been an earthquake out at sea, and a large wave is spreading out from it. He works out from the speed of sea waves that the wave can be expected at noon, but he also calculates that, though the wave was large near the source, because it is spreading out it will be less than half a metre high when it reaches his harbour. So he expects all the boats in the harbour to rise and fall gently. At noon, he watches the boats. Nothing happens. Then suddenly, one boat shoots ten metres into the air, while the rest stay quite still. Then, as though someone were throwing dice to pick on which boat will be affected, other boats, quite at random, shoot up suddenly. But where he had expected all the boats to rise a little, he sees many fewer boats shoot up much more.

This is how sea wave energy would arrive if it behaved as light does.

Fig. 30. De havenmeester.¹⁷

om op een bepaalde plaats te arriveren', in de praktijk kan betekenen. Op de nog steeds onbeantwoorde vraag, door welke spleet een foton nu eigenlijk heen gaat, komen we straks nog even terug. We willen ons nu eerst wat nader concentreren op het resultaat van dit experiment. Laten we daarom dit resultaat nog eens zo nauwkeurig mogelijk proberen samen te vatten.

We hebben 'klikken' gemeten. Elke 'klik' correspondeert met een heel foton. Over de plaats waar elk individueel foton het scherm zou treffen, konden we niets met zekerheid voorspellen. *Bij elke plaats op het scherm bleek een kans te horen dat een foton het scherm op die plaats zou treffen.* Deze kansverdeling hebben we gemeten door veel fotonen te tellen. En toen bleek dat deze kansverdeling de vorm had van een interferentiepatroon!

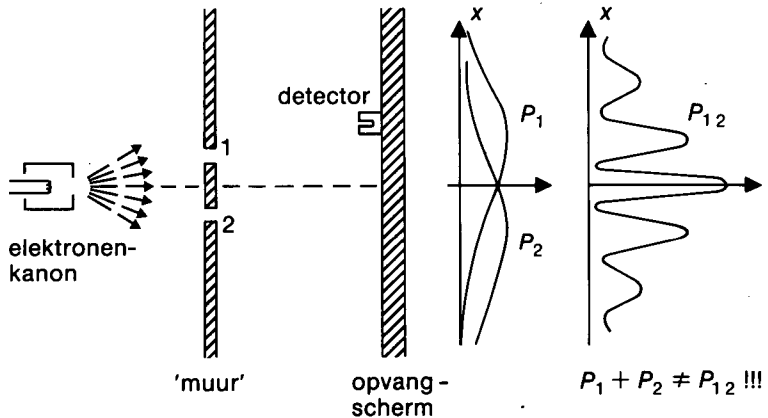
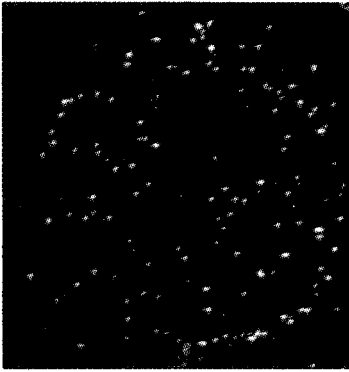
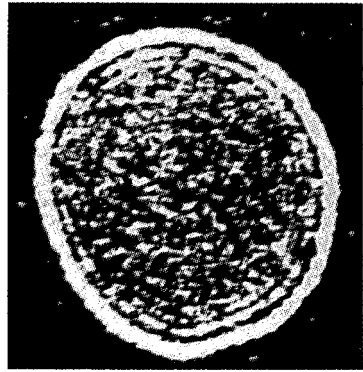


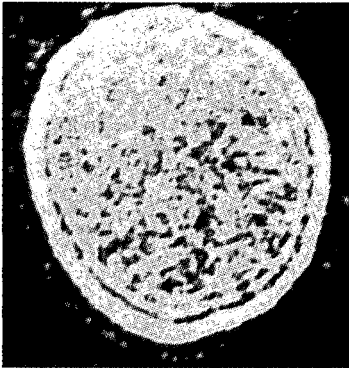
Fig. 31. Ons experiment met elektronen.



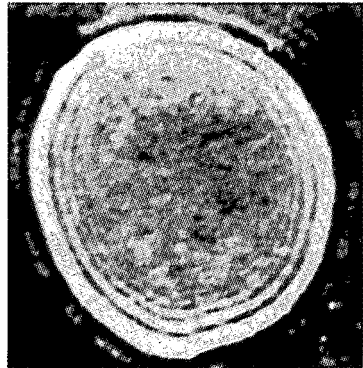
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig. 32. Elektronenmicroscopfoto's, gemaakt met een bundel elektronen van zeer lage intensiteit. Elke stip is een beeld, gevormd door één enkel elektron. De belichtingstijd was: (a) $1/25$ s; (b) 10 s; (c) 1 minuut; (d) 2 minuten.

(Vergroting: $125000\times$)

Tot zover de beschrijving van ons experiment. Dit zijn dus nu onze 'waarneembare verschijnselen' (uit de 'oppervlaktewereld'!) die om een theoretische verklaring vragen. En daarbij is het duidelijk dat we de normale 'deeltjes'- en 'golf'-theorieën niet kunnen gebruiken. Want die theorieën voorspellen immers verschijnselen die niet kloppen met onze waarnemingen!

Tot nu toe hebben we alleen gepraat over fotonen. Maar dat is natuurlijk een niet noodzakelijke beperking. Er is niets tegen om bijvoorbeeld hetzelfde experiment te herhalen met elektronen, of protonen en neutronen, enz. En de uitkomst van deze experimenten, dus datgene wat we kunnen waarnemen, lijkt me nu niet meer moeilijk voorspelbaar (zie fig. 31 en fig. 32).

2.5. Kijken naar elektronen

Tot nu toe hebben we de discussie uitgesteld over de vraag door welke spleet een foton – of een elektron – nu eigenlijk passeerde. Daarover willen we nu wat dieper nadenken. We doen dit weer aan de hand van een experiment. En ditmaal is het een echt gedachtenexperiment, omdat het experiment dat we nu gaan beschrijven, nooit precies zo is uit te voeren. Maar we weten wel, op grond van talloze andere experimenten die wel uitgevoerd zijn, dat het precies zo zou verlopen als nu wordt verteld. Zoals we al gezegd hebben, detecteerden we in ons vorige elektronenexperiment altijd *hele* elektronen, en als onze detector maar snel genoeg kan tellen, detecteren we ze een voor een. Dus ligt de volgende conclusie voor de hand: als we afzonderlijke elektronen detecteren, dan moeten deze elektronen óf door de ene spleet óf door de andere spleet zijn gegaan! Maar als dit waar zou zijn, dan zou je ook verwachten dat

$$P_{12} = P_1 + P_2$$

en dat bleek in strijd met onze metingen. Kennelijk mogen we dus *niet* zeggen dat het deeltje óf door de ene óf door de andere spleet is gegaan. Dit lijkt vreemd. Eigenlijk druist dit laatste volkomen in tegen wat ‘iedereen met een beetje gezond verstand, toch direct op zijn klompen aanvoelt’. Hoe kunnen we daarover nu meer te weten komen? Kunnen we niet gewoon *bekijken* door welke spleet elk elektron passeert? Laten we dat eens proberen.

We plaatsen daarom in onze al eerder gebruikte opstelling een sterke lichtbron achter het scherm met de twee spleten (zie fig. 33). We weten dat licht verstrooid wordt door elektronen. Als er dan een elektron door een van de spleten passeert, zien we tegelijk een lichtflits bij die spleet. Zo moeten we dus kunnen zien welke weg het elektron gevolgd heeft. Of als het op een of andere manier door beide spleten tegelijk zou gaan, hoe onlogisch ons dat ook toeschijnt, moeten we tegelijk twee lichtflitsen zien, bij elke spleet één.

Welnu, dit is wat we in werkelijkheid waarnemen: elke keer als we een klik horen van onze elektrondetector, zien we ook een lichtflits, óf bij de ene spleet óf bij de andere. Maar nooit bij beide spleten tegelijk! Dus experimenteel gezien geldt duidelijk dat een elektron of door de ene of door de andere spleet gaat. Maar waarom gold dan, in ons eerste experiment, toch *niet* gewoon:

$$P_{12} = P_1 + P_2 \quad ?$$

Laten we nog eens preciezer kijken en onze waarnemingen nauwkeurig noteren. Elke keer als we een ‘klik’ horen, zetten we een streep-

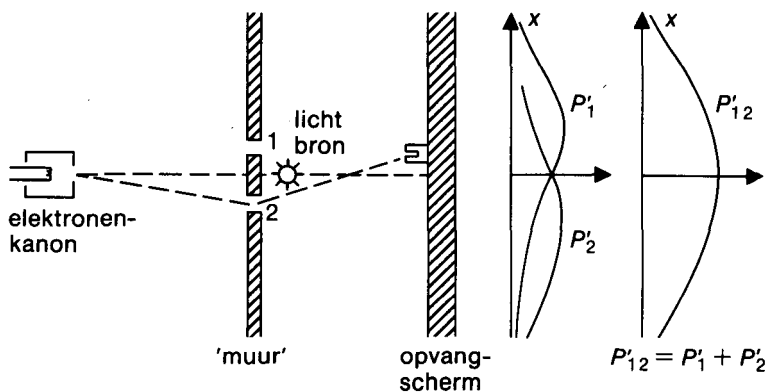


Fig. 33. Een 'bekeken' experiment met elektronen.

je in kolom 1 als we de lichtflits zien bij de eerste spleet en een streepje in kolom 2 als de lichtflits bij de tweede spleet te zien is. Elk elektron wordt dus ingedeeld in een van deze twee klassen. Als we op deze manier onze waarschijnlijkheidsverdelingen weer opmeten, vinden we P'_1 en P'_2 , zoals getekend in fig. 33. Welnu, dat is precies wat we verwachtten; P'_1 is precies gelijk aan wat we eerder gevonden hadden met spleet 2 dicht, en net zo voor P'_2 . Dus, de elektronen die we door de *eerste* spleet zien komen, zijn precies hetzelfde verdeeld, of de *tweede* spleet nu open is of dicht! Maar wacht even! Wat is nu de *totale* waarschijnlijkheidsverdeling dat een elektron, ter plaatse x aankomt, door welke spleet dan ook? Nu, dat is eenvoudig; we doen net of we de lichtflitsen niet gezien hebben en tellen dus gewoon de twee verdelingen op. Dat geeft dan P'_{12} . Maar wat blijkt nu?

$$P'_{12} \neq P_{12} !!!$$

De interferentie is verdwenen! *Als we naar de elektronen kijken, dan weten we door welke spleet ze zijn gegaan, maar daardoor is het interferentiepatroon verdwenen.* Kennelijk verstoort het 'kijken naar elektronen' hun gang.

Eigenlijk hadden we dat, bij nader inzien, van te voren kunnen verwachten. We weten van het Compton-effect dat bij een botsing tussen een elektron en een foton de impuls van het elektron verandert. Wel, dit kan betekenen dat de richting, waarin het elektron bewoog, verandert, en wel zodanig dat het elektron in plaats van ergens op de plaats van een interferentiemaximum, waar het naar op weg was, nu net terecht komt op de plaats waar een minimum was. Kortom, het interferentiepatroon verdwijnt. Laten we dit eens experimenteel verifiëren.

We verminderen daartoe de intensiteit van onze lamp. En we breiden onze boekhouding uit tot drie kolommen. Kolom 1 en 2 blijven hetzelfde als eerder beschreven, maar in kolom 3 noteren we die 'klikken', waarbij we *geen* lichtflits hebben gezien. En wat blijkt nu? De elektronen die gezien zijn bij spleet 1 zijn weer verdeeld volgens P_1 , bij spleet 2 volgens P_2 en de elektronen die we *niet* gezien hebben, zijn verdeeld volgens $P_{1,2}$! Dus, net als we nu verwachtten, geldt inderdaad: 'elektronen die *niet* gezien zijn, vertonen *wel* interferentie, elektronen die *wel* gezien zijn vertonen *geen* interferentie'.

De vraag dringt zich nu op: is er geen manier te bedenken om de elektronen *wel* te zien, maar ze toch *niet* te verstoren? Laten we dat eens proberen. De intensiteit van de lamp nog verder verminderen helpt natuurlijk niet (waarom niet?). Maar we weten dat voor de impuls p van een foton geldt:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

Dus de impuls wordt kleiner als de golflengte van het gebruikte licht groter wordt. Dat zou misschien kunnen helpen. We kiezen nu een lamp die licht uitzendt van een grotere golflengte. Als we maar 'vriendelijker' licht gebruiken, kunnen we misschien vermijden dat de elektronen te veel gestoord worden. We herhalen daarom ons experiment met de nieuwe lamp. En steeds maar weer met andere lampen die licht uitzenden met nog steeds grotere golflengte. Eerst zien we weinig verschil; de resultaten lijken hetzelfde te blijven. Maar dan, als de golflengte maar steeds groter wordt, zien we langzaam aan het interferentiepatroon verschijnen. Onze opzet lijkt tenslotte gelukt. Het interferentiepatroon is terug; de elektronen worden nauwelijks meer verstoord!

Maar hoe zit het nu met de vraag door welke spleet ze zijn gegaan? Daarvoor hoeven we toch slechts naar de plaats van de lichtflitsen te kijken? Laten we dat dan ook doen. Bij elk elektron nemen we nog steeds een lichtflits waar. Maar met deze flitsen is inmiddels ook iets gebeurd. Deze zijn steeds groter geworden, naarmate de golflengte toenam. En wat blijkt nu? Nu we eindelijk de 'goede' golflengte gekregen hebben, uit verstoringsstandpunt gezien, blijkt dat we bij elk elektron alleen nog maar een wazige lichtvlek waarnemen, met een diameter die van dezelfde orde van grootte is als de afstand tussen de spleten. Met de golftheorie van het licht kunnen we dat trouwens ook wel begrijpen. Deze golftheorie zegt immers dat we twee punten alleen als *gescheiden* punten kunnen waarnemen als hun afstand minimaal van dezelfde orde is als de golflengte van het

gebruikte licht (vergelijk bijvoorbeeld ook de situatie bij buiging van licht of watergolven aan een spleet)¹⁸.

Maar wat betekent dat nu voor de conclusie uit ons experiment? Helaas moeten we kennelijk concluderen dat juist als de golflengte van het gebruikte licht zo groot is dat de *verstoring klein genoeg is* om weer een interferentiepatroon mogelijk te maken, het niet meer mogelijk blijkt te zijn om te zeggen *door welke spleet* de elektronen zijn heen gegaan! Ofwel: het is blijkbaar *onmogelijk* om ons experiment zo in te richten dat we kunnen bepalen door welke spleet de elektronen gaan, en toch een interferentiepatroon vinden.

Hiermee hebben we een nieuw en fundamenteel principe te pakken, zij het nog in een wat bedekte vorm. Laat ik, voordat we hier dieper op ingaan, eerst nog eens de 'moraal' van ons laatste experiment precies formuleren.

Metten is verstoren!

We wilden weten door welke spleet de elektronen gingen. Daartoe bedachten we een meetmethode. Maar bij het uitvoeren van de meting bleek dat het *meetproces zelf* het *object van onderzoek* ernstig verstoort. En deze verstoring kon niet willekeurig klein gemaakt worden zonder de meting zelf onmogelijk te maken. De oorzaak

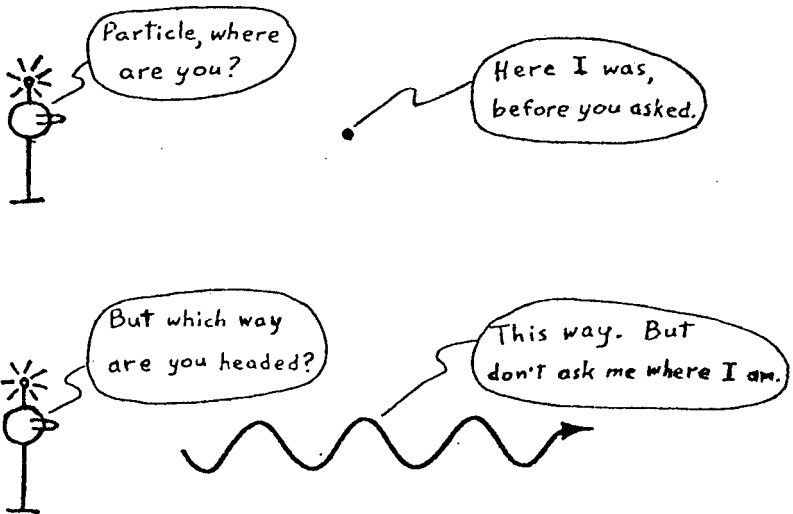


Fig. 34. Het deeltje en de golf.¹⁹

hiervan was dat we minstens één foton nodig hadden om überhaupt iets te kunnen waarnemen. Een 'hard' foton gaf wel de plaats aan van het elektron, maar verstoorde het interferentiepatroon, en een 'zacht' foton liet het interferentiepatroon intact, maar kon de plaats van het elektron niet meer nauwkeurig genoeg vastleggen. Het lijkt er dus op alsof we hier tegen een *principiële grens* aanlopen van wat we nog kunnen meten.

'Weten is meten'

En hoe zit het nu met de vraag waar het om begonnen was? Is het nu *wel* of *niet* waar dat elk elektron óf door spleet 1 óf door spleet 2 gaat? Het enige antwoord dat we kunnen geven, is dat we van ons experiment geleerd hebben dat we hier alleen op een zeer bepaalde manier over kunnen praten, om niet in moeilijkheden te komen. Als we naar de spleten kijken of, algemener, als we een apparaat hebben dat in staat is te bepalen of de elektronen door de eerste of door de tweede spleet gaan, dan *kunnen* we daarover ook *inderdaad* een uitspraak doen. Maar als we *niet* naar de elektronen kijken, als er niets is in het experiment dat de elektronen verstoort, dan kunnen we ook niets zeggen over door welke spleet een elektron heen gaat. Alleen als we *niet kijken* en *toch* willen zeggen hoe de elektronen gaan, dan komen we in moeilijkheden.

Anders gezegd, we kunnen niets weten over datgene wat we niet gemeten hebben. We weten alleen dat het elektron vanuit de bron op het scherm is terechtgekomen. Maar we weten niet hoe of langs welke baan, tenzij we dit expliciet observeren. Ook dit is een belangrijk principe dat straks aan onze kwantummechanische theorie ten grondslag moet liggen. We mogen van deze theorie eisen en verwachten dat ze een precieze verklaring geeft van datgene wat we hebben waargenomen. Maar ook niet meer, ze kan geen zekere uitspraken doen over verschijnselen die niet zijn gemeten!²⁰

2.6. De onzekerheidsrelaties van Heisenberg

*There once was a man who said: 'Damn!
I can't possibly be in this tram
For how can I know
Both how fast that I go
And also the place where I am.'*

We hebben net gesproken over een principiële grens die er zou bestaan aan datgene wat we nog kunnen meten. We zullen nu deze grens wat preciezer gaan bekijken en proberen daarvoor een kwanti-

tatieve relatie te vinden. We gebruiken daarvoor de in fig. 35 geschetste opstelling.

We hebben hier eenvoudigheidshalve één elektron getekend. Daarvan willen we nu de *plaats* gaan meten. We doen dit weer door te kijken naar het licht, dus op zijn minst naar één foton, dat door dit elektron verstrooid wordt. Om deze plaats zo nauwkeurig mogelijk te kunnen meten, hebben we zelfs een microscoop genomen. In de figuur is ook de gang geschetst van de uiterste fotonen die, komend vanaf de plaats van het elektron, nog ons oog zullen kunnen treffen. Daarbij hebben we eenvoudigheidshalve verondersteld dat onze lichtbron zich loodrecht onder het elektron bevindt. Welnu, daarmee zijn we klaar voor de meting.

Echter, als we zo de plaats van het elektron willen bepalen, dan treedt er een complicatie op. Immers, de golftheorie van het licht leert dat we, ook door een microscoop, twee punten op een onderlinge afstand Δx slechts gescheiden, dus als twee aparte punten, kunnen waarnemen wanneer aan een zekere voorwaarde is voldaan. Als we licht met een golflengte λ gebruiken en een microscoop met een openingshoek $2\theta'$ (zie fig. 35) dan kunnen we voor deze voorwaarde afleiden dat¹⁸:

$$\Delta x \gtrsim \frac{\lambda}{2 \sin \theta'}$$

Dus dat betekent dat we met de gebruikte golflengte λ de plaats van het elektron niet nauwkeuriger kunnen vastleggen dan met een *onzekerheid* Δx . Wel zul je opmerken: 'dat geeft toch niet, dan moet je dus licht gebruiken van zo klein mogelijke golflengte'!

Natuurlijk, dat kan, maar laten we nog eens verder kijken. We 'volgen' nu een foton dat komt uit de lichtbron. Als het het elektron überhaupt wil treffen, dan zal het loodrecht omhoog moeten gaan. Dus, voor de botsing heeft het foton een impulscomponent:

$$p_y = \frac{h}{\lambda} \text{ en } p_x = 0$$

Hoe is het nu na de botsing met het foton? In zijn algemeenheid weten we dat niet, maar we weten wel dat als we het elektron willen zien, het foton in ieder geval het objectief van de microscoop zal moeten treffen. Maar dat gebeurt alleen als het foton 'niet te schuin wegvliegt'. En dit betekent dat de impulscomponent in de x -richting, die het foton krijgt na de botsing, niet te groot mag zijn. Of preciezer gezegd: deze x -component moet, na de botsing, liggen tussen $-p \sin \theta'$ en $+p \sin \theta'$, als p de oorspronkelijke impuls is (die gelijk was aan

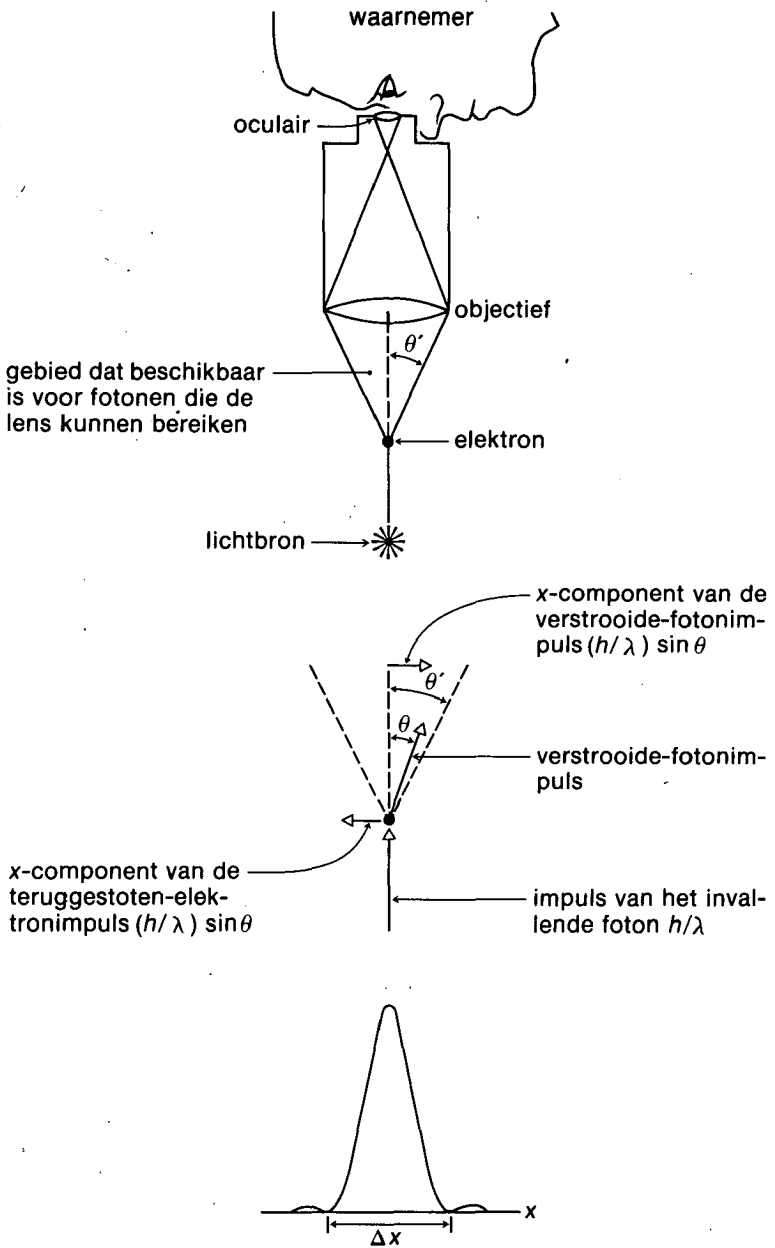


Fig. 35. Heisenbergs 'gedachten'-microscop voor γ -kwanten.

p_y !). We verwaarlozen daarbij even dat de impuls van het foton ook qua grootte kan veranderen door de botsing, omdat we toch alleen in de orde van grootte van de impulsverandering geïnteresseerd zijn. We kunnen dus concluderen dat in de impulscomponent in de x -richting van die fotonen die we waarnemen, een *onzekerheid* ter grootte van:

$$\Delta p_x \approx 2p \sin \theta'$$

kan optreden. Immers, al deze fotonen zullen ons oog bereiken, en daartussen kunnen we geen onderscheid maken. Maar dan treedt vanwege impulsbehoud ook dezelfde onzekerheid op in de impuls van het elektron waarvan we de plaats hebben waargenomen. Dus ook hiervoor geldt:

$$\Delta p_x \approx 2p \sin \theta' = 2 \frac{h}{\lambda} \sin \theta'$$

En hiermee hebben we nu een kwantitatieve omschrijving van wat we eerst, wat slordig, als de 'verstoring van het elektron' hadden omschreven. We zien dat een meting van de plaats van een elektron met een onzekerheid Δx een onzekerheid in de impuls ter grootte van Δp_x veroorzaakt. Daar kunnen we niet onderuit. We zien ook dat hoe nauwkeuriger de plaats bepaald wordt, door een kleinere golflengte λ te gebruiken, des te groter wordt de onzekerheid in de impuls. Deze twee onzekerheden zijn aan elkaar gekoppeld. We kunnen ze dan ook combineren tot de volgende '*onzekerheidsrelatie*':

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \gtrsim h$$

Een zelfde relatie kunnen we natuurlijk ook afleiden voor de y - en z -componenten van plaats en impuls omdat er geen reden is waarom de x -richting een voorkeursbehandeling zou verdienen. Het was de Duitser Heisenberg die deze relaties voor het eerste poneerde, en vandaar dat ze nu door de wereld gaan onder de naam: '*onzekerheidsrelaties van Heisenberg*'. Er zijn er nog meer af te leiden voor andere grootheden dan plaats en impuls, maar dat wil ik nu niet doen.

We kunnen beter wat verder nadenken over de betekenis van dit soort relaties voor ons inzicht in de natuur. Wat zegt de formule:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \gtrsim h$$

nu precies? Het merkwaardige is dat hierover de meningen nog steeds uiteenlopen. Heisenberg formuleerde zijn zienswijze ongeveer als volgt. Stel we willen de plaats en de impuls van een deeltje weten. Als we daartoe de plaats van het deeltje bepalen met een onzekerheid Δx , dan is het *fundamenteel onmogelijk* om zijn impuls *tegelijktijd*

nauwkeuriger te bepalen dan met een onzekerheid Δp_x gegeven door:

$$\Delta p_x \gtrsim \frac{h}{\Delta x}$$

En omgekeerd! En dit komt niet doordat onze meetinstrumenten te kort zouden schieten, maar de oorzaak moet fundamenteel gezocht worden in het golf-deeltje-dualisme van de natuur. Deze conclusie, die in de wereld der natuurkundigen verreweg de grootste aanhang heeft, volgt overigens niet helemaal rechtstreeks uit het microscoop-experiment. Immers, we probeerden daarin alleen de plaats van het deeltje te meten en niet *tegelijktijd* plaats en impuls. Toch maakt het aannemelijk dat we, als we dat wel zouden proberen, in ernstige problemen zouden komen. Ik stel dan ook voor om nu niet dieper in te gaan op dit interpretatieprobleem, maar om Heisenbergs interpretatie verder als uitgangspunt te nemen.

Welke gevolgen hebben de onzekerheidsrelaties?

De consequenties van de onzekerheidsrelaties voor het 'kwantum-mechanisch denken' zijn erg groot, maar ook moeilijk. Ze kunnen het opnieuw meer begrijpelijk maken waarom de kwantummechanische natuurbeschrijving wel sterk móét afwijken van de klassieke beschrijving. Laten we dit eens aan de hand van een voorbeeld preciezer bekijken. Stel we willen bijvoorbeeld de beweging van een tennisbal beschrijven. Hoe zouden we dit normaliter kunnen doen? Wel, de klassieke mechanica van Newton leert ons het volgende. Als we op een gegeven begintijdstip precies de plaats en impuls (beginsnelheid!) van de tennisbal kennen, en we kennen ook de totale kracht die steeds op de tennisbal werkt dan geeft de wet van Newton, $F = ma$, ons precies het recept waarmee we op elk tijdstip de plaats en de snelheid van de tennisbal kunnen uitrekenen. Het mag wiskundig misschien ingewikkeld worden, maar principieel is er geen probleem! Maar hoe weten we nu of onze berekening juist is geweest? Wel, dat kan heel eenvoudig gecontroleerd worden door de plaats en de snelheid van de tennisbal op geregelde tijdstippen te meten, bijvoorbeeld door de tennisbal steeds te fotograferen (zie fig. 36) en dit te vergelijken met de berekeningen. Natuurlijk kunnen we deze metingen niet continu op alle tijdstippen doen, maar dat is ook niet nodig. We vertrouwen er immers op dat als de berekeningen op een aantal tijdstippen kloppen met de metingen, dit dan ook het geval zal zijn op alle tussenliggende tijdstippen. Onze ervaring met de wet van Newton heeft ons dit vertrouwen geleerd. Zo zeer zelfs dat we nu ook geloven de baan van de tennisbal te kunnen berekenen zonder dat we die baan nog hoeven waar te nemen.

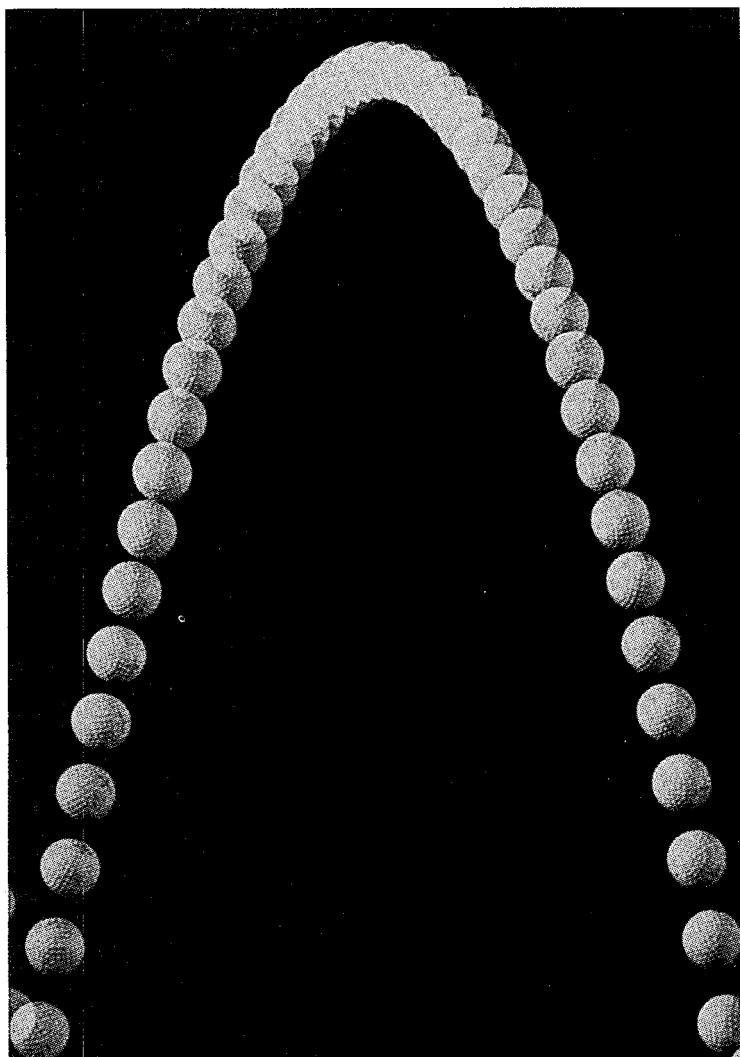


Fig. 36. Een stroboscopische opname van de baan van een tennisbal.

Er zijn enkele belangrijke achtergronden in deze 'klassieke bewegingsbeschrijving' aan te geven, zoals:

1. we veronderstelden dat op het begintijdstip plaats en impuls beide exact bekend waren;
2. we veronderstelden ook dat we tijdens de vlucht plaats en snelheid van de tennisbal steeds konden meten zonder dat dit merkbare

consequenties had voor het verdere verloop van de beweging; ofwel: we konden de door onze waarnemingen veroorzaakte verstoring van de tennisbal verwaarloosbaar klein maken;

3. we konden op deze manier aan de tennisbal een duidelijke *baan* toekennen, die we zowel konden meten als berekenen;

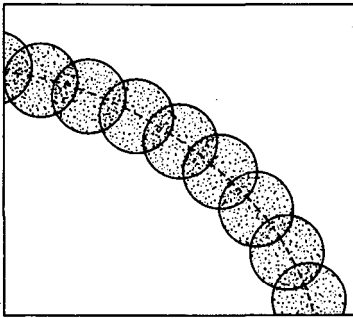
4. het was natuurlijk steeds dezelfde tennisbal die we op verschillende tijdstippen waarnamen. Immers we hadden er maar één, en die hadden we ook nog duidelijk herkenbaar gemaakt!

Hoe anders is dit echter allemaal voor een 'kwantummechanische tennisbal', bijvoorbeeld voor een elektron. Immers, volgens de onzekerheidsrelatie is het nu juist *onmogelijk* om op het begintijdstip plaats en impuls beide exact te kennen. En ook kunnen we 'onderweg' geen waarnemingen doen zonder daardoor het verdere verloop van de beweging op onbekende en niet te verwaarlozen wijze te beïnvloeden.

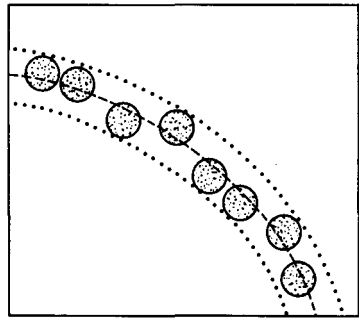
Maar als we de beginsnelheid niet precies weten, dan weten we ook niet hoe het elektron wegvliegt. En als we dat niet kunnen meten, zonder het elektron op onbekende wijze te verstoren, dan verliest het hele begrip *baan*, wat zo'n centrale rol speelt in de klassieke mechanica, volledig zijn betekenis in de kwantummechanica. Het heeft geen zin meer om over de baan van een elektron te spreken, want dat is iets wat we toch nooit kunnen waarnemen. Dit is precies wat we al geconcludeerd hadden uit ons tweespletenexperiment met elektronen! Maar, als we niet meer kunnen spreken over de baan van een elektron, dan scheidt dit nog een verrassend probleem. Dat betekent ook dat elektronen, en andere kwantummechanische deeltjes, geen eigen *identiteit* bezitten. Of, populair gezegd, je kunt een elektron niet herkennen, je kunt het geen 'naam geven'. Immers, je kunt één bepaald elektron nooit precies volgen op 'zijn weg door het leven'. Want precies volgen wil zeggen *continu* waarnemen, en dat kan niet vanwege het discrete, discontinue karakter van de daarvoor benodigde fotonen. En bovendien, waarnemen betekent verstoren, en je weet niet hoe!

Wel, dat alles houdt in dat je wel kunt zeggen: ik heb nu een elektron waargenomen, en daarnet ook. Maar je zult nooit zeker kunnen weten of je twee keer *hetzelfde* elektron hebt waargenomen. Elektronen zijn niet van elkaar te onderscheiden, ze hebben geen eigen identiteit!²¹

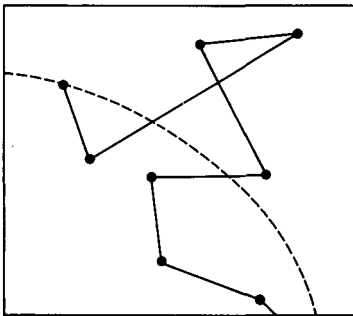
Dit alles heeft belangrijke consequenties. Immers, als we op een bepaald tijdstip niet zowel de plaats als de impuls van een deeltje exact kunnen kennen, en als we een deeltje niet eens kunnen herkennen, dan begrijpen we dat we ook geen *exacte voorspellingen* meer



(a)



(b)



(c)

Fig. 37. Een schematische tekening van de baan van een bewegend deeltje (stippelijijn) zoals die zou worden waargenomen met behulp van fotonen van drie verschillende golflengten.

(a) Eerst met energiearme fotonen van grote golflengte. Bij elke waarneming wordt de baan van het deeltje nauwelijks gestoord, maar de plaats ook maar zeer wazig vastgelegd. Daardoor 'zien' we in feite alleen een brede strook waarbinnen het deeltje zich moet bevinden.

(b) Deze strook wordt smaller voor fotonen van 'middelbare' energie en golflengte, maar ook onregelmatiger omdat bij elke waarneming nu de baan van het deeltje niet ongestoord blijft.

(c) Voor fotonen van hoge energie en korte golflengte wordt bij elke waarneming de plaats scherp vastgelegd maar tevens de baan van het deeltje onvoorspelbaar gestoord.

zullen kunnen doen omtrent het verdere gedrag van dat deeltje. Vandaar ook dat we ons in de kwantummechanica *principeel* zullen moeten beperken tot het beschrijven van de *kans op een bepaald deeltjesgedrag*, in plaats van een exacte beschrijving. En dat is een fundamenteel en diep-ingrijpend onderscheid tussen de klassieke en de moderne natuurbeschrijving. Maar het is, zoals we gezien hebben in ons elektronenexperiment, een noodzakelijke conclusie; geba-

seerd op de experimentele uitkomsten. En een conclusie ook waarvan de onzekerheidsrelaties de grondslag vormen.

In het eerste hoofdstuk hebben we een uitspraak van Laplace geciteerd waarin hij beweerde dat als je maar alle begingegevens precies zou weten, je de toekomst van de wereld zou kunnen voorspellen. Echter inmiddels zal het wel duidelijk zijn geworden dat Laplaces idee een illusie is gebleken. Immers Heisenberg heeft duidelijk gemaakt dat het nooit mogelijk zal zijn dat *alle* noodzakelijke begingegevens *tegelijk* bekend *kunnen* zijn...! Kortom, het deterministische wereldbeeld uit de vorige eeuw kan niet meer voldoen in het licht van onze huidige kennis. Maar daarover meer in het laatste hoofdstuk. Tenslotte kun je je nog afvragen waarom we in ons dagelijks leven zo weinig merken van de onzekerheidsrelaties. Wel, het antwoord daarop is eigenlijk simpel: omdat de constante van Planck zo'n ontzettend kleine waarde heeft!²² Hoe anders zou de wereld eruit zien als dit eens niet het geval was!

2.7. Het complementariteitsprincipe

What is matter? – Never mind.

*What is mind? – It doesn't matter.*²³

Tot slot van dit hoofdstuk over het *gedrag* van elektronen en fotonen kunnen we ons afvragen of een nadere kennis van dit *gedrag* ons ook iets verder heeft gebracht omtrent onze kennis van de *aard* van deze 'entiteiten' ('dingen'). Wat kunnen we daar nu van zeggen? Zijn het nu golven of deeltjes of beide of juist geen van beide? Hoe moeten we daar nu tegen aankijken? Inderdaad, we kunnen op grond van het voorgaande nu wat meer zeggen over deze zaken, maar het blijft een uiterst subtiële en moeilijke materie, zowel letterlijk als figuurlijk. Dit blijkt al uit het feit dat ook over het antwoord op deze vragen geen duidelijke eenstemmigheid aanwezig is bij de leidinggevende natuurkundigen. Er hebben zich – en dat is voor een exacte wetenschap als de natuurkunde toch wel iets bijzonders – naar aanleiding hiervan diverse partijen of 'scholen' gevormd. Je zou kunnen zeggen dat het feit dat deze verschillende 'scholen' naast elkaar kunnen bestaan, komt doordat de vraag naar het diepste wezen van onze materiële wereld veel meer een filosofisch probleem is dan een natuurkundig. Over de waarneembare verschijnselen, de wereld zoals wij die zien, is iedereen het wel eens, dat is geen probleem, maar over de diepste interpretatie daarvan lopen de meningen uiteen. Ik wil hier nu niet op deze verschillende zienswijzen ingaan, maar me beperken tot de belangrijkste 'school' met betrek-

king tot dit probleem. Deze school omvat verreweg het grootste deel van de natuurkundigen en wordt de 'Kopenhaagse school' genoemd, omdat haar ideeën het eerst zijn ontwikkeld in Kopenhagen door Niels Bohr.

Bohr nam het duale karakter van de materie, zoals dat blijkt uit onze experimenten, als fundamenteel uitgangspunt. Dit duale karakter komt, zoals eerder gezegd, het duidelijkst tot uiting in de relaties van De Broglie en Einstein, $p = h/\lambda$ en $E = hf$.

Beide relaties spreken tegelijkertijd over deeltjes en golven. Maar hoe kan enig 'zinnig natuurkundig iets' nu tegelijkertijd zo uitgesproken verschillende en elkaar zelfs uitsluitende eigenschappen bezitten? Het antwoord van Bohr is echter dat geen enkele *waarnemer* ooit een natuurkundig 'iets' zal *waarnemen* dat er *op hetzelfde moment* uitziet als een deeltje én als een golf. De tegenstrijdige golf- en deeltjesaspecten van bijvoorbeeld een elektron blijken altijd op *verschillende tijdstippen* en in duidelijk verschillende soorten experimenten: 'elektrongolven' en 'elektrondeeltjes' verschijnen *nooit in hetzelfde experiment*. En dat kan ook niet anders. Immers, onze experimentele waarnemingen zijn uiteindelijk altijd *macroscopische* waarnemingen, en dus behorend tot de wereld van de klassieke natuurkunde. Maar klassiek kunnen we in feite alleen deeltjes en golven waarnemen, en deze sluiten elkaar klassiek gesproken uit. We kunnen onze experimenten dus alleen zo inrichten dat we óf deeltjesaspecten waarnemen óf golfaspecten, maar nooit beide tegelijk. Als ons experiment nu zo ingericht is dat we, klassiek gesproken, deeltjes verwachten te meten, dan vinden we ook deeltjes. Bijvoorbeeld als we elektronen tellen. Maar als het zo ingericht is dat we golfverschijnselen kunnen meten, bijvoorbeeld het opmeten van een interferentiepatroon, dan vinden we die ook.

Dus vanuit het standpunt van de natuurkundige waarnemingen – het enig toegestane standpunt in de kwantummechanica – is er geen tegenspraak. Tegenover de eenduidige beschrijving van de natuur zoals de klassieke natuurkunde die ontwikkeld had, stelde Bohr de fundamentele noodzaak van een *duale* beschrijving van de natuur. Golf- en deeltjesbeschrijvingen lijken onderling in tegenspraak met elkaar, maar toch zijn ze beide essentieel voor een *volledige* natuurbeschrijving. Beide beschrijvingen *vullen elkaar aan*. Beide beschrijvingen zijn in Bohrs woorden 'complementair'. Ze geven 'complementaire' aspecten van één enkele natuurkundige 'entiteit', zoals bijvoorbeeld een elektron. Het is ditzelfde patroon dat steeds weer terugkomt door heel de kwantummechanica. Bij elke belangrijke waarneembare natuurkundige eigenschap hoort een complementaire eigenschap die, vreemd genoeg, niet op hetzelfde moment als de andere met absolute nauwkeurigheid kan worden waargenomen.

Het zijn juist de onzekerheidsrelaties die ons hier behoeden voor fatale innerlijke tegenstrijdigheden omdat volgens deze relaties complementaire, en dus tegenstrijdige begrippen, toch nooit tegelijkertijd volledig scherp kunnen worden waargenomen. Op deze manier bepalen de onzekerheidsrelaties, als het ware, de grens van de toepasbaarheid van onze, op macroscopische waarnemingen georiënteerde, begrippentaal voor de beschrijving van de atomaire wereld.²⁴

Het voorgaande is ruwweg de belangrijkste inhoud van wat bekend staat als het 'complementariteitsprincipe van Bohr'. Een uitermate subtiel en moeilijk verhaal en het hoeft dan ook niemand te verontnemen die het gevoel krijgt het niet helemaal te begrijpen. Misschien dat het volgende beeld het inzicht nog wat kan verbeteren. Je zou in analogie met de vraag: 'wat is materie?' de vraag kunnen stellen: 'wat is een mens?'. Een antwoord dat hier dan vaak op gegeven wordt, is: een eenheid van lichaam en geest! Ofwel het 'verschijnsel' mens wordt 'opgedeeld' in twee aspecten, die ieder een wezenskenmerk aangeven. Elk van deze aspecten is even belangrijk om een goed beeld te kunnen vormen van het totaal. Het zijn elkaar aanvullende, complementaire aspecten. En het is zelfs zo dat als je meer wilt weten van ieder van deze aspecten, je daartoe verschillende experimenten moet uitvoeren, elk experiment gericht op één bepaald aspect. Zo kun je zeggen dat de 'geest' zich manifesteert door het denken en het gedrag van de mensen. Dus als je daar meer van af wilt weten zul je bijvoorbeeld het gedrag van mensen moeten bestuderen. En daarbij zullen je experimenten niet of nauwelijks informatie kunnen bieden over dat andere aspect: het lichaam. Immers, daarvoor moet je heel andere experimenten doen. Als je dit lichaam tot in alle details wilt kennen, kom je er zelfs niet onderuit juist de 'geest' te doden. Pas dan kun je deze details echt van nabij bestuderen. Beide soorten studies, zowel van het lichaam als van de geest, zijn noodzakelijk en elkaar aanvullend. Alleen deze gezamenlijke kennis kan ons enigszins een idee geven van het antwoord op de gestelde vraag. Toch zullen beide soorten studies ons geen definitief antwoord kunnen geven. In diepste wezen blijft het raadsel 'mens' bestaan. De wetenschap kan daarop geen antwoord geven. Welnu, ongeveer op dezelfde manier zou je kunnen praten over de vraag: 'wat is materie?'

Het complementariteitsprincipe van Bohr is in zekere zin onbevredigend omdat het ons eigenlijk toch maar laat zitten met de vraag: wat *is* nu eigenlijk een elektron? Het ontkent zelfs de mogelijkheid om daar ooit een antwoord op te vinden. Althans een aanschouwelijk

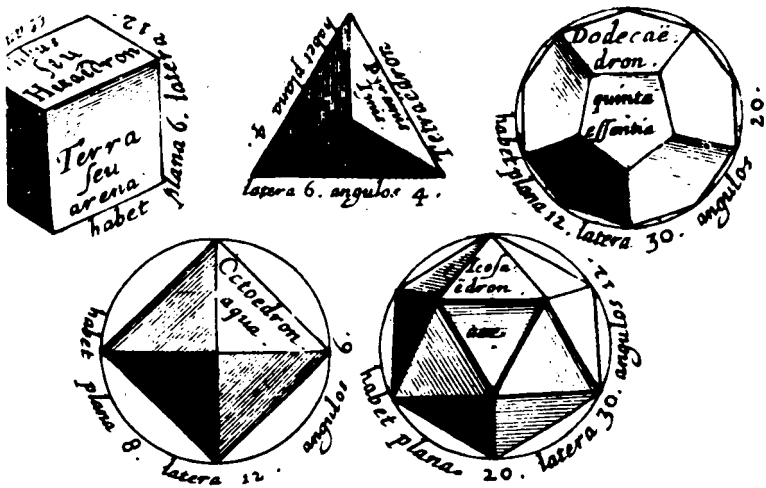


Fig. 38. Plato's elementaire deeltjes: de wiskundige grondvormen der natuur.

antwoord, dat geformuleerd kan worden in onze gebruikelijke taal. Nu is deze vraag natuurlijk niet nieuw. De oude Grieken stelden al het probleem van de fundamentele aard van de materie. Vooral het antwoord hierop van de filosoof Plato is, in het licht van de moderne kwantummechanica, bijzonder interessant. Daarom wil ik daar even op ingaan. Plato stelde dat alle aardse materie bestond uit vier elementen: aarde, water, lucht en vuur. Met deze vier elementen correspondeerden volgens hem vier soorten van kleinste deeltjes. Echter, deze elementaire deeltjes waren volgens Plato geen materiële deeltjes meer, maar nog slechts *wiskundige grondvormen van strenge symmetrie*. De kleinste deeltjes van het element aarde werden als kubusjes, die van het element water als icoesaëders, die van het element lucht als octaëders en tenslotte die van het element vuur als tetraëders voorgesteld (zie fig. 38).

De vraag naar het waarom van de elementaire deeltjes werd door Plato op de wiskunde teruggevoerd. De elementaire deeltjes moesten deze door Plato toegeschreven vorm wel bezitten, omdat dat wiskundig gezien de *mooiste en eenvoudigste* vorm is. Wat uiteindelijk aan de verschijnselen ten grondslag zou liggen, was dus niet de materie, maar de wiskundige wet, de symmetrie, de wiskundige vorm. Tot zover over Plato's ideeën.

Maar wat hebben deze ideeën ons nu nog te zeggen? Natuurlijk geloven we al lang niet meer in zijn vier elementen en de daarbij behorende elementaire deeltjes. Maar toch ... ! Laten we eens luisteren naar wat Heisenberg hierover zegt:

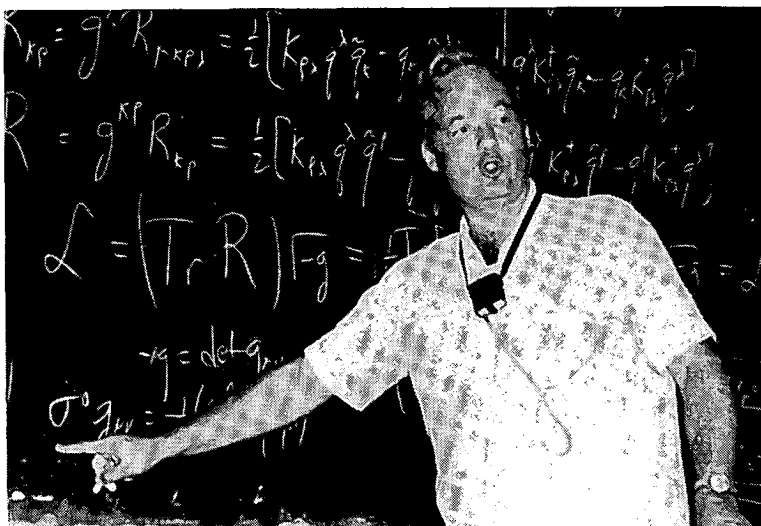
'Mijns inziens heeft de moderne fysica definitief in het voordeel van

Plato beslist. Want de kleinste deeltjes van de materie zijn inderdaad geen fysische objecten in de gewone zin van het woord, het zijn vormen, structuren, of – in de geest van Plato – ideeën waar men slechts in de wiskundige taal ondubbelzinnig over spreken kan.²⁴

En verder:

‘Het bleek dat de gewenste objectieve realiteit van de elementaire deeltjes een te grove vereenvoudiging van de werkelijkheid weergaf en daarom plaats moest maken voor een veel abstractere voorstelling. Als wij ons een voorstelling willen vormen van de manier waarop de elementaire deeltjes zouden moeten bestaan, kunnen wij namelijk principieel niet meer de fysische processen negeren waardoor wij ze kunnen waarnemen. Als wij voorwerpen uit het dagelijks leven waarnemen, dan speelt het fysisch proces waardoor wij ze waarnemen, slechts een ondergeschikte rol. Bij de kleinste bouwstenen daarentegen veroorzaakt ieder waarnemingsproces een grove verstoring; men kan niet meer over het gedrag van het deeltjes los van de waarneming spreken. Dit heeft uiteindelijk tot gevolg dat de natuurwetten zoals zij in de kwantummechanica wiskundig geformuleerd worden, geen betrekking meer hebben op de deeltjes zelf, maar op onze kennis van die elementaire deeltjes. De vraag of het deeltje ‘zelf’ in ruimte en tijd bestaat, kan in deze vorm dus niet meer gesteld worden, omdat wij steeds slechts over die gebeurtenissen kunnen spreken die zich afspelen wanneer door de wisselwerking met een of ander fysisch systeem, bijvoorbeeld het meetapparaat, het gedrag van het elementaire deeltje beïnvloed wordt. De

Fig. 39. ‘... de doorzichtige klaarheid van de wiskunde ...’



voorstelling van de objectieve realiteit van het elementaire deeltje is dus op merkwaardige wijze vervaagd; niet in een nevel van een of andere nieuwe, onduidelijke of nog onbegrepen voorstelling van de werkelijkheid, maar in de doorzichtige klaarheid van de wiskunde, die niet meer het gedrag van het elementaire deeltje beschrijft, maar onze kennis van dat gedrag. De atoomfysicus heeft moeten accepteren dat zijn wetenschap slechts een schakel is in de eindeloze keten van discussies tussen mens en natuur, dat hij niet zonder meer van 'de natuur' kan spreken. De natuurwetenschap is ondenkbaar zonder de mens en wij moeten ons er altijd van bewust blijven dat, zoals Bohr dat uitgedrukt heeft, wij niet als toeschouwers, maar steeds als spelers op het toneel van het leven staan!

Welnu, dan lijkt me nu de tijd gekomen om eens iets te gaan proeven van die 'doorzichtige klaarheid van de wiskunde'; de enige taal immers waarin de wetten van de kwantummechanica ondubbelzinnig geformuleerd kunnen worden!

3. Iets over het kwantummechanisch formalisme

*'Gar Manches rechnet Erwin schon
mit seiner Wellenfunktion
nur wissen möcht man gerne wohl
was man sich dabei vorstell'n soll.'*²⁵

In dit hoofdstuk zullen we enkele basisprincipes bespreken van het wiskundige formalisme. We zullen daarbij proberen deze bespreking zo eenvoudig mogelijk te houden. Steeds is het de bedoeling de natuurkundige hoofdlijnen te blijven volgen en niet in te gaan op wiskundige details. Daarna zullen we de theorie toepassen en verduidelijken aan de hand van enkele voorbeelden. Maar eerst moeten we nog iets doen aan onze 'taalontwikkeling'; hetgeen betekent dat we beginnen met een wat preciezere omschrijving van misschien al wel bekende begrippen.

3.1. Wat is een toestand?

Systeem

Allereerst het begrip: 'systeem' of 'fysisch systeem'. Hiermee bedoelen we eigenlijk niets anders dan het *object* dat we willen bestuderen. En daartoe denken we het dan los van zijn omgeving en beschouwen alleen het systeem sec.²⁶ Zo'n systeem kan van alles zijn: een macroscopisch voorwerp of een groep van voorwerpen, één deeltje of meerdere deeltjes, een kristal, een ion, of een elektron, enz.; kortom al datgene waarvan we het natuurkundig gedrag zouden willen beschrijven.

Maar als we verstandig over zo'n systeem willen praten, of zelfs om het bestaan ervan überhaupt te kunnen kennen, zullen we er toch eerst iets van af moeten weten. Hoe komen we aan die kennis?

Waarneembare grootheid

Wel, natuurlijk door aan ons systeem waarnemingen te doen! Maar dat betekent, helemaal doorgedacht, dat de kennis die we van een fysisch systeem kunnen hebben, volledig bepaald is door de *waarneembare eigenschappen* van zo'n systeem. Het zijn deze eigenschappen die we, als we ze in een *kwantitatieve maat* kunnen uitdrukken, aanduiden met de term: *waarneembare grootheden*. Bijvoorbeeld, laten we als fysisch systeem eens een bloem in gedachten nemen. Dan

kunnen we daarvan allerlei eigenschappen waarnemen zoals: haar plaats, kleur, geur, vorm, gewicht, groeisnelheid enz. Al deze waarnemingen samen maken de bloem voor ons tot wat ze is: een bloem! Alleen, we zijn er in dit geval zo aan gewend dat we ons dit vaak nog nauwelijks realiseren. Toch geldt ook hier: het zijn de waarneembare grootheden van een systeem waar het voor de *natuurkundige* beschrijving op aan komt. Zowel voor een elektron als voor een bloem. Of eigenlijk, voor een elektron in zekere zin zelfs nog sterker. Een elektron kan zich immers alleen indirect manifesteren, alleen door de 'gevolgen' van zijn waarneembare grootheden, zoals: zijn plaats, snelheid, massa, lading enz. Van een goede theorie mogen we dan ook eisen en verwachten dat ze de *waarden* die deze waarneembare grootheden kunnen aannemen, beschrijft in overeenstemming met de experimentele uitkomsten. Niet meer, maar ook niet minder! Bijvoorbeeld, de vraag of een elektron mooi is, is vooralsnog voor de natuurkunde net zo onbelangrijk als de vraag of een bloem gevoel heeft. Beide vragen hebben voor zover we weten immers geen relatie met een waarneembare grootheid. Resumerend kunnen we dus zeggen: een fysisch systeem wordt volledig gekenmerkt en beschreven door de waarden van zijn waarneembare grootheden.



Fig. 40. De toestand van een golfspeler, waargenomen in de tijd.

Toestand

We zeggen nu: de *waarden* die de waarneembare grootheden van een bepaald systeem op een zeker *moment* aannemen, bepalen te zamen de *toestand* van het systeem. Je zou kunnen zeggen, de toestand van een systeem is zoiets als een momentopname, een soort foto! Maar, dat betekent dat, als we maar de *toestand* van een systeem in *de tijd zouden kunnen volgen* door als het ware een continue tijdopname te maken, we ook alles van ons systeem zouden afweten wat er maar van te weten valt. En daar gaat het dus om in de natuurkunde; maar dat is geen eenvoudige opgave, zoals we nu zullen zien!

3.2. Over toestandsfuncties en hun betekenis

De vraag waar we ons nu over willen buigen, is: hoe kom je aan die kennis van de toestand van een systeem? En dan natuurlijk met name van een kwantummechanisch systeem. Hoe kun je daaraan rekenen? Zijn daar regels voor? Zoals op grond van het voorgaande al verwacht mag worden, speelt het begrip toestand in de kwantummechanica een zeer centrale rol. Dit blijkt al direct wanneer we nu eerst een van de axioma's formuleren waarop de kwantummechanica gebaseerd is. Dit axioma luidt als volgt:

-
1. *Met elke toestand van een kwantummechanisch systeem correspondeert een bepaalde functie Ψ , die toestandsfunctie wordt genoemd.*
-

Hiermee zijn we een klein stapje verder gekomen. We vermoeden nu in ieder geval dat het er kennelijk om zal gaan deze *toestandsfunctie* te kennen. En die toestandsfunctie – of *golffunctie* zoals ze meestal ook genoemd wordt – zal dan wel de sleutel inhouden waardoor we de waarden van waarneembare grootheden kunnen berekenen. En daarmee kennen we dan immers ons systeem!

Maar wat moeten we ons daar nu bij voorstellen? Wat betekent zo'n toestandsfunctie nu? Hoe werkt dat? Stel bijvoorbeeld eens dat we als systeem één deeltje beschouwen dat zich eenvoudigheidshalve alleen in één dimensie, de x -richting, kan bewegen. Dan zegt axioma I dus dat we aan dit deeltje steeds een toestandsfunctie $\Psi(x,t)$ kunnen toekennen die op een of andere manier het gedrag van het deeltje moet kunnen beschrijven. De betekenis van deze Ψ wordt nu vastgelegd door een tweede axioma:

II. *Als op het ogenblik t een meting wordt gedaan om de plaats van een deeltje dat correspondeert met de toestandfunctie $\Psi(x,t)$, te bepalen, dan wordt de waarschijnlijkheid $P(x,t)dx$ om het deeltje ten tijde t tussen x en $x+dx$ aan te treffen, gegeven door:*

$$P(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx.$$

Dit is een geweldig belangrijke en fundamentele regel. Immers, als de toestandfunctie de sleutel is tot alle kennis die we van een systeem kunnen hebben, dan zegt dit tweede axioma dat deze kennis altijd van statistische aard zal zijn. Hiermee wordt dus de experimentele uitkomst van ons gedachtenexperiment met de twee spleten, tot fundamenteel uitgangspunt van de theorie gemaakt. Door deze *waarschijnlijkheidsinterpretatie* van de toestandfunctie zullen we in de kwantummechanica alleen uitspraken kunnen doen omtrent de *waarschijnlijkheid van het gedrag van systemen*. En meer hoeft ook niet, omdat we immers *experimenteel* ook alleen *waarschijnlijkheden* kunnen meten.

We zien uit dit axioma dat het *kwadraat* van de toestandfunctie, $|\Psi(x,t)|^2$, moet overeenkomen met een *meetbare waarschijnlijkheid* $P(x,t)$ en niet de toestandfunctie *zelf*. Deze functie *zelf* heeft dus kennelijk geen directe fysische interpretatie. Dit kan ook niet, want in de praktijk blijken deze functies in het algemeen *complexe* functies te zijn, dat wil zeggen functies met complexe getallen als functiewaarden. En een complex getal kan nooit overeenkomen met iets uit de reële werkelijkheid.²⁷ Maar het kwadraat van een complexe functiewaarde, of beter: het kwadraat van de absolute waarde, is altijd weer wel een reëel getal en dit kan dus wel een reële betekenis hebben. De toestandfunctie zelf is eigenlijk niet meer dan een puur abstract wiskundig hulpmiddel, waarbij je je *verder niets moet en kunt voorstellen!* Wel zie je dat het feit dat we over het kwadraat van de toestandfunctie praten, associaties oproept met de eerder gebruikte klassieke golventaal. Dit blijkt nog sterker uit andere benamingen voor de toestandfunctie, zoals *golffunctie*, of *waarschijnlijkheidsamplitude*. Maar dat is alleen maar een overeenkomst in woorden, *zeker niet in betekenis*.

Een andere opmerking over dat tweede axioma is nog te maken over de vraag waarom we spreken over: het interval tussen x en $x+dx$. De zin daarvan kan weer het gemakkelijkst ingezien worden vanuit een experimenteel standpunt. Immers, het axioma gaat over het *meten* van de plaats van een deeltje. Maar elke detector zal altijd een zekere uitgebreidheid dx hebben. Dat betekent dat elke meting altijd een uitspraak zal doen over de plaats van een deeltje ergens binnen de uitgebreidheid van de detector en nooit over de exacte plaats. En

vandaar dat de theorie ons dus ook alleen een uitspraak hierover hoeft op te leveren.

Ik denk dat, mocht bovenstaand verhaal enigszins duister lijken, het wat helderder wordt wanneer we zien hoe deze toestandsfuncties in de praktijk werken. Maar dan zullen we eerst antwoord moeten geven op de vraag: hoe komen we aan de toestandsfunctie van een systeem? Aan welke voorwaarden moeten ze voldoen? Via welk recept kunnen we ze vinden? Daarover gaat de volgende paragraaf.

3.3. Over stationaire toestanden en hun vergelijking

3.3.1 Bij ons geen plaats voor de tijd

Ik heb net gezegd dat deze toestandsfuncties in het algemeen complexe functies zijn. Dat was geen bezwaar zolang we niet op de specifieke vorm in wilden gaan, maar nu dat wel de bedoeling is, wil ik liever niet met complexe getallen werken. Dat introduceert, als die nog onbekend zijn, alleen maar extra problemen. Dat betekent dat, als we ons willen beperken tot het bespreken van reële toestandsfuncties, we ons ook zullen moeten beperken tot de bespreking van slechts een *bepaald soort* problemen. Wat houdt deze beperking nu precies in? Wel, ik heb al eerder gezegd dat de toestand van een systeem volledig bepaald wordt door de *waarden* die de waarneembare grootheden in die toestand kunnen aannemen. In het algemeen zullen die waarden ook van de tijd afhangen. Anders zouden er immers nooit veranderingen kunnen optreden in de natuur! Juist deze *tijdsafhankelijkheid* zullen we nu verder buiten beschouwing moeten laten. Je zou dus ruwweg kunnen zeggen dat we ons zullen beperken tot de beschrijving van de *stabiele* toestanden van een systeem. Of, zoals dat officieel genoemd wordt, we beperken ons tot *stationaire* toestanden, een term die al eerder gebruikt is bij de bespreking van het atoommodel van Bohr. Het 'opgaan, blinken en verzinken' van de atomaire wereld zal dus, althans voor ons, verder verborgen blijven!

Als we nu terugdenken aan de interpretatie van de toestandsfunctie zoals gegeven in het tweede axioma, dan betekent de beperking tot stationaire toestanden dat de waarschijnlijkheid $P(x,t)dx$ om het deeltje tussen x en $x + dx$ aan te treffen op *elk willekeurig* tijdstip t *hetzelfde* moet zijn. De plaats van het deeltje is immers ook een waarneembare grootheid! Ofwel: deze waarschijnlijkheid hangt dan helemaal niet meer van de tijd af, en dus ook $|\Psi(x,t)|^2 dx$ niet meer. We zullen ons dus verder alleen buigen over de vorm van

tijdsonafhankelijke toestandsfuncties. Want het is juist altijd de tijdsafhankelijkheid die de toestandsfunctie in ieder geval complex maakt.²⁸

3.3.2 De Schrödinger-vergelijking

De vraag die we dan nu moeten beantwoorden, is: wat bepaalt de vorm van deze stationaire toestandsfuncties? We zullen deze trouwens voortaan korthedshalve steeds golf functies noemen. En wat betekent nu precies zo'n stationaire toestand? Hoe 'ziet' die eruit? Het antwoord hierop is weer gebaseerd op een axioma. Zij het dan dat we dit axioma zullen toespitsen op een eenvoudig systeem. We beschouwen daartoe één deeltje, dat alleen eendimensionaal kan bewegen en waarvan de potentiële energie gegeven wordt door de functie $V(x)$. Hiervoor geldt dan dat:

III. *De mogelijke golf functies van een eendeeltjesysteem worden gegeven door de oplossingen van de vergelijking:*

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

daarin is: $\psi(x)$ de golf functie van het deeltje

m de massa van het deeltje

E de totale energie, dit is de som van kinetische en potentiële energie

3.3.3 Waarom dit recept?

Hiermee hebben we dus een recept volgens welk we kunnen uitrekenen of er in ons systeem stationaire toestanden mogelijk zijn en welke golf functies daar dan bijhoren. In een voorbeeld dat we straks behandelen, zullen we in meer detail laten zien hoe dit recept moet worden toegepast. Maar nu wil ik eerst iets zeggen over de vraag waar dit recept vandaan komt. Waarom ziet het eruit zoals het eruit ziet? En hoe kan het worden afgeleid?

Het antwoord hierop is even kort als eenvoudig: dat weten we niet! *Waarom* de vergelijking deze vorm heeft, is onbekend. En ook niet *waarom* de golf functies alleen een *statistische betekenis* hebben. We weten alleen dat als je op deze manier de golf functie uitrekent en interpreteert zoals is aangegeven, dat dan de berekeningen blijken te kloppen met de experimentele waarnemingen. En daarmee concluderen we dan dat deze regels 'werken'. We weten dus wel 'hoe', maar niet 'waarom'. Vandaar dat we deze regels axioma's hebben ge-

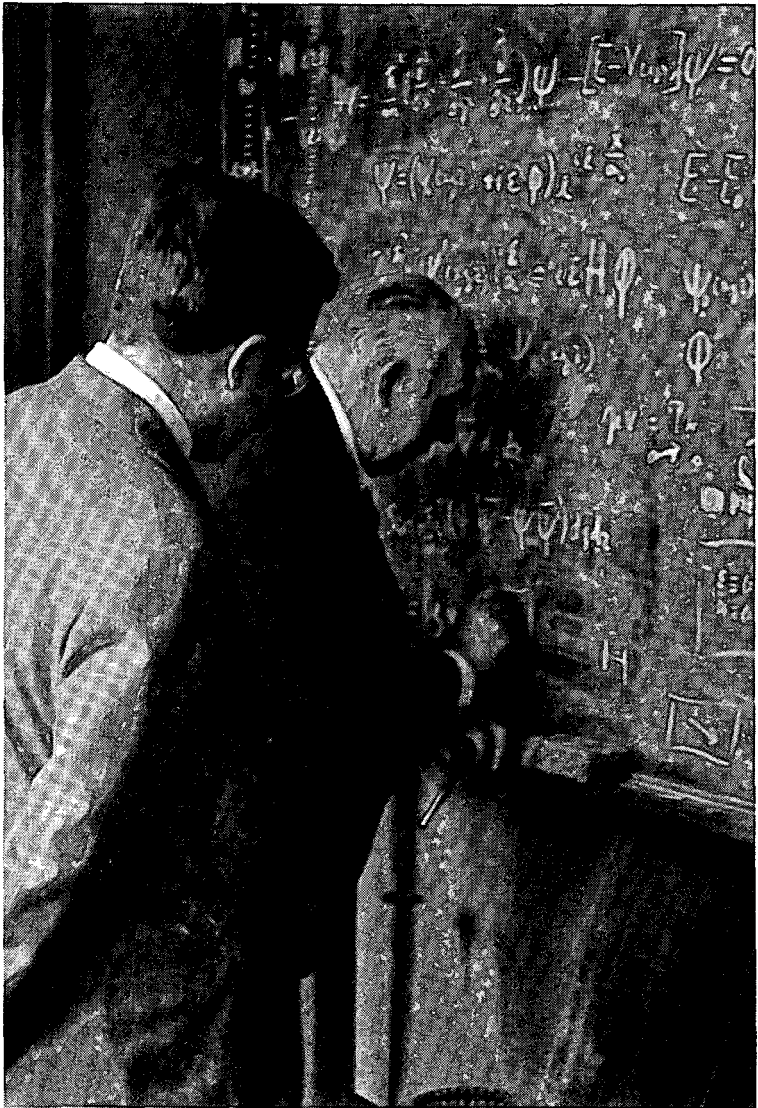


Fig. 41. Bohr aan het werk met de Schrödinger-vergelijking.

noemd. Het zijn de uitgangspunten van het formalisme, en die uitgangspunten kunnen verder niet afgeleid worden.

De gegeven vergelijking werd voor het eerst in 1926 geponeerd door de Oostenrijker Erwin Schrödinger, en vandaar dat ze nu door het leven gaat onder de naam (tijdsonafhankelijke) Schrödinger-

vergelijking. Schrödinger kon deze vergelijking uiteraard ook niet afleiden. Hij 'gokte' haar, zou je kunnen zeggen, maar hij gokte niet in het wilde weg. Hij werd daarbij sterk beïnvloed door het werk van Einstein en De Broglie, maar ook door een formulering van de wetten van de klassieke mechanica die bekend staat als het Hamilton-formalisme. Trouwens, eigenlijk is er met het 'gokken' van de Schrödinger-vergelijking niets bijzonders aan de hand. 'Verstandig gokken' is een procedure die juist erg belangrijk is in de natuurkunde. Immers, juist als je vooruitgang wilt boeken op nog *onbekend* terrein, en dat is toch de essentie van nieuwe wetenschappelijke ontwikkelingen, dan kun je van tevoren nooit zeker weten of de weg die je kiest, wel de goede is. Dat blijkt altijd pas achteraf. Je kunt de rol die de gegeven axioma's spelen in de kwantummechanica, heel goed vergelijken met de rol van de wetten van Newton in de klassieke mechanica. Het zijn de fundamenteen waarop de hele theorie wordt opgebouwd. En, niemand weet bijvoorbeeld ook waarom de wet $F = ma$ deze vorm heeft. Ook Newton ontdekte niet 'het waarom' van deze wet, maar alleen 'het hoe'. Hij was de eerste die deze vorm 'gokte', en hij bleek nog te werken ook! Alleen, met de wetten van Newton zijn we inmiddels vertrouwd geraakt, ze beschrijven het gedrag van een klassiek deeltje ('kleeltje' dus) en dat kennen we. Maar een 'kweeltje' is nu eenmaal zoals we gezien hebben, een aanzienlijk gecompliceerder systeem dan een 'kleeltje'. En dat weerspiegelt zich uiteraard in de theorie die het gedrag van zo'n 'kweeltje' moet beschrijven.

3.4. Over de put, het deeltje en de kans dat het erin zit!

3.4.1 Ons systeem

Laten we nu een concreet voorbeeld in detail gaan uitwerken, om te zien hoe 'het recept werkt'. Dit voorbeeld is zo eenvoudig mogelijk gehouden en misschien lijkt het daardoor nogal geconstrueerd; zelfs bijna pathologisch! Toch zullen we zien dat het ons al kan helpen om ook een aantal reële problemen goed te begrijpen.

Als systeem kiezen we weer één eendimensioneel bewegend deeltje. We veronderstellen daarbij dat de potentiële energie, $V(x)$ van dit deeltje, gegeven wordt door de volgende functie:

$$V(x) = 0 \quad \text{voor } 0 < x < a$$

$$V(x) = \infty \quad \text{voor } x \leq 0 \text{ of } x \geq a$$

We zeggen dan dat het deeltje zich bevindt in een eendimensionale, oneindig diepe potentiaalput met breedte a (zie fig. 42). Maar je

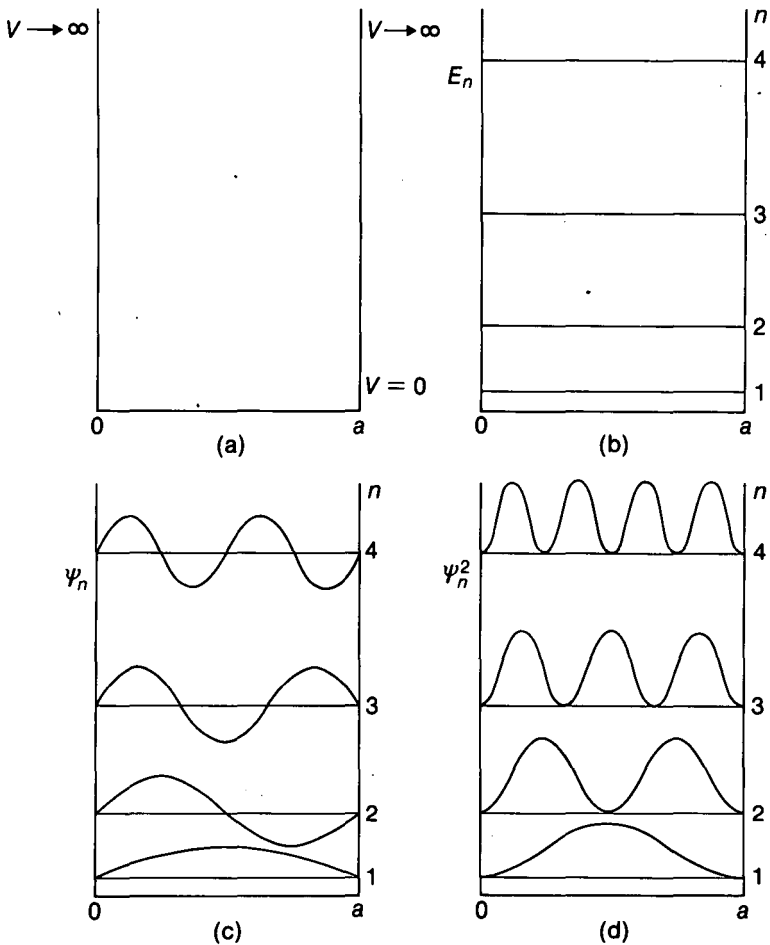


Fig. 42. Een deeltje in een eendimensionale, rechthoekige, oneindig diepe potentiaalput;
 (a) het verloop van de potentiële energie;
 (b) de toegelaten energiewaarden E_n ;
 (c) de daarbij horende golf functies ψ_n ;
 (d) en de waarschijnlijkheidsverdelingen ψ_n^2 .

moet deze uitdrukking en de figuur niet verkeerd interpreteren. Je moet daarbij niet denken aan een deeltje in een *echte* put. Immers, de figuur stelt voor de *potentiële energie als functie* van de *plaats* van het deeltje. De *plaats* van het deeltje is echter altijd gebonden aan het interval $(0,a)$ van de x -as. Het bevindt zich altijd ergens in dit
 88

interval op de x -as. Het beweegt immers slechts in *één dimensie!* Binnen het interval $(0,a)$ beweegt het deeltje volledig vrij, dat wil zeggen daar werken geen krachten op het deeltje, omdat de potentiële energie daar constant is. Buiten dit interval kan het deeltje nooit komen want dat zou een oneindige hoeveelheid arbeid kosten.

3.4.2 Het oplossen

Daarmee is al een deel van ons probleem opgelost. Als het deeltje nooit buiten dit interval $(0,a)$ kan komen, betekent dit dat de waarschijnlijkheid dat we het daar ooit zullen meten uiteraard gelijk is aan nul. Dus:

$$|\psi(x)|^2 dx = 0 \text{ voor } x \geq a \text{ of } x \leq 0$$

en dus moet ook:

$$\psi(x) = 0 \quad \text{voor } x \geq a \text{ of } x \leq 0$$

Binnen het interval $(0,a)$ krijgt de Schrödinger-vergelijking nu de volgende vorm:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

en deze moeten we nu oplossen. Daartoe is het handig deze vergelijking eerst als volgt te herschrijven:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m E}{h^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x)$$

waarbij we nu dus een nieuw symbool k hebben ingevoerd, zodanig dat:

$$k^2 = \frac{8\pi^2 m E}{h^2}$$

Wat betekent deze k precies? Dat wordt duidelijk als we bedenken dat de totale energie E 'in de put' gegeven wordt door:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2}mv^2$$

Als we dit invullen in de formule voor k^2 , krijgen we:

$$k^2 = \frac{4\pi^2 m^2 v^2}{h^2} = \frac{4\pi^2 p^2}{h^2}$$

met p de impuls van het deeltje. Als we nu gebruik maken van de relatie van De Broglie $\lambda = h/p$ dan wordt dit:

$$k^2 = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \text{ en dus: } k = \frac{\pm 2\pi}{\lambda}$$

We zien dat deze k niet zomaar een loos symbool is, maar direct te maken heeft met de ‘golflengte van het deeltje’; k wordt het *golfgetal* van het deeltje genoemd. Een benaming die, zoals verwacht mag worden, stamt uit de klassieke trillingsleer. Ook zien we al hoe golf- en deeltjeseigenschappen als het ware door elkaar heen in deze vergelijking verweven zitten. En dat maakt het al iets minder vreemd om te begrijpen dat de vergelijking ‘werkt’.

Laten we nu eerst proberen de vergelijking verder op te lossen. Deze kunnen we inmiddels schrijven als:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \psi(x)$$

Het oplossen van zo’n ‘differentiaalvergelijking’ is in het algemeen een kwestie van ‘verstandig proberen’. Alleen, in dit geval is dat niet zo moeilijk. Immers, we zoeken naar een functie die, nadat je haar twee keer gedifferentieerd hebt, op een constante en een minteken na weer in zichzelf is overgegaan. Dat soort functies kennen we. We zien, door te proberen, direct dat functies als:

$$\psi_a(x) = A \cos 2\pi \frac{x}{\lambda} \text{ en } \psi_b(x) = B \sin 2\pi \frac{x}{\lambda}$$

inderdaad voldoen aan de gegeven vergelijking. Het ziet ernaar uit dat we dus de oplossingen hebben gevonden. Maar daarmee zijn we er nog niet!

3.4.3 Randvoorwaarden

We moeten steeds in gedachten houden dat deze *wiskundige* functies uiteindelijk bedoeld zijn om de *natuurkundige* werkelijkheid te beschrijven. Dat betekent dat de natuur nog bepaalde extra voorwaarden zou kunnen opleggen aan deze functies. ‘Randvoorwaarden’ noemen we die, en we zullen deze door de natuur opgelegde randvoorwaarden dus moeten vertalen in wiskundige termen om te zien of onze gevonden functies eraan kunnen voldoen. Welnu, natuurkundig gezien verwachten we dat de waarden die de waarneembare grootheden in een bepaalde toestand kunnen aannemen, in ieder geval *continu* van de plaats zullen afhangen. Daar mogen zonder aanwijsbare oorzaak geen vreemde onverwachte sprongen in optreden. In het bijzonder verwachten we bijvoorbeeld dat de waarschijnlijkheid om het deeltje in een bepaald interval, tussen x en $x + dx$, aan te treffen continu van de plaats x afhangt. En verder

moet natuurlijk de waarschijnlijkheid om het deeltje überhaupt ergens, waar dan ook, aan te treffen, per definitie gelijk aan 1 zijn.

De wiskundige vertaling van deze randvoorwaarden komt hierop neer dat we op zijn minst van een goede golf functie moeten eisen dat:

1) $\psi(x)$ is een *continue* functie van de plaats x (continuïteitsvoorwaarde);

$$2) \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \text{ (dit heet de normeringsvoorwaarde).}$$

Wat betekent dit nu voor onze eerder gevonden oplossingen?

3.4.4 Verder met oplossen

Omdat ons deeltje niet 'buiten de put' kon komen, hadden we gevonden dat voor de 'randen' van de put moest gelden dat $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Daar moeten de golf functies 'binnen de put', dus onze oplossingen ψ_a en ψ_b in ieder geval continu op aansluiten. Dit betekent dat moet gelden dat:

$$\psi_a(0) = A \cos 2\pi \frac{0}{\lambda} = A$$

en dit kan alleen nul zijn als $A = 0$. En daarmee vervalt deze cosinusfunctie als aanvaardbare oplossing. Voorwaar, een drastische consequentie van onze randvoorwaarden!

Hoe zit het met onze tweede mogelijkheid? (de index b kan nu wel weg!) Daarvoor moet gelden:

$$\psi(0) = B \sin 2\pi \frac{0}{\lambda} = 0$$

en dus is aan de continuïteitsvoorwaarde in het punt $x = 0$ altijd voldaan.

Maar ook moet gelden:

$$\psi(a) = B \sin 2\pi \frac{a}{\lambda} = 0$$

Dit zou kunnen voor $B = 0$, maar dat is geen acceptabele mogelijkheid. Immers, dan zou weer gelden dat $\psi = 0$ voor *alle* x . De enige resterende mogelijkheid is dan ook dat:

$$\sin 2\pi \frac{a}{\lambda} = 0$$

en dit is alleen het geval als:

$$\frac{2\pi a}{\lambda} = n\pi \text{ met } n = 1, 2, 3 \dots$$

en dus:

$$\lambda = \frac{2a}{n} \text{ of } a = n \frac{\lambda}{2}$$

Op de betekenis hiervan gaan we dadelijk uitgebreid in; laten we nu eerst het rekenwerk afmaken. Toepassing van de randvoorwaarden levert kennelijk een voorwaarde op voor de golflengte λ van het deeltje. De mogelijke 'toegelaten' waarden van λ worden behalve door de 'breedte van de put' a ook bepaald door de waarde van een geheel getal n . Dat geeft ons de mogelijkheid de golflengtewaarden te nummeren, volgens λ_n . Hetzelfde geldt dan ook voor de mogelijke golf functies. Immers, substitutie van λ_n in $\psi(x)$ levert:

$$\psi_n(x) = B \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Bij elke waarde van λ gegeven door λ_n hoort dus een golf functie ψ_n (zie fig. 42). Tenslotte geeft de normeringsvoorwaarde voor de golf functies ons de mogelijkheid om de constante B verder uit te rekenen. Dat gaat als volgt:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} B^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= \int_0^a B^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = 1 \end{aligned}$$

Hieruit volgt dan $B = \sqrt{2/a}$, zodat uiteindelijk de volgende functies de oplossingen zijn van de Schrödinger-vergelijking voor een systeem van één deeltje in een oneindig diepe, rechthoekige potentiaalput:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Tot zover het rekenwerk. Laten we nu weer terugkeren tot de 'natuurkunde achter de formules'.

3.4.5 Kunnen we de oplossing begrijpen?

We zijn begonnen met één deeltje in een oneindig diepe potentiaalput. Daarvan wilden we de stationaire toestanden berekenen. Daartoe hadden we een Schrödinger-vergelijking ter beschikking, waar-

van de oplossingen tevens moesten voldoen aan de gegeven randvoorwaarden. En wat bleek toen? Dat er alleen oplossingen mogelijk waren voor zeer bepaalde, discrete waarden van λ . Wat betekent dit nu?

Wel, we hebben een deeltje dat zich steeds heen en weer moet bewegen tussen de grenzen $x = 0$ en $x = a$ van de put. En omdat we alleen stationaire toestanden willen beschouwen, moet het in ieder geval steeds net zo waarschijnlijk zijn dat het deeltje naar rechts als dat het naar links beweegt. Maar vanuit het golfkarakter van het deeltje geredeneerd, betekent dit dat we in zekere zin te maken moeten hebben met zoiets als 'heen en weer gaande golven', die kennelijk op een of andere manier moeten 'samenwerken'!

Een bekende analogie

Bij de aandachtige lezer gaat er nu misschien een lichtje branden. Immers, een 'samenwerking' van heen en weer gaande golven, dat klinkt bekend, dat hebben we toch eerder ook gehad! Laten we daaraan eens even terugdenken. Was het niet zo dat door 'samenwerking', of interferentie, van heen en weer gaande (dus *lopende*) golven een *staande* golf kon worden opgebouwd? Maar zo'n staande

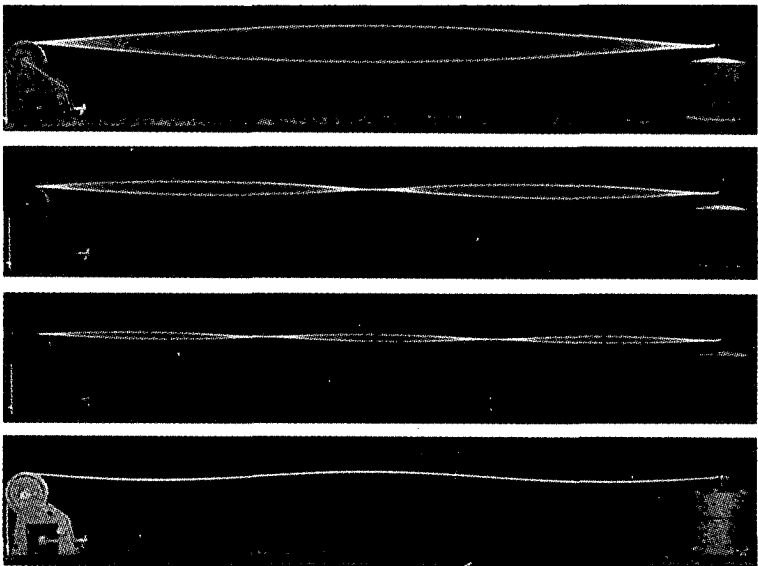


Fig. 43. Staande golven in een snaar, via een tijdopname gefotografeerd. Te zien zijn de golven van $n = 1$, $n = 2$ en $n = 3$.

golf – bijvoorbeeld in een snaar; zie fig. 43 – was alleen blijvend mogelijk wanneer aan een bepaalde 'voorwaarde' was voldaan. Deze luidde: de lengte van de snaar (a) moest gelijk zijn aan een geheel aantal malen (n) de halve golflengte van de staande golf, ofwel: $a = n\lambda/2$. Dus de inperking van de lengte van de snaar tot eindige afmetingen had discrete mogelijke golflengten tot gevolg. Bovendien werden de bijbehorende mogelijke staande trillingstoestanden van de snaar toen beschreven door de 'golffuncties':

$$y(x) = R \sin 2\pi \frac{x}{\lambda} = R \sin \frac{n\pi}{a} x$$

Tot zover deze kleine reis in ons geheugen!

Maar ook een beperkte analogie

De analogie van de snaar met ons deeltje in een put zal nu wel duidelijk zijn. De golffunctie van dit deeltje in een stationaire toestand correspondeert met een 'staande golf'. En staande golven moeten 'passen in de ruimte die ze krijgen'; daarom zijn er alleen bepaalde golfpatronen mogelijk. Echter, hoewel we uit de analogie met de snaar het optreden van discrete golflengtewaarden kunnen begrijpen, moeten we deze analogie toch niet te ver willen doorvoeren. Immers, de betekenis van de golffuncties van deeltjes is totaal anders dan van de golffuncties van snaren. De snaarfuncties geven een werkelijke stand van de snaar in de ruimte aan. Maar de golffunctie van een deeltje ontleent zijn betekenis enkel en alleen aan de waarschijnlijkheidsinterpretatie van $|\psi_n|^2 dx$ (zie fig. 42). $\psi_n(x)$ zelf heeft, het zij nogmaals duidelijk gezegd, geen directe fysische betekenis, want er golft in feite niets, zeker geen deeltje in de ruimte! Het falen van de verdere analogie wordt nog duidelijker wanneer we kijken naar de tijdafhankelijkheid van de staande 'snaar-golf'. Daarvoor gold immers:

$$y(x,t) = R \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \cos \left(\frac{2\pi}{T} t \right)$$

Welnu, deze functie kan natuurlijk nooit een goede kwantummechanische golffunctie van een deeltje zijn. Want dat zou betekenen dat er op regelmatige tijdstippen, nl. als $\cos 2\pi t/T = 0$, ineens helemaal geen deeltje zou zijn, maar op de tussenliggende tijdstippen wel. De oorzaak hiervan ligt juist in het reële karakter van deze tijdsfunctie. Daarvoor moesten in de kwantummechanica immers complexe functies gebruikt worden!

3.4.6 Energiekwantisatie

Laten we nu terugkeren naar de mogelijke waarden van λ . We weten nu 'waarom' deze voor stationaire toestanden alleen beperkt zijn tot: $\lambda = 2a/n$. Wat zijn hiervan de consequenties? Dat zien we onmiddellijk als we met behulp van $\lambda = h/mv$ en $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2$ de totale energie van het deeltje uitrekenen. Hiervoor vinden we dan:

$$E_n = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{h^2}{8ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Het blijkt dus dat er alleen stationaire toestanden mogelijk zijn met zeer bepaalde, discrete energiewaarden! *De energie is gekwantiseerd!* Op zich is dat niet nieuw voor ons, denk maar aan een van de postulaten van Bohr. Maar wat vroeger een postulaat was dat niet verder begrepen kon worden, volgt nu rechtstreeks uit het theoretisch formalisme. We noemen deze mogelijke energiewaarden de *eigenwaarden* van het probleem, terwijl de bijbehorende golffuncties aangeduid worden met de term *eigenfuncties*. Het getal n heet, zoals niemand zal verbazen, een *kwantumgetal*.

3.4.7 Hoe breder, hoe 'vrij'

Het is interessant wat meer aandacht te besteden aan deze energiewaarden. Bijvoorbeeld, wat voor invloed zou het kunnen hebben als we de put steeds breder maken? Het blijkt direct uit de formule voor E_n dat de afstand tussen de energieniveaus dan steeds kleiner wordt. De niveaus komen steeds dichterbij elkaar (zie fig. 44). Daaruit kunnen we al aanvoelen dat tenslotte voor een *volledig vrij* deeltje, d.w.z. $V = 0$ voor *alle* x , de energie niet meer gekwantiseerd zal zijn, maar elke willekeurige positieve waarde kan hebben. En dat klopt ook. Het was immers juist de *beperking van de bewegingsvrijheid* van het deeltje dat de kwantisatie tot gevolg had. Dit is een erg belangrijk resultaat dat – hoewel hier afgeleid voor een beweging in één dimensie – ook geldig zal blijken voor een deeltje in de 'echte' driedimensionale ruimte.

We kunnen deze redenering nu ook omkeren. Stel dat we de energieniveaus kennen, dan kunnen we daaruit de bewegingsvrijheid van het deeltje (putbreedte) afschatten.

Een kern of atoom als 'put'!

Neem bijvoorbeeld als deeltje eens een elektron met $m = m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg en veronderstel dat een elektron dat gebonden is in een atoom, heel ruw vergeleken kan worden met een elektron

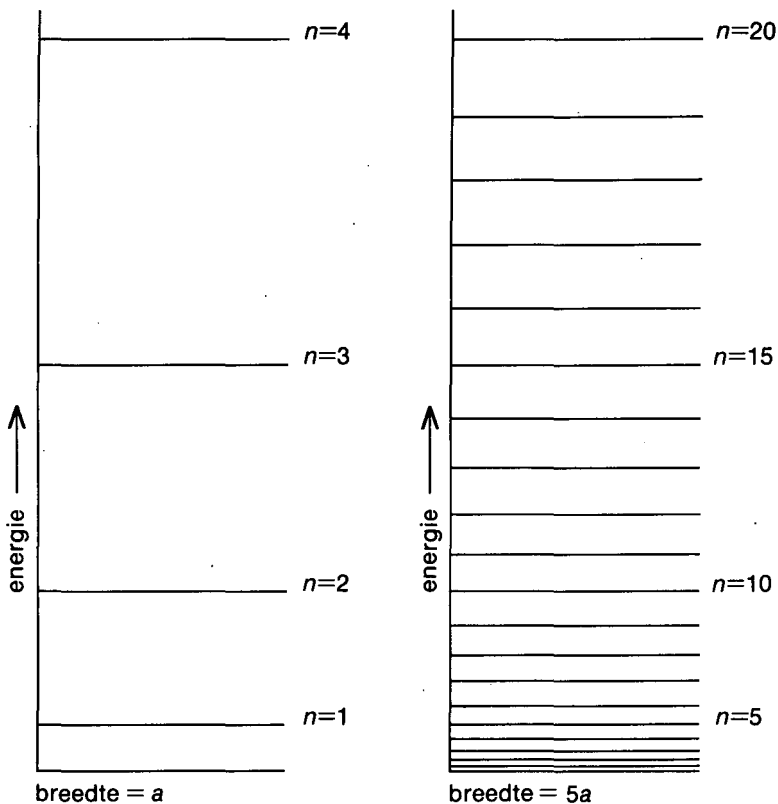


Fig. 44. Hoe breder, hoe 'vrij'. Energieniveaus in een oneindig diepe put met breedte a en met breedte $5a$.

in een put. We weten dat een 'redelijke' waarde voor de excitatie-energie van een valentie-elektron in een atoom gegeven wordt door $E_1 \approx 5 \text{ eV}$. Substitutie van deze waarde in de formule voor E_n geeft dan als ruwe benadering voor de diameter van een atoom een waarde van $a \approx 2 \text{ \AA}$ en dit is juist de goede grootteorde!²⁹ Als we als deeltje een proton met $m = m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$ beschouwen en als 'typische' excitatie-energie in een kern een waarde van $E_1 \approx \leq 2 \text{ MeV}$, dan berekenen we als ruwe waarde voor de diameter van een kern een waarde van $a \approx 4 \times 10^{-4} \text{ \AA}$. Hieruit zien we hoe we met dit natuurlijk erg ruwe putmodel toch al in staat zijn om kwalitatief de grootteorde van een atoom en van een atoomkern te verklaren.

3.4.8 Nulpuntsenergie

Er is nog een interessant aspect aan de formule voor E_n en dat is het optreden van een laagste energiewaarde:

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}$$

die *ongelijk is aan nul!* Dit betekent dat de kinetische energie van een deeltje met beperkte bewegingsvrijheid, of algemener gezegd: de kinetische energie van een deeltje in een gebonden toestand, nooit nul kan zijn. *Het deeltje moet altijd blijven bewegen*, ook zelfs wanneer de 'temperatuur van het deeltje' gelijk zou zijn aan het absolute nulpunt. Deze minimaal mogelijke energiewaarde wordt dan ook wel de *nulpuntsenergie* genoemd. Trouwens, we kunnen de noodzaak van deze nulpuntsenergie ook 'begrijpen' als we de onzekerheidsrelatie van Heisenberg te hulp roepen. Immers, als we van het deeltje alleen weten dat het 'ergens' in de put zit, dan is zijn plaats bekend met een onzekerheid van $\Delta x = a$. En de impuls dus met een onzekerheid $\Delta p > h/a$. Maar dat betekent dat de kinetische energie niet veel kleiner mag worden dan $h^2/2ma^2$ anders zou dit in strijd zijn met de onzekerheidsrelaties. Zoals we zien is dit juist van dezelfde grootte-orde als de waarde van E_1 . Maar als een ruimtelijk gebonden deeltje dan nooit tot rust kan komen, hoe kan dit boek dan stil liggen op tafel?

Een interessante vraag! Neem bijvoorbeeld eens een macroscopisch deeltje met massa $m = 0,1$ kg dat moet bewegen in een buis van 1 m lengte. Dan volgt uit $E_1 = \frac{1}{2}mv^2 = h^2/8ma^2$ dat de minimale snelheid van dit deeltje gelijk is aan: $v = 3,3 \times 10^{-33}$ m/s. Ofwel: het beweegt in ieder geval één keer van het ene eind van de buis naar het andere eind in 10^{23} jaar! Het 'lijkt dus net' of het stil ligt!

3.4.9 Nogmaals de golffuncties

Ik wil nu nog iets meer zeggen over de golffuncties en hun betekenis. In fig. 42 zijn enkele van deze golffuncties getekend. We zien daaruit dat het kwantumgetal n juist gelijk is aan het aantal 'buiken' in de golffunctie. De betekenis van de golffunctie wordt ook nog eens gedemonstreerd in fig. 42 en fig. 45 waarin de vorm van $|\psi_n|^2$ is uitgezet. We zien hieruit direct op welke plaatsen de waarschijnlijkheid het grootst is om het deeltje aan te treffen, en ook zien we zelfs dat er plaatsen zijn waar we het deeltje nooit zullen aantreffen. Dit wekt misschien de indruk van een merkwaardige paradox. Het deeltje kan in de ene buik worden aangetroffen of in een andere. Maar hoe kan het deeltje, als het zich bijvoorbeeld in de toestand ψ_2

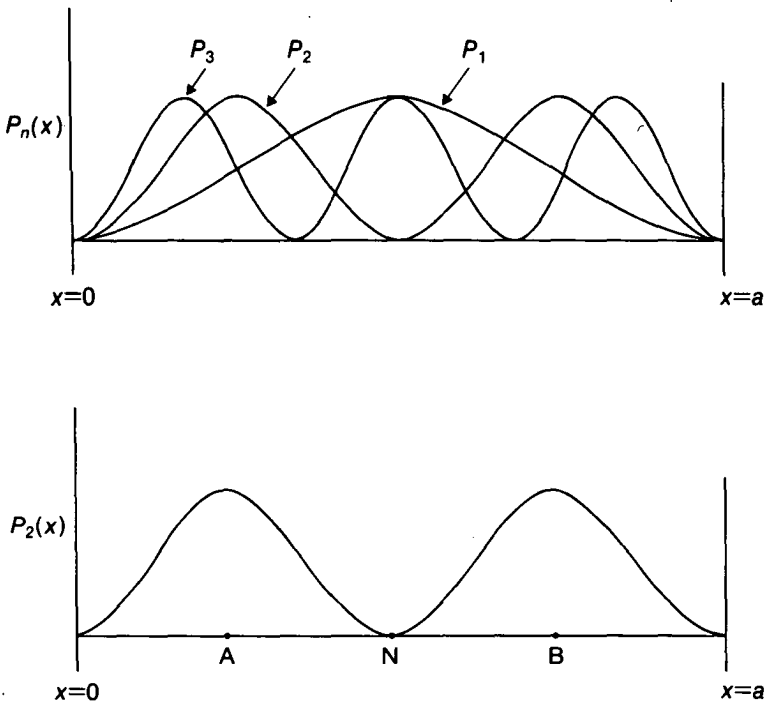


Fig. 45. Hoe komt het deeltje van A naar B.

bevindt, van de ene buik (A) in de andere (B) komen als het daarbij een punt N moet passeren waar het zeker nooit kan worden aange-
troffen (zie fig. 45). Dit lijkt een goede vraag, maar het is het niet.
Immers, wil deze vraag zinvol zijn, dan moet ze een duidelijke
natuurkundige betekenis hebben. Dus zou het in dit geval natuur-
kundige betekenis moeten hebben om te spreken van een deeltje dat,
in de toestand ψ_2 , een bepaalde weg A-N-B aflegt. Maar 'natuur-
kundige betekenis' voor een uitspraak in de kwantummechanica
betekent dat zo'n uitspraak *waarneembare gevolgen* met zich mee
moet brengen. We moeten ons dus afvragen: 'Als een deeltje zich in
de toestand ψ_2 bevindt, kan zijn voortgang langs de baan A-N-B, en
in het bijzonder de doorgang door het punt N, ook worden *waarge-
nomen*?' Want alleen dan is het zinvol om te zeggen dat het deeltje
van A via N naar B gaat! Het antwoord hierop is heel duidelijk: nee!
Immers, een deeltje kan nergens, op geen enkel punt, worden waarge-
nomen zonder dat deze waarneming zelf de toestand van het
deeltje *op onbekende wijze* verstoort.

Een simpele afschatting kan dit verduidelijken. Stel we meten de plaats

van het deeltje in het punt A met een onzekerheid gegeven door 0,01 a. Maar dat betekent, vanwege de onzekerheidsrelatie, dat als gevolg van deze meting de E_{kin} van dit deeltje daarna onzeker is met een orde van grootte gegeven door:

$$\Delta E_{\text{kin}} \approx 10^4 \frac{h^2}{2ma^2}$$

En binnen dat onzekerheidsgebied liggen heel wat mogelijke energieniveaus E_n !

Voor de meting werd de toestand van het deeltje beschreven door ψ_2 , maar na de meting weten we niet meer in welke toestand het deeltje zit. Het zou bijvoorbeeld best in een toestand kunnen zijn geraakt waarin het juist uitermate waarschijnlijk is het deeltje op de plaats N aan te treffen! We moeten dus concluderen dat, als een deeltje zich in een stationaire toestand bevindt, we zo'n deeltje in die toestand niet kunnen 'volgen'. Dat onttrekt zich aan onze waarnemingsmogelijkheden en daardoor verliest de vraag ernaar haar natuurkundige betekenis.

We zien hieruit hoe onze theorie precies in overeenstemming is met de experimenten. Ze beschrijft niet meer, maar ook niet minder. De golf functie zegt alleen hoe groot de waarschijnlijkheid is om het deeltje op een bepaalde plaats aan te treffen, maar niets over de vraag hoe het daar komt. Als je dat toch wilt weten, dan moet je het meten. Maar juist daardoor wordt de golf functie die je had, onvoorspelbaar 'beschadigd'. Dit is precies de theoretische achtergrond van wat we eerder in ons tweespletenexperiment hebben waargenomen. Het interferentiepatroon op het scherm gaf de waarschijnlijkheid dat het elektron daar aankwam. En als je wou weten hoe, dan moest je dat meten en juist als gevolg daarvan verdween het interferentiepatroon.

3.4.10 Correspondentieprincipe

Laten we nog eens preciezer naar $|\psi_1|^2$ kijken. Eigenlijk is de vorm hiervan best merkwaardig. Deze vorm zegt namelijk dat we het deeltje verreweg het meest waarschijnlijk in het midden zullen aantreffen en veel minder waarschijnlijk aan de randen. Voor ons 'klassieke' gevoel doet dit merkwaardig aan. Immers, het deeltje kan *vrij* bewegen binnen de *gehele* put, dus dan verwacht je toch dat het *overall in de put* even waarschijnlijk kan worden aangetroffen? Maar ons 'klassieke' gevoel blijkt ook hier weer geen goede raadgever te zijn.

Echter, die situatie lijkt te veranderen als we kijken naar golf functies voor grotere n -waarden. Zo is bijvoorbeeld in fig. 46 $|\psi_{25}|^2$ uitgezet.

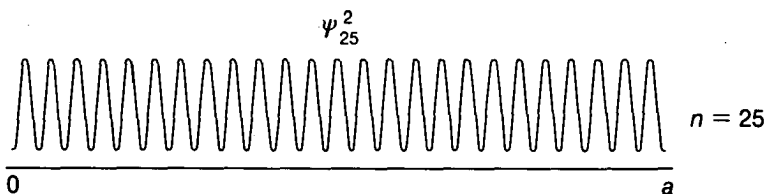


Fig. 46. De waarschijnlijkheidsverdeling voor $n = 25$.

Hier zien we 25 ‘buiken’ gelijkmatig verspreid over de gehele putbreedte, dus dit lijkt al heel wat meer op onze klassieke verwachtingen. Dit doet het vermoeden rijzen dat naarmate het kwantumgetal groter is, de klassieke situatie beter benaderd wordt. Dit vermoeden is inderdaad juist en heeft zelfs, in algemener verband, een duidelijke rol gespeeld bij de ontwikkeling van de kwantummechanica. Het staat bekend als het *correspondentieprincipe van Bohr*. Het geeft aan, zou je kunnen zeggen, dat de klassieke natuurkunde en de kwantummechanica niet twee werelden beschrijven die niets met elkaar te maken hebben, maar veel meer dat de klassieke natuurkunde een limiet of grensgeval is van de kwantummechanica, en wel de ‘limiet voor grote kwantumgetallen’.

Een getallenvoorbeeld moge dit illustreren. Stel bijvoorbeeld eens dat een elektron met een energie van 100 eV is opgesloten in een put met breedte $a = 1$ cm. Dan berekenen we met behulp van de formule voor E_n dat in dit geval n de waarde $n = 1,6 \times 10^8$ heeft. Dat wil dus zeggen dat $|\psi_n|^2$ over een afstand van 1 cm $1,6 \times 10^8$ ‘buiken’ heeft. Maar er is geen enkele macroscopische detector die de plaats van het deeltje nauwkeurig genoeg kan bepalen om deze buiken nog te kunnen onderscheiden. We meten voor dit geval dus gewoon een constante waarschijnlijkheid om het deeltje waar dan ook binnen de put aan te treffen. Kortom, voor dit geval waarbij macroscopische afmetingen in het geding zijn, meten we inderdaad wat we klassiek zouden verwachten!

3.4.11 De kleuren om ons heen

Voordat we nu de theorie verder uitbreiden, wil ik eerst nog een toepassing van de puttheorie behandelen. Want dat is toch wel een nadeel van een oneindig diepe put, dat het zo’n onwerkelijk systeem lijkt dat beschreven wordt. Komt zo’n put ooit in werkelijkheid voor, vraag je je af.

Welnu, door deze toepassing zul je zien dat we, zelfs met zo’n geconstrueerd iets als een ‘oneindig diepe put’ toch in staat zijn om ook de werkelijkheid beter te begrijpen. En het aardige van deze toepassing is wel dat ze zo nauw verweven is met het leven van alledag. Het gaat over

de kleuren om ons heen of, pathetischer gezegd, om de 'schoonheid van de natuur'! Hoe kunnen we het ontstaan van kleuren begrijpen?

Zoals bekend, ontstaan kleuren door selectieve absorptie van zichtbaar licht. Maar welke atomen of moleculen kunnen dit? De energie van fotonen in het zichtbare gebied ligt ruwweg tussen de 1,5 en 3 eV. Verreweg de meeste atomen en moleculen hebben echter in dat gebied geen absorptiemogelijkheden, zodat ze ook geen kleur kunnen hebben. Maar gelukkig is er een grote groep vrij ingewikkelde organische moleculen waarvoor dit anders is, die dan ook bekend staan onder de naam: kleurstoffen of 'dyes'. Het gemeenschappelijke wezenskenmerk van deze kleurstoffen bestaat hieruit dat ze allemaal een lange open of gesloten keten hebben van 'geconjugeerde dubbele bindingen'. In fig. 47 is het structuurschema van zo'n serie moleculen weergegeven. Deze serie ontstaat doordat de lengte van deze geconjugeerde bindingsketen gevarieerd kan worden. Dit wordt aangegeven door de letter l , die de waarde: 0, 1, 2, 3 enz. kan aannemen.

De keten waar het hier om gaat, is het rechte middenstuk, inclusief de 2N-atomen (genummerd 1 t/m 7, voor $l = 1$). Uit de scheikunde weten we dat de π -elektronen die deze geconjugeerde dubbele bindingen opbouwen, betrekkelijk los gebonden zijn en derhalve praktisch vrij kunnen bewegen langs de hele keten. Dit gegeven is nu uiterst belangrijk om de kleureigenschappen van het molecuul te kunnen begrijpen. Het betekent namelijk dat we het molecuul voor het begrijpen van deze kleureigenschappen, goed kunnen benaderen door het volgende model. Dit model zegt dat de π -elektronen vrij kunnen bewegen in een eendimensionale, oneindig diepe put waarvan de breedte overeenkomt met de lengte van de keten geconjugeerde dubbele bindingen. Maar dat betekent dat we onze puttheorie precies kunnen toepassen op deze modelsituatie, als we maar voor de putbreedte a de ketenlengte invullen. En als we de energieniveaus kennen, kunnen we ook uitrekenen welke de langste licht-golflengte is die geabsorbeerd kan worden. Dit levert een interessant resultaat op.

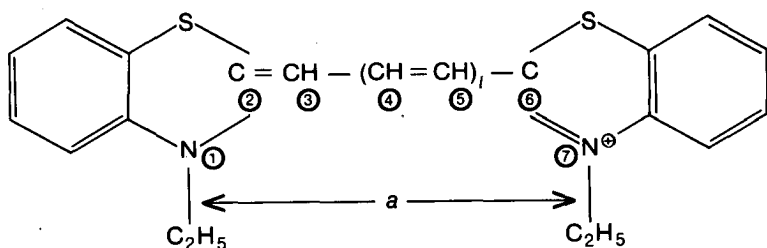


Fig. 47. Schematische weergave van de structuur van organische kleurstoffen.

Onderstaande tabel geeft hiervan een overzicht. Daarin staan, behalve de ketenlengte en de met dit model berekende waarden van de absorptiegolflengten, ook de in werkelijkheid gemeten waarden.

<i>l</i>	<i>a</i> (nm)	berekende λ (nm)	gemeten λ (nm)	kleur
0	0,9	390	420	geel
1	1,2	520	550	rood
2	1,5	650	650	blauw
3	1,8	770	760	groen
4	2,1	900	870	–
5	2,4	1030	995	–

Allereerst blijkt uit deze tabel dat het ruwe putmodel verrassend nauwkeurige resultaten oplevert. De mogelijke staande-golffpatronen van de elektronen langs de keten zijn direct gekoppeld met de kleur van het molecuul. We zien hieruit dat naarmate de ketenlengte toeneemt, ofwel naarmate de ‘speelruimte’ van de elektronen groter wordt, de geabsorbeerde golflengte toeneemt.

De diameter van atomen en kleine moleculen is praktisch altijd kleiner dan 1 nm (10 Å) en dus moeten hun absorptiegolflengten in het algemeen wel in het ultraviolet liggen (zie tabel). En dus zijn ze bijna altijd kleurloos. De ‘levende kleuren’ in de natuur zijn voor het grootste deel te danken aan grote organische moleculen. Als die ontbreken – zoals op de maan, of op Mars – wordt het maar een saaie grauwe bedoening. Dat is de les die het eenvoudige, ‘pathologische’ putmodel ons al kan leren!

3.4.12 De eindige put en haar toestanden

a. Het systeem

Ondanks dit succes van het oneindige-putmodel, laat het zich wel raden dat we daar voor een meer gedetailleerde beschrijving van atomen en moleculen niet mee kunnen volstaan. Dat blijkt bijvoorbeeld al direct als we bedenken dat diezelfde kleurstofmoleculen waar we het net over hadden, niet enkele geïsoleerde lijnen uit het totale spectrum absorberen, maar hele gebieden, absorptiebanden genaamd. De oneindig diepe put verklaart wel de plaats van het maximum van deze banden, maar ze kan met de banden zelf verder niets beginnen. We zullen dus de theorie verder moeten uitbreiden. Laten we om te beginnen de ‘muren’ van de put maar eens laten zakken en kijken naar de stationaire toestanden en golffuncties van een *eindig* diepe put.

Let wel dat een deeltje waarvan de potentiële energie door deze ‘eindig diepe put’-functie beschreven wordt, zich nog steeds uitslui-

tend eendimensionaal over een bepaalde afstand kan bewegen. Alleen, deze afstand is nu niet meer noodzakelijkerwijs beperkt tot de putbreedte.

Het gaat er dus weer om de Schrödinger-vergelijking op te lossen, maar nu met deze potentiële-energiefunctie. De mogelijke oplossingen moeten uiteraard ook weer voldoen aan de randvoorwaarden. Het uitrekenen hiervan is nu al heel wat ingewikkelder dan in het 'oneindig diepe' geval. Dat is dan ook de reden dat ik daar niet uitgebreid op in wil gaan, maar me wil beperken tot de bespreking van de eindresultaten. Want dat is uiteindelijk waar het op aankomt!

b. Energiewaarden en golffuncties

Laten we ons eerst eens afvragen wat we verwachten van het energiespectrum dat wil zeggen van de mogelijke energiewaarden van de eindig diepe put. Als we letten op de vorm van de potentiële-energiefunctie, dan zijn er duidelijk twee gevallen te onderscheiden. Voor $E < V_0$ wordt het deeltje in zijn bewegingsvrijheid beperkt door de 'wanden van de put'. Het deeltje is dan gebonden in de put, dus in het gebied $0 < x < a$, en we verwachten derhalve een serie discrete energieniveaus zolang $E < V_0$. Echter, wanneer $E > V_0$, is

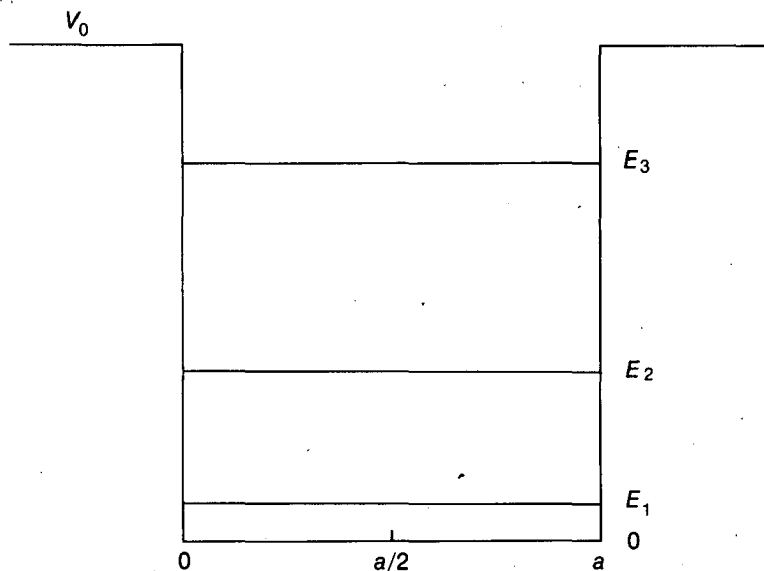


Fig. 48. Een rechthoekige, eindig diepe potentiaalput waarin drie mogelijke gebonden energietoestanden zijn getekend. Het continue spectrum voor $E > V_0$ is niet getekend.

het deeltje vrij om te bewegen langs de hele x -as. Dit moet dan wel resulteren in een continu energiespectrum.

Welnu, deze verwachtingen blijken precies met de berekeningen overeen te stemmen, zoals te zien is in fig. 48. 'In de put' zijn weer alleen stationaire toestanden mogelijk voor enkele scherp bepaalde discrete energiewaarden. Andere energiewaarden kan het deeltje dan niet aannemen. Dit volgt weer direct uit de oplossingsprocedure van de Schrödinger-vergelijking.

Hoe zien nu de golffuncties eruit? Allereerst valt daarover op te merken dat nu niet meer hoeft te gelden dat $\psi = 0$ voor $x \geq a$ en $x \leq 0$, zelfs niet als $E < V_0$! Dat lijkt merkwaardig. Immers, als $E < V_0$, dan betekent dit dat $E - V_0 = E_{\text{kin}} < 0$ en dat kan toch nooit! Inderdaad, klassiek gesproken kan een deeltje nooit daar komen waar $E_{\text{kin}} < 0$, maar kwantummechanisch ligt dat wat genuanceerder. Hiermee hebben we weer een van die eigenaardigheden te pakken die deze theorie zo vreemd maken. Immers, als we wat preciezer naar de Schrödinger-vergelijking kijken, dan zien we dat bijvoorbeeld de functie:

$$e^{\pm k_1 x}$$

met:

$$k_1^2 = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V_0)$$

wel degelijk een oplossing is van deze vergelijking als $x \geq a$, dus als $E < V_0$! Maar dat betekent dat de kwantummechanica niet uitsluit dat een deeltje ergens kan worden aangetroffen waar het klassiek nooit zou kunnen komen! En dat is dan ook zo! Je zou je af kunnen vragen of dat geen problemen oplevert. Dan moet je echter wel bedenken wat het precies betekent dat het 'ergens kan worden aangetroffen'. Dat wil zeggen dat het *daar* kan worden *gemeten*, maar de *plaats* nauwkeurig meten wil zeggen dat je de impuls, en dus de energie niet nauwkeurig kent, en dus ...!

Fig. 49 laat zien hoe deze golffuncties, de 'staande-golffpatronen', er uiteindelijk uit komen te zien. In de put lijken ze, zoals we ook mochten verwachten, veel op de golffuncties van de oneindig diepe put. Het zijn 'sinusachtige' functies, dat wel, maar toch afwijkend van de simpele sinusvorm omdat ze aan de rand van de put *continu* en *vloeiend* moeten overgaan in een *dalende* e -macht die de oplossing vormt buiten de put. Want continuïteit was immers een van de randvoorwaarden! Dat deze e -macht dalend moet zijn en niet stijgend, is ook eenvoudig in te zien. Immers, een stijgende e -macht zou nooit kunnen voldoen aan de eis dat:

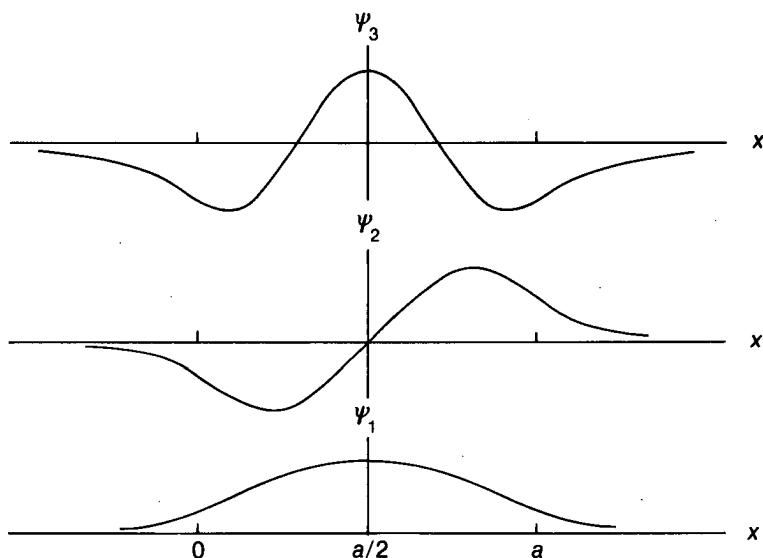


Fig. 49. De drie eigenfuncties die horen bij de energiewaarden van de gebonden toestanden in de eindige put van fig. 48.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

en dat was juist de andere randvoorwaarde. Het is deze normeringsvoorwaarde die dus eigenlijk eist dat de golffunctie slechts in een bepaald gebied noemenswaard van nul mag verschillen. Ofwel: het is juist deze normeringsvoorwaarde die uitdrukt dat de 'bewegingsvrijheid' van het deeltje in een gebonden toestand noodzakelijkerwijs beperkt moet zijn. Maar een 'beperkte bewegingsvrijheid' hadden we ook gebruikt als argument om te beredeneren dat de energie gekwantiseerd moest zijn. Dus moet de normeringsvoorwaarde ook de wiskundige achtergrond zijn van het optreden van discrete energiewaarden! Dit zien we nog eens duidelijk gedemonstreerd in fig. 50.

Daarmee hebben we de voor ons belangrijkste uitkomsten van de 'eindig diepe put' besproken. Wat moeten we daarvan nu onthouden?

Om te onthouden

Natuurlijk allereerst dat er een Schrödinger-vergelijking bestaat, waarvan de stationaire oplossingen, statistisch geïnterpreteerd, corresponderen met de gebonden toestanden van een systeem. Ook dat

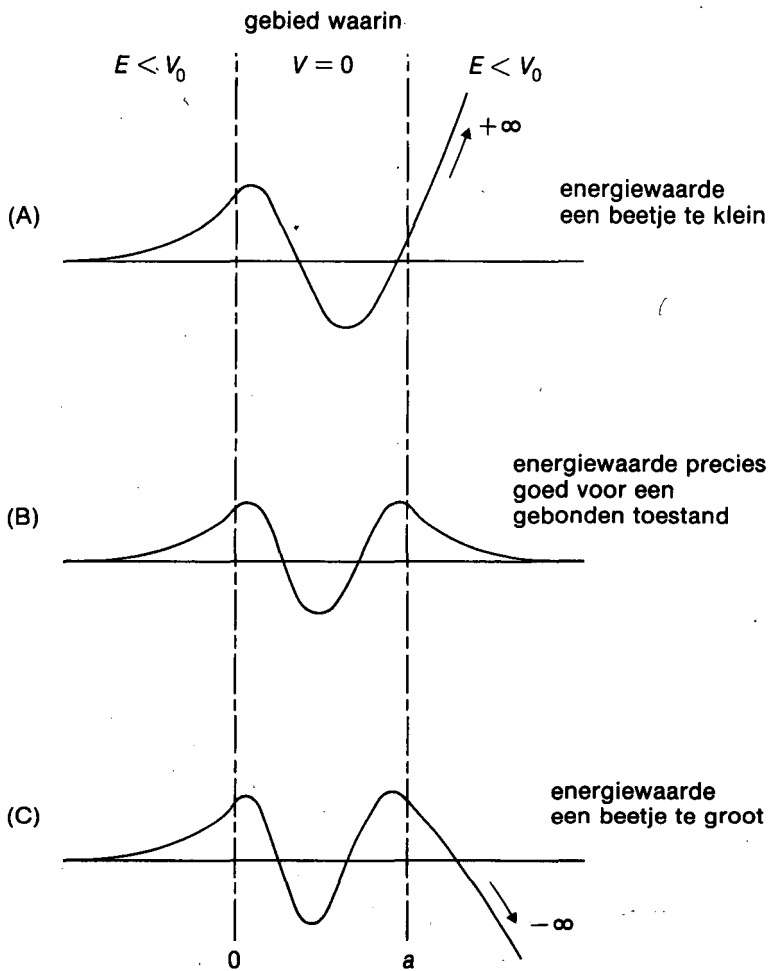


Fig. 50. In deze figuur is getekend hoe de normeringseis die aan de golf functies wordt opgelegd, tot gevolg heeft dat het deeltje slechts zeer bepaalde energiewaarden kan aannemen.

de normeringsvoorwaarde, samenhangend met de 'beperkte bewegingsvrijheid' van het systeem, tot gevolg heeft dat uit een heel scala van mogelijke oplossingen alleen die met zeer bepaalde energiewaarden worden uitgeleerd als toegelaten fysisch zinvolle oplossingen. Dit resulteert dus in energiekwantisatie. En verder het kwalitatief 'golfachtige' gedrag van de stationaire toestandsfuncties in een 'klassiek toegelaten gebied', alsmede het asymptotische afnemen

A theory of ghosts

D A WRIGHT

It should be stated at the outset that this is a paper on physics, not metaphysics. Many physicists have turned to pseudo-philosophy, metaphysics or parapsychology, but not the writer; at least not yet.

It is well known that ghosts can penetrate closed doors and internal walls of buildings up to four inches or so (0.1 m) in thickness. There is some evidence however that they remain confined when present in old buildings with external wall thickness of a foot or more. According to the elementary ideas of wave mechanics (Schrödinger 1928, de Broglie and Brillouin 1928) this establishes them as objects whose associated wave functions decrease to $1/2.7$ of their full amplitude at about 0.1 m from their boundary. Their wavelength is therefore of this order of magnitude and their mass at low velocity must be less than that of the electron by a factor of the order of 10^{16} , that is it must be about 10^{-46} kg.

Evidently an object of such low mass can be accelerated to high velocity with very little expenditure of energy. Relativistic effects must therefore be considered when dealing with its motion (Einstein 1905) and it will be understood that velocities such as the escape velocity from the earth's gravitational field can readily be attained. The latter velocity is 25000 mph, or 10 km s^{-1} , independent of the mass of the object (Newton 1687). The energy required is only 10^{-38} J. A breath of wind will therefore more than suffice to start the ghost on a journey through the solar system, while minor interactions en route could eject it from the solar system on the way to the stars. The

Fig. 51. Dus daar hoeven we ook niet meer bang voor te zijn!

van de golffunctie in een 'klassiek verboden gebied'.

Dit is de basiskennis van het kwantummechanisch formalisme, die we nodig hebben. In de rest van dit verhaal zullen we dit proberen toe te passen op een aantal zeer verschillende systemen. Op die manier hoop ik dan iets duidelijk te kunnen maken van het toepasingsgebied van deze theorie.

4. Korreltjes van de oogst

*'Grant, oh God, Thy benedictions
On my theory's predictions
Lest the facts, when verified,
Show Thy servant to have lied.'*³⁰

4.1. Inleiding

De bedoeling van dit hoofdstuk is om door middel van een aantal voorbeelden te laten zien hoe de kwantummechanische principes uit de voorgaande hoofdstukken de stenen vormen die leiden tot een beter begrip van het bouwwerk der natuur. Natuurlijk kan deze bespreking niet meer beslaan dan een fractie van het totaal. Of, zoals de titel van dit hoofdstuk al zegt: slechts enkele korreltjes van de hele oogst! Toch zullen we, naar ik hoop, ons op grond van deze korrel-

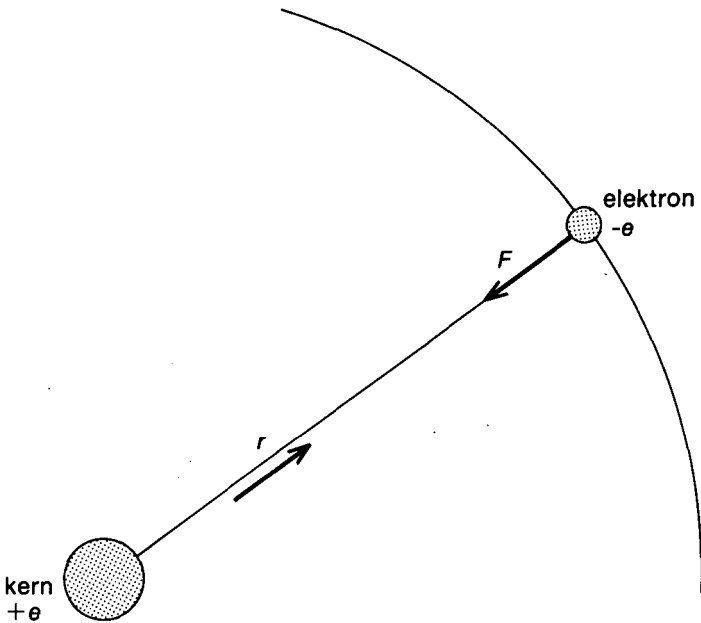


Fig. 52. Het elektron op afstand r van de kern.

tjes een beeld kunnen vormen van wat de oogst te bieden heeft.

Wat komt er dan in dit hoofdstuk aan de orde? Allereerst wil ik aandacht besteden aan de kwantummechanische kijk op de atoombouw. Wel zal dit zich hoofdzakelijk beperken tot een kwalitatieve indruk van het H-atoom, en maar weinig zal gezegd worden over alle andere atomen. Daarna kunnen we twee kanten uit. Enerzijds kunnen we gaan kijken naar de atoom-*kern*, maar anderzijds kunnen we ons ook afvragen hoe atomen zich kunnen verenigen tot *moleculen*. We kiezen voor het laatste.

Kunnen we, als volgende stap, misschien ook al iets begrijpen van het hoe en waarom van vaste stoffen? Om tenslotte dit hoofdstuk te besluiten met een beschouwing over de 'kwantumladder'. Een discussie die niet alleen een antwoord geeft op de al in hoofdstuk 1 gestelde vraag naar de 'identiteit' van een atoom, maar tevens op de vraag naar de stabiliteit, de 'bestaanszekerheid', van alle materie. Het antwoord blijkt eigenlijk verrassend eenvoudig te zijn, mits we de uitgangspunten van de kwantummechanica maar accepteren. Misschien dat de nu te bespreken voorbeelden dat wat kunnen vergemakkelijken.

4.2. Het H-atoom

4.2.1 Probleem in drie dimensies

Als eerste te behandelen 'echte' systeem kiezen we voor het samenspel van een proton en een elektron: het waterstofatoom. Het proton denken we ons in de oorsprong van het coördinatenstelsel, terwijl het elektron daar omheen kan bewegen onder invloed van de aantrekkende Coulomb-kracht (zie fig. 52). Dit systeem wijkt sterk af van onze eerdere 'putdeeltjes', omdat we hier te maken hebben met een beweging in drie dimensies. We moeten dus eigenlijk een Schrödinger-vergelijking voor drie dimensies opschrijven³¹, daarin de potentiële energie van het elektron in het veld van het proton substitueren en dan de vergelijking oplossen! Maar helaas, zo'n procedure gaat de wiskundige mogelijkheden in dit boek ver te boven. We zullen dan ook moeten volstaan met een kwalitatieve bespreking van de belangrijkste uitkomsten. Deze beperking is echter niet desastreus, naar ik hoop. Ons doel, een beeld van het kwantummechanisch denken over de atoombouw, ligt nog steeds binnen ons bereik.

4.2.2 Bolsymmetrie

We weten dat de potentiële energie van het elektron in het veld van het proton gegeven wordt door:

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

waarbij ϵ_0 de diëlektrische constante in vacuüm voorstelt en r de grootte van de afstand tussen het proton en het elektron. In fig. 53 is het verloop van deze $V(r)$ als functie van r getekend.

Er is een aspect aan $V(r)$ dat onze bijzondere aandacht verdient. Uit de formule voor $V(r)$ blijkt dat de *waarde* van $V(r)$ alleen afhangt van de *grootte* van r en niet van de *richting* van r . Maar dat betekent dan dat $V(r)$ *dezelfde* constante waarde heeft op het hele *boloppervlak* met straal r . We zeggen dan ook dat $V(r)$ een *bolsymmetrische functie* is! Het belangrijke hiervan is dat we er handig gebruik van kunnen maken voor de oplossing van ons H-probleem. Zo'n bolsymmetrie suggereert namelijk dat het mogelijk zou kunnen zijn ons probleem in *twee* stukken te splitsen.

- Het *eerste* stuk gaat dan alleen over de *grootte* van r . Deze grootte van r zal natuurlijk vooral bepaald worden door de radiaal gerichte Coulomb-kracht. Dat wordt tot uitdrukking gebracht door de in-

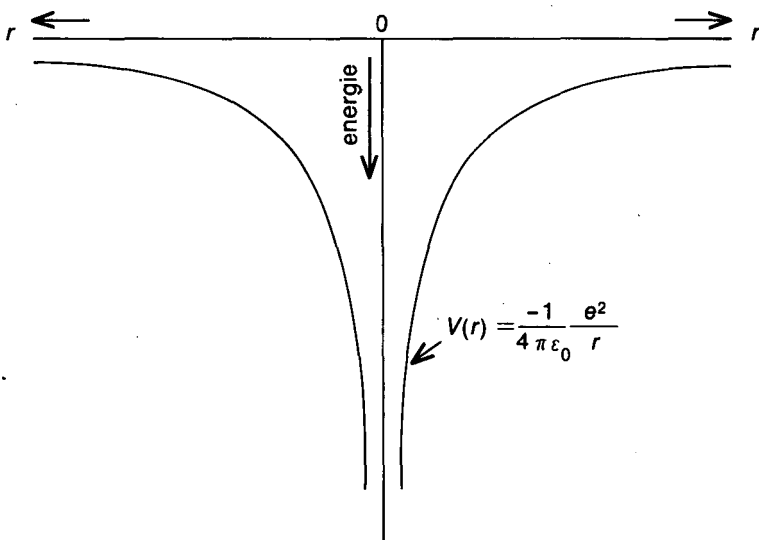


Fig. 53. Het verloop van de potentiële energie $V(r)$; r is de afstand tot de kern.

vloed van $V(r)$ in rekening te brengen in de Schrödinger-vergelijking. Immers, zoals bekend, hangt de grootte van $V(r)$ direct samen met sterkte van de Coulomb-kracht op afstand r . Het deel van de golf functie dat te maken heeft met de grootte van r , zal dus informatie moeten geven over de *waarschijnlijkheid het elektron op een bepaalde afstand, r , van de kern aan te treffen*. Dit eerste stuk van ons probleem hangt dus slechts van één variabele, r , af. Daarmee is het, wiskundig gezien, een eendimensionaal probleem geworden.

● Het *tweede* stuk gaat over de vraag *waar* bij een bepaalde grootte van r , het elektron zich nog op het daarbij behorende *boloppervlak* kan bevinden. Het gaat hier om de verdeling over een *oppervlak*, dus om een tweedimensionaal probleem. Immers, bij een vaste waarde van r kunnen we de plaats op het boloppervlak vastleggen door de grootte van twee hoeken, θ en ϕ , te bepalen (zie fig. 54).

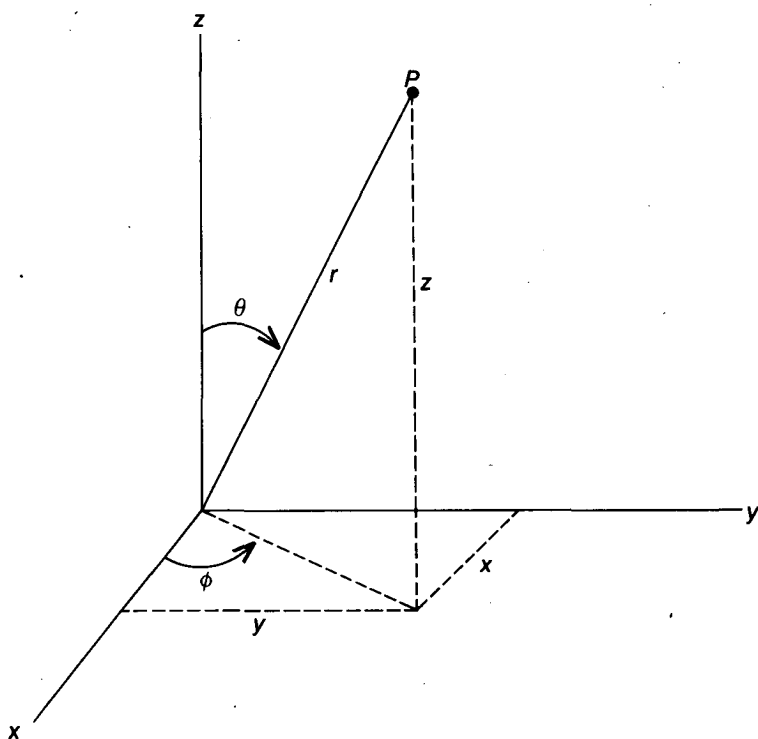


Fig. 54. De plaats van het elektron in bolcoördinaten; r kan alle waarden tussen nul en oneindig aannemen; voor de hoeken θ en ϕ geldt; $0 \leq \theta < \pi$ en $0 \leq \phi < 2\pi$. Dus bij een vaste waarde van r doorloopt het punt P een boloppervlak als θ en ϕ variëren.

Als we dan tenslotte beide deelproblemen weer combineren, geeft deze combinatie ons de gewenste kennis omtrent het reële, driedimensionale H-atoom. Op die manier maakt de bolsymmetrie van $V(r)$ het ons dus toch nog relatief gemakkelijk! Dank zij deze bolsymmetrie is de Schrödinger-vergelijking voor het H-atoom inderdaad exact oplosbaar. Zij het dan ook met nog steeds veel wiskundige moeite.

4.2.3 De energieniveaus

Een deel van de oplossing van de Schrödinger-vergelijking is getekend in fig. 55. Dat zijn de verschillende mogelijke energieniveaus. Er zijn kennelijk weer alleen stationaire toestanden mogelijk voor een aantal scherp bepaalde, discrete energiewaarden. Dit volgt rechtstreeks uit de oplossingsprocedure, maar we kunnen nu ook 'aanvoelen' waarom dat zo moet zijn.

Immers, het H-atoom zou je ruw gedacht kunnen opvatten als een elektron dat 'gevangen zit' in een driedimensionale 'Coulomb-put'. Een soort 'ballon' dus, waarvan de grootte echter niet constant is, maar afhankelijk van de totale energie van het elektron. En in deze

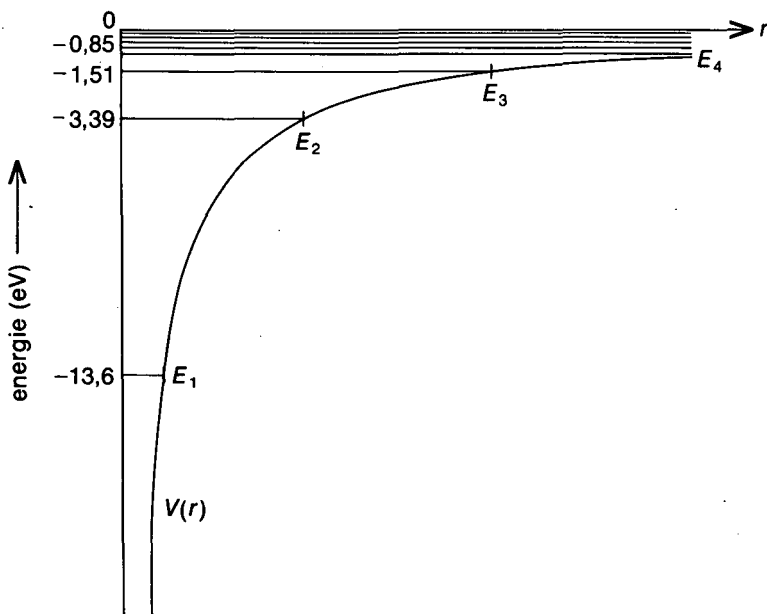


Fig. 55. De gekwantiseerde energiewaarden in de Coulomb-put van het H-atoom.

'ballon' moeten weer 'staande-golfpatronen' passen die ook moeten voldoen aan de randvoorwaarden. Welnu, dat zal dan wel weer alleen mogelijk zijn voor bepaalde golflengten, dus bij bepaalde energiewaarden. En de afnemende afstand tussen de energieniveaus, zal wel weer iets te maken hebben met de sterk toenemende 'bewegingsvrijheid' van het elektron bij hogere energie!

4.2.4 De grondtoestand

Toch is er aan deze energieniveaus ook een aspect dat ons wél zorgen kan baren. Waarom ligt het grondniveau op 'eindige diepte'? Of, anders geformuleerd, waarom slaagt de Coulomb-kracht er niet gewoon in om het elektron tenslotte op de kern te laten vallen? De achtergrond hiervan is nauw verwant aan wat we eerder hebben gezegd over het grondniveau in de oneindig diepe rechthoekige put. Dat had te maken met de nulpuntsenergie en die volgde weer uit de onzekerheidsrelaties. Zo ook hier, zoals al uit een ruwe afschatting kan blijken. We schrijven de onzekerheidsrelatie voor deze situatie nu als:

$$\Delta r \Delta v \gtrsim \frac{h}{m}$$

Nemen we nu als schatting voor Δr de straal r van het gebied waarbinnen het elektron zich op een gegeven moment bevindt, dan hoort daarbij kennelijk een minimale onzekerheid in de snelheid, gegeven door $\Delta v \gtrsim h/rm$. Deze onzekerheid weerspiegelt ook het feit dat de snelheid elke willekeurige richting kan hebben, zodat de snelheid in een bepaalde richting kan variëren tussen $-v$ en $+v$. We kunnen dus ook bij benadering stellen dat $\Delta v \approx v$ en dus ook $v \gtrsim h/rm$. Dus hoe kleiner de straal r wordt, hoe groter *noodzakelijkerwijs* de snelheid van het elektron. En dus ook hoe groter de kinetische energie, omdat:

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m v^2 \gtrsim \frac{1}{2} \frac{h^2}{r^2 m}$$

Maar waarom zou de straal r eigenlijk kleiner willen worden? Wel, daarvoor is nu net de Coulomb-kracht verantwoordelijk. Die trekt het elektron naar binnen, waarbij er potentiële energie vrijkomt, omdat immers:

$$E_{\text{pot}} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

En die vrijkomende potentiële energie kan dus netjes worden omgezet in kinetische energie. Maar daar zit nu net het probleem. Zo

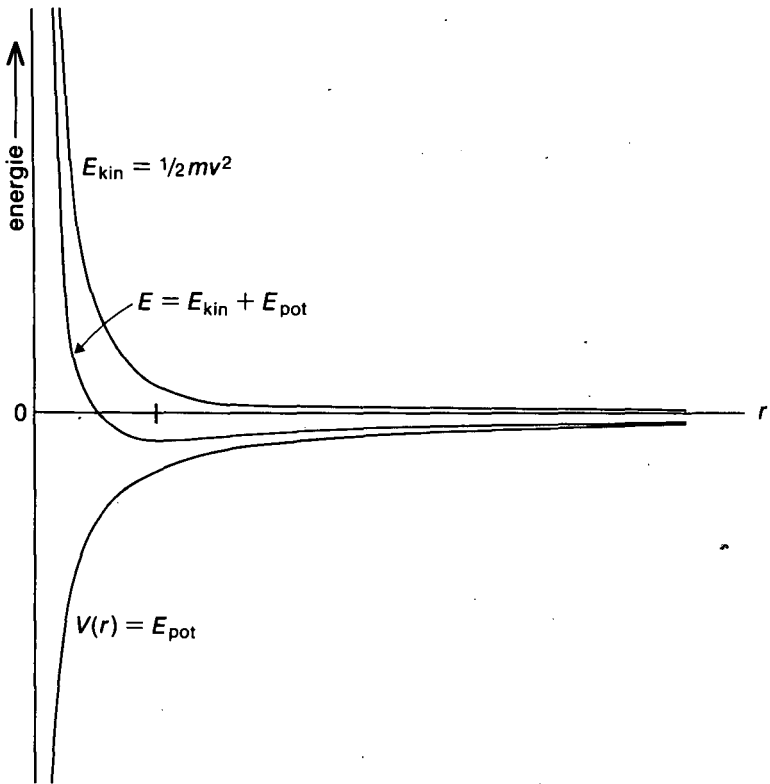


Fig. 56. Het verloop van $V(r)$ en van de benodigde minimale E_{kin} als functie van r . De totale energie E heeft een minimum.

simpel ligt dat niet. Bekijken we daartoe het gedrag van E_{kin} en E_{pot} als functie van r (zie fig. 56). Voor grote r neemt E_{kin} sneller af dan E_{pot} toeneemt, maar voor kleine r is dat juist andersom. Dan neemt E_{kin} sneller toe dan E_{pot} afneemt. (Vanwege het verschil in gedrag van $1/r^2$ en $1/r$ als functie van r). Maar dat betekent dat de *totale energie*:

$$E = E_{kin} + E_{pot}$$

bij een bepaalde waarde van r *minimaal* zal zijn. Dan is de energie van het systeem dus minimaal en op die afstand r_0 zal het elektron zich dan ook 'gemiddeld' willen instellen. Niet groter, maar ook niet kleiner. Daarom kan de Coulomb-kracht het elektron niet in de kern trekken. Een grotere gemiddelde r is ongunstig vanwege de toenemende potentiële energie en een kleinere gemiddelde r is ongunstig vanwege de dan sterk toenemende benodigde kinetische energie. Het

is juist de balans tussen deze energienormen, die ervoor zorgt dat het praktisch lege volume van een atoom toch zo 'hard' is. En daarmee is de verklaring van de 'stabiliteit' van alle materie, vanwege de onzekerheidsrelaties, nu teruggevoerd op de kwantummechanica.

Dalton met zijn 'harde bollen', maar ook Bohr, kon niet anders dan de 'hardheid' van een atoom postuleren. De kwantummechanica gaat ook hierin een duidelijke stap verder.

4.2.5 Bolsymmetrische golffuncties

Laten we ons nu buigen over de vraag hoe de mogelijke 'staandegolffpatronen' voor het H-atoom eruitzien en wat ze betekenen. We zullen ons daarbij eerst beperken tot de allereenvoudigste voorbeelden en dat zijn golffuncties die bolsymmetrisch zijn. Dat wil zeggen dat ze alleen van r afhangen. We noemen deze functies nu $u(r)$ en ze moeten voldoen aan de volgende vergelijking:

$$\frac{d^2u}{dr^2} = -\frac{8\pi^2m}{h^2}[E - V(r)]u = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 u$$

Deze vergelijking heeft precies dezelfde vorm, afgezien van de notatie, als we eerder gezien hebben bij de rechthoekige put. Toch is er ook een belangrijk verschil. Immers, $V(r)$ is nu een continue, langzaam variërende functie van r en datzelfde moet nu dus ook gelden voor λ . We moeten in de 'Coulomb-ballon' dus staande golven inpassen waarvan de golflengte met toenemende r steeds groter wordt.

Fig. 57 laat zien wat dat betekent en hoe zo'n mogelijke staande golf er dan komt uit te zien. De getekende functie $u_n(r)$ heeft 4 'buiken', wat betekent dat we, net als in de oneindige put, te maken hebben met het kwantumgetal $n = 4$. We zien uit de stippellijn in de figuur dat de functie $u_n(r)$ ook weer doordringt in een gebied dat klassiek verboden is. Daarom valt $u_n(r)$ in dat gebied ook weer via een e -macht af naar nul.

De samenhang tussen de energiewaarde en het verloop van de functie $u(r)$ is getekend in fig. 58 (voor $n = 1$). Je ziet hieruit opnieuw hoe aan de eis dat de normeringsintegraal eindig moet zijn, alleen kan worden voldaan bij bepaalde energiewaarden.

Tenslotte, wat betekent zo'n functie $u(r)$ nu precies? Laten we ons daartoe goed herinneren wat de betekenis was van $|\psi(x)|^2 dx$ in de rechthoekige put. Precies zo wordt de betekenis van $u(r)$ gegeven door de eis dat $|u(r)|^2 dr$ overeenkomt met de *waarschijnlijkheid om het elektron aan te treffen in het afstandsinterval tussen r en $r + dr$* .

Alleen, bedenk wel dat vanwege de bolsymmetrie dit afstandsinterval nu correspondeert met een hele *bolschil*. Ofwel: het is de ruimte

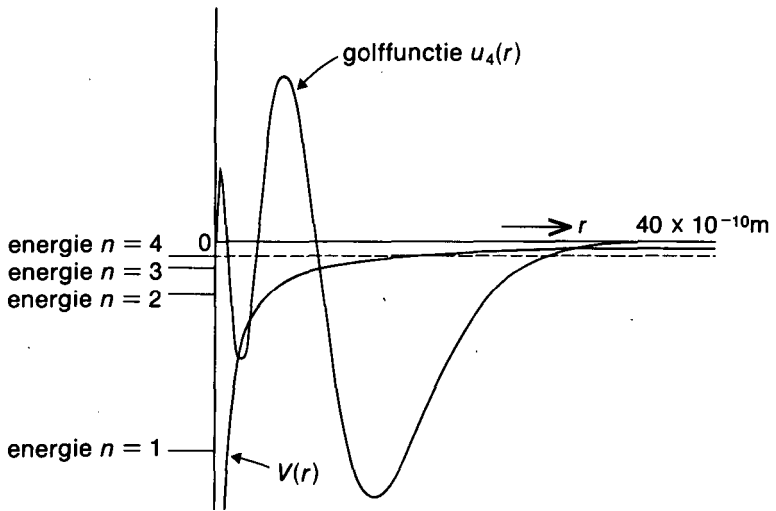


Fig. 57. De golf functie $u_4(r)$ ingepast in de 'Coulomb-ballon' bij het gestippelde energieniveau. Let erop dat deze functie ook doordringt in 'klassiek verboden gebied'.

die begrensd wordt door twee boloppervlakken, het kleinste met straal r en het grootste met straal $r + dr$ (en volume $4\pi r^2 dr$!). $P(r)dr \equiv |u(r)|^2 dr$ wordt dan ook wel de *radiale waarschijnlijkheidsverdeling* genoemd.

Hiermee hebben we de essentie van het kwantummechanisch denken over de atombouw al te pakken. Een elektron kan zich alleen bevinden in een stationaire toestand. Deze vinden we als oplossingen van de Schrödinger-vergelijking. Gebonden toestanden, dat wil zeggen toestanden met beperkte bewegingsvrijheid van het elektron, zijn alleen mogelijk voor bepaalde discrete energiewaarden. De bijbehorende golf functies voorspellen dan de kans het elektron 'ergens' in de ruimte aan te treffen. Er is geen sprake van een 'vaste' baan of van een 'ladingswolk' of van een 'uitgesmeerd elektron', zoals soms gezegd wordt. Het gaat alleen om kansverdelingen en de golf functies zeggen hoe die eruit zien! In fig. 59 zijn enkele bolsymmetrische waarschijnlijkheidsverdelingen getekend, aangegeven als $P_{n,l}(r)$ voor $n = 1, 2, 3$ en $l = 0$.

Maar, waar komt nu opeens die index l vandaan?

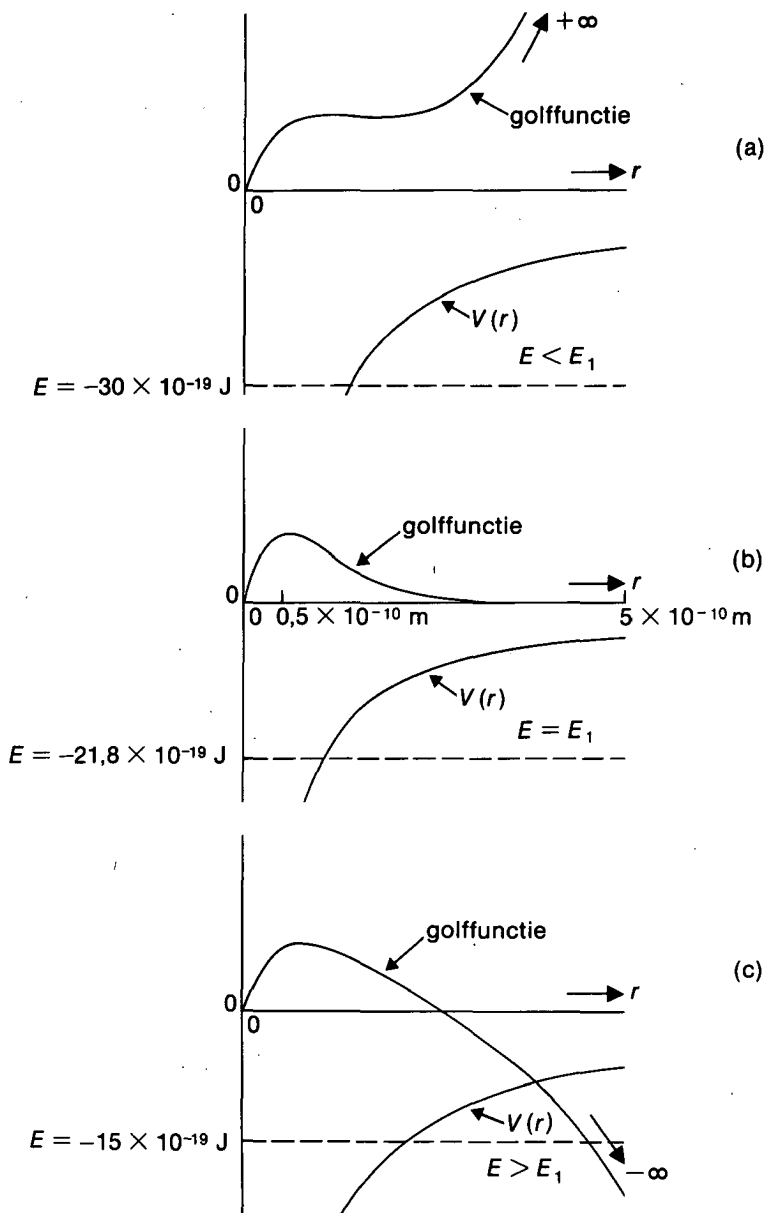


Fig. 58. Alleen bij zeer bepaalde, discrete energiewaarden zijn er normeerbare golffuncties te vinden die passen in de 'Coulomb-ballon'.

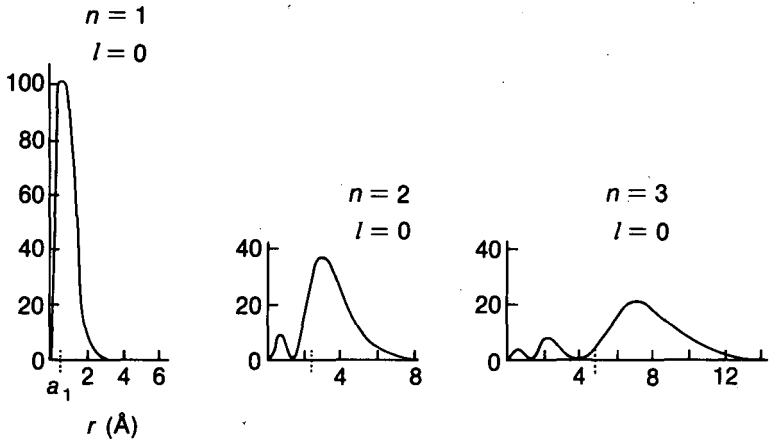


Fig. 59. Drie bolsymmetrische waarschijnlijkheidsverdelingen. (Voor $n = 1, 2$ en 3). De figuren geven de kans het elektron op een bepaalde afstand van de kern aan te treffen. Het verticale stippelijntje geeft de straal van de Bohrse banen $n = 1, 2$ en 3 . Daaruit blijkt duidelijk het grote verschil tussen het kwantummechanische atoom en het Bohr-atoom.

4.2.6 Het baanimpulsmoment

Deze l hangt samen met het tweede deel van ons probleem: de hoekafhankelijkheid van de golffuncties. Er zijn namelijk ook golffuncties die *niet* bolsymmetrisch zijn, en daarvoor is deze index l juist *niet* gelijk aan nul.

Wat zou een niet-bolsymmetrische golffunctie kunnen betekenen? Zoiets als dat de kans om het elektron in de ene richting aan te treffen groter is dan in een andere. Dat zou suggereren dat er in zo'n geval een soort grootte in het spel moet zijn die een zeker 'gevoel voor richting' in het atoom introduceert. En dat is ook zo! Het gaat hier om het zogenaamde *baanimpulsmoment* van het elektron. Het *impulsmoment* van een deeltje is, ook klassiek, inderdaad een grootte waaraan we behalve een *grootte* ook een *richting* kunnen toekennen. Een vectorgrootte dus, net als een kracht of een snelheid, maar toch weer ingewikkelder zodat ik er hier niet al te diep op in wil gaan.³²

Het impulsmoment L speelt vooral een belangrijke rol bij de beschrijving van draaibewegingen. Een bekend klassiek voorbeeld daarvan is de verklaring van het rechtop blijven staan van een snel draaiende tol (richting!). Fig. 60 laat bijvoorbeeld het impulsmoment 'zien' van een klassiek deeltje dat een cirkelbeweging uitvoert. Als we nu, als belangrijk speciaal geval, even aannemen dat op dit

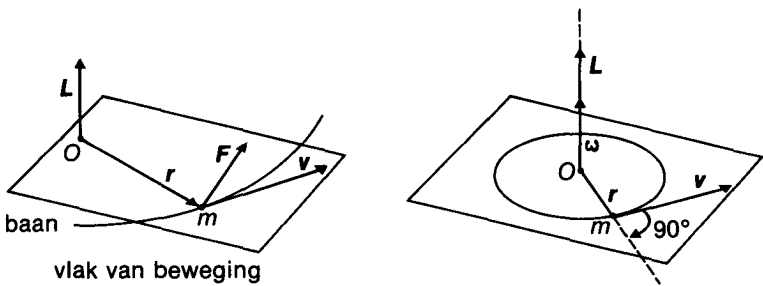


Fig. 60. Het baanimpulsmoment L van een deeltje. De vector L staat altijd loodrecht op zowel de plaatsvector (r) als de impulsvector (p).

deeltje alleen een centrale kracht werkt, zoals bijvoorbeeld de Coulomb-kracht, dan is volgens de klassieke mechanica zijn impulsmoment een *behouden grootheid*. Dat wil zeggen dat het impulsmoment dan zowel wat *richting* als *grootte* betreft niet verandert in de tijd. En lijkt deze situatie niet verdacht veel op ons elektron in het H-atoom?

Nu is het verleidelijk om je bij het impulsmoment van het elektron in het H-atoom 'net zoiets' voor te stellen als getekend in fig. 60. Maar daar moeten we toch erg voorzichtig mee zijn. Ook nu weer blijkt ons klassieke voorstellingsvermogen te kort te schieten voor de kwantummechanische realiteit. Laat ik desalniettemin toch kort iets van die realiteit proberen te schetsen. Ook voor het baanimpulsmoment van het elektron kunnen we, net als voor de energie, een Schrödinger-vergelijking opstellen, met bijbehorende randvoorwaarden. Als we die proberen op te lossen, blijkt dit alleen mogelijk voor zeer bepaalde, discrete waarden van de grootte van het impulsmoment. Dus net zo als we gezien hebben voor de energie, maar in afwijking van het klassieke impulsmoment, dat elke willekeurige waarde kan hebben. Deze grootte van het baanimpulsmoment leggen we vast met het kwantumgetal l , waarbij l alleen de waarden $0, 1, 2, 3, \dots$ blijkt te kunnen aannemen. Op zich dus een verrassend resultaat, hoewel misschien niet meer zo schokkend na onze eerdere kennismaking met de energiekwantisatie.

Maar hoe zit het nu met de *richting* van het baanimpulsmoment? Wijst dat altijd dezelfde kant uit? Nee, dat is zeker niet zo, waarom zou het? In de natuurkunde gaan we ervan uit dat de lege ruimte isotroop is. Dat wil zeggen dat in een volstrekt lege ruimte geen voorkeursrichting valt aan te wijzen. Het is zelfs te bewijzen dat behoud van impulsmoment nauw samenhangt met deze ruimtelijke isotropie. Het waterstofelektron bevindt zich echter niet in een vol-

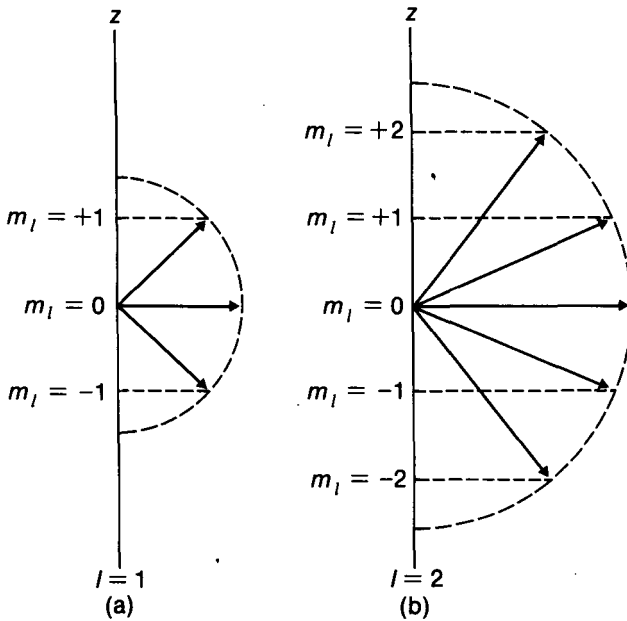


Fig. 61. De mogelijke waarden die de component L_z van het baanimpulsmoment kan aannemen, van $l = 1$ en $l = 2$.

strekt lege ruimte, omdat er immers, behalve dit elektron zelf, ook nog één proton aanwezig is. Toch is er ook voor deze situatie, mits we redeneren vanuit de plaats van het proton, nog steeds geen voorkeursrichting aan te wijzen. Dit komt juist vanwege de specifieke eigenschappen van de Coulomb-kracht. En dus kan het baanimpulsmoment van het elektron ten opzichte van het proton in principe nog elke richting hebben.

Maar hoe weten we nu welke richting? Door die te meten. Hoe meten we een richting?

Wel, bijvoorbeeld door experimenteel een bepaalde richting te kiezen en te kijken hoe groot de component van het impulsmoment in die gekozen richting precies is. Experimenteel een richting kiezen betekent echter dat je door een of andere procedure *wel* een voorkeursrichting vastlegt. Dat je voor het elektron een anisotrope ruimte creëert, bijvoorbeeld door een magnetisch of elektrisch veld aan te leggen. Als we dat doen, en die voorkeursrichting noemen we nu maar even de z-as, dan kunnen we de component van het impulsmoment langs deze as (L_z) meten. En wat blijkt dan, opnieuw tot onze verrassing? Dat ook deze component alleen maar een klein aantal discrete waarden kan aannemen (zie fig.61). Ofwel: bij metingen

blijkt niet alleen de *grootte*, maar ook de *richting* van het impulsmoment gekwantiseerd te zijn. Het beperkte aantal mogelijke waarden van L_z wordt vastgelegd met het kwantumgetal m waarvoor geldt dat het altijd een geheel getal moet zijn zodanig dat $-l \leq m \leq +l$. Bij een gegeven waarde van l kan m dus $2l + 1$ waarden aannemen. Deze richtingskwantisatie van het baanimpulsmoment, ook wel ruimtelijke kwantisatie genoemd, is opnieuw een verrassend effect dat ons klassiek volkomen onbekend is. Als je de richting van L wilt weten, dan vind je altijd, in welke richting je ook meet, een van de toegelaten waarden van m voor L_z en nooit iets ertussenin.

4.2.7 Spinimpulsmoment

Voordat we nu naar de consequenties van het voorgaande voor de golf functies van het H-atoom gaan kijken, eerst nog iets anders. Het elektron blijkt nog een eigenschap te hebben die belangrijk is. Het elektron blijkt namelijk behalve een baanimpulsmoment nog een ander impulsmoment te hebben. Dat wordt het spinimpulsmoment genoemd, of kortweg de 'spin'. Je kunt het vergelijken met het impulsmoment van de aarde ten gevolge van de draaiing om haar eigen as. Maar voor het elektron ligt dat opnieuw moeilijker. De reden daarvoor is dat het er verdacht veel op lijkt dat het elektron een zogenaamd 'puntdeeltje' is. Dat wil zeggen dat zijn afmetingen

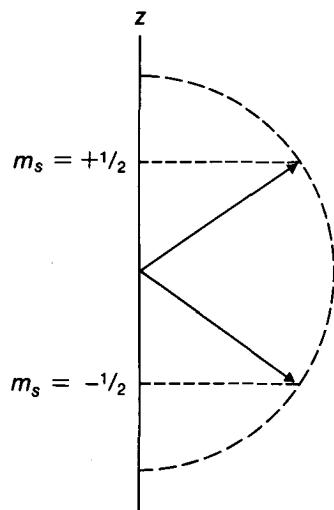


Fig. 62. De mogelijke waarden van de component S_z van het spinimpulsmoment.

zo klein zijn, de huidige experimenten wijzen op een diameter die kleiner is dan 10^{-16} m, dat je eigenlijk helemaal niet kunt spreken van een klein bolletje dat om zijn as draait.³³

Maar goed, hoe dat ook zij, 'het elektron heeft spin'. En daarbij komt dan weer de vraag: wat is de richting van dit spinmoment? Het antwoord daarop is: als we de component van het spinimpulsmoment meten in de aangelegde voorkeursrichting, vinden we voor de grootte daarvan altijd maar *twee mogelijke waarden*. Die geven we aan met het kwantumgetal m_s , waarvoor geldt $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Hoewel het spinbegrip een centrale rol speelt in de kwantummechanische natuurbeschrijving, zullen wij er verder niet op ingaan. Het enige dat we moeten onthouden, is dat een elektron altijd slechts in twee verschillende 'spintoestanden' kan zitten.

4.2.8 Hoekafhankelijke golf functies

Inmiddels is wellicht het H-atoom als onderwerp wat op de achtergrond geraakt. Daarom gaan we daar nu mee verder. We hadden gezegd dat er ook niet-bolsymmetrische golf functies moesten zijn. Golf functies die dus niet alleen afhangen van r , maar ook van de richting waarin je kijkt, vastgelegd door de hoeken θ en ϕ . We concentreren ons nu eerst op de hoekafhankelijkheid en daarmee dus op een tweedimensionaal probleem. We zullen moeten zoeken naar zoiets als 'staande-golf patronen' op een oppervlak. Voor een rechthoekig oppervlak is dat niet zo moeilijk. Fig. 63 geeft daarvan een voorbeeld. We zien dat zo'n golf patroon bepaald wordt door twee verschillende golflengten; voor iedere richting een. Ofwel: een 'oppervlaktepatroon' wordt bepaald door twee kwantumgetallen, een voor iedere dimensie. Aan zoiets, maar dan veel ingewikkelder, zou je ook kunnen denken bij 'staande-golf patronen op een boloppervlak'. En de kwantumgetallen die deze 'oppervlaktepatronen' voor het H-atoom bepalen, zijn nu juist precies de eerder genoemde l en m . Het zijn de oplossingen van de Schrödinger-vergelijking voor het baanimpulsmoment, die het hoekafhankelijke deel van de waterstofgolf functies bepalen. En daarmee wordt duidelijk dat inderdaad het impulsmoment het 'gevoel voor richting' in het H-atoom introduceert.

Op de precieze wiskundige vorm van deze $Y_{l,m}(\theta, \phi)$'s of bolfuncties zoals ze genoemd worden, gaan we hier niet in.³⁴ Fig. 64 geeft er een paar voorbeelden van. Maar wat betekenen ze? Wat slordig geformuleerd komt het hierop neer: $|Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2$ *correspondeert met de waarschijnlijkheid het elektron aan te treffen in de richting bepaald door θ en ϕ* . Ofwel: bij een bepaalde vaste r -waarde kun je het elektron met de grootste kans vinden op die plaatsen waar het

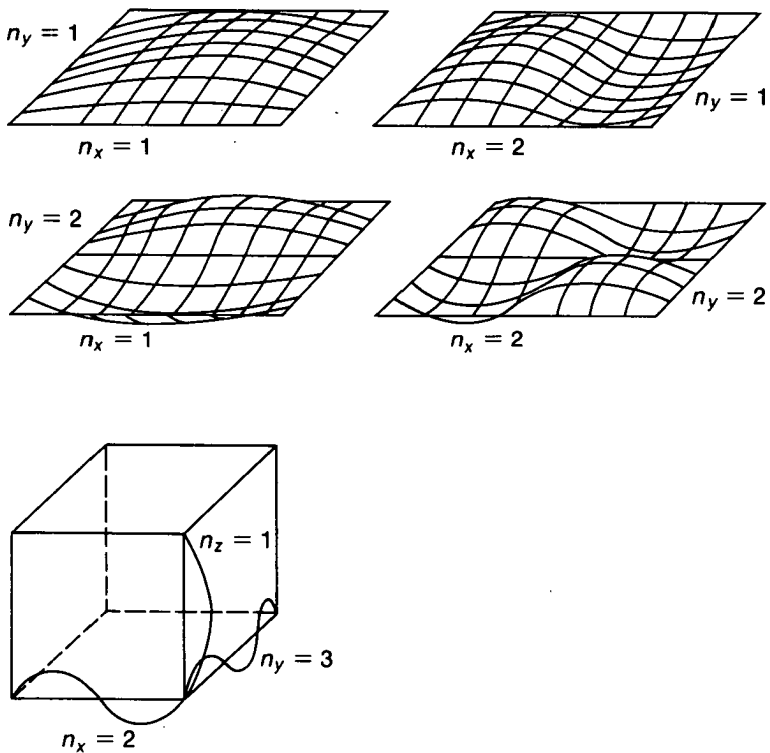


Fig. 63. Staande-golfpatronen op een oppervlak. In het geval van rechthoekige oppervlakken zijn de golfpatronen in beide richtingen onafhankelijk van elkaar te variëren.

'boloppervlak het hevigst trilt'. En het zijn de $Y_{l,m}(\theta, \phi)$'s die zeggen 'hoe hevig'!

4.2.9 Opnieuw de $P_{n,l}(r)$

Hoe zit het nu met de *radiale* waarschijnlijkheidsverdeling als $l \neq 0$? Of beïnvloedt het baanimpulsmoment alleen de hoekverdeling? Nee, zo simpel is dat niet. Klassiek valt dat gemakkelijk in te zien. Immers, de bewegingen in de radiale richting en die over het boloppervlak zijn niet onafhankelijk. Die twee zijn aan elkaar gekoppeld omdat de *grootte* van het baanimpulsmoment *constant moet blijven*. Voor het deeltje van fig. 60 geldt bijvoorbeeld dat de grootte van het baanimpulsmoment L gegeven wordt door $L = mrv_c$ met v_c de cirkelsnelheid. Als L constant moet zijn, dan moet wel, bij kleiner

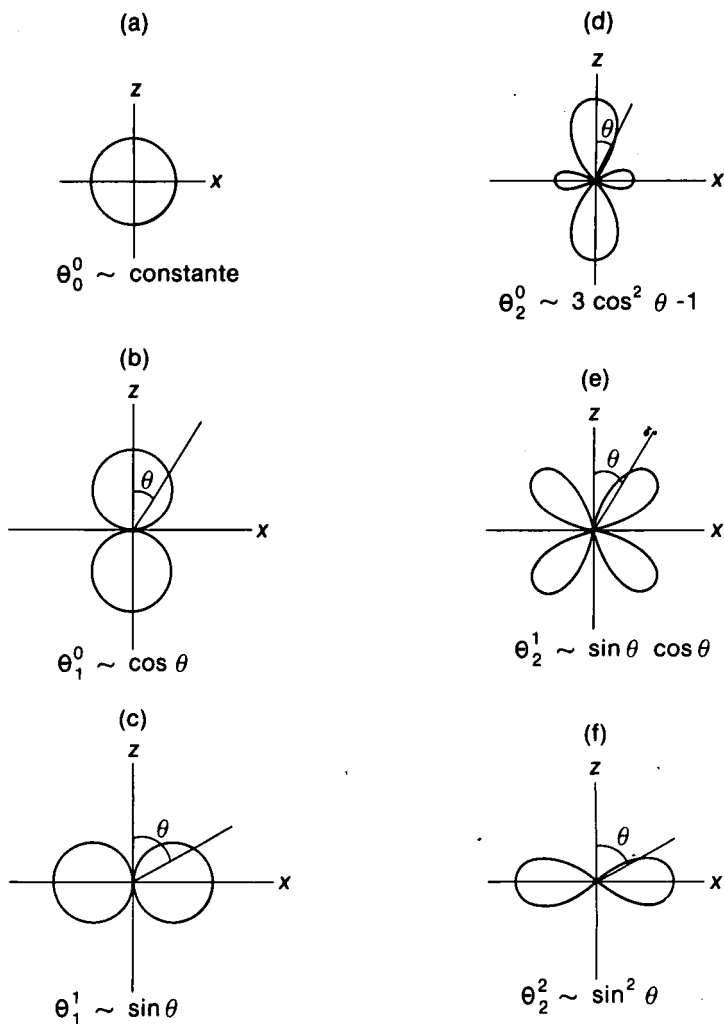


Fig. 64. Een indruk van de bolfuncties $Y_{l,m}(\theta, \phi)$. Getekend is alleen de θ -afhankelijkheid. Daarbij is de waarde van de bolfunctie in een richting bepaald door θ gelijk aan de lengte van het lijnstuk dat vanuit de oorsprong de getekende figuur snijdt. Het ontbreken van de ϕ -afhankelijkheid in deze figuren is geen bezwaar omdat de waarschijnlijkheidsverdelingen $Y_{l,m}^2$ onafhankelijk zijn van de waarde van ϕ . Van deze waarschijnlijkheidsverdelingen krijg je derhalve een voldoende goede indruk als je de getekende figuren in gedachten ronddraait rond de z -as.

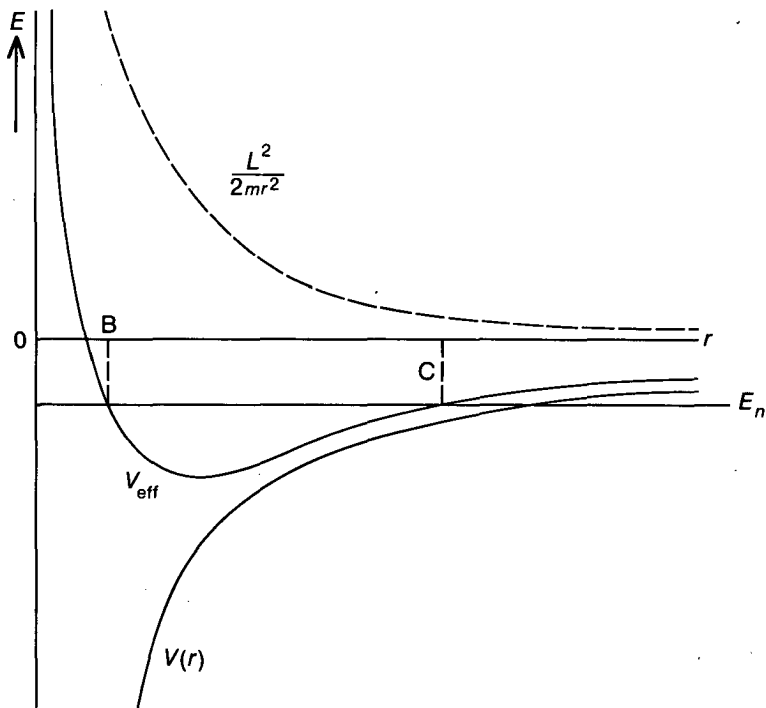


Fig. 65. Het verloop van de 'gereserveerde kinetische energie' als functie van r . Ook is het verloop van V_{eff} getekend, voor het geval $V(r)$ een Coulomb-potentiaal is.

wordende r , v_c steeds groter worden. En dus wordt, bij kleiner wordende r , een steeds groter deel van de kinetische energie als het ware 'gereserveerd' voor de cirkelbeweging, volgens:

$$\frac{1}{2} m v_c^2 = \frac{L^2}{2mr^2}$$

Het verloop van deze 'gereserveerde kinetische energie' als functie van r is getekend in fig. 65. Voor de beweging in de r -richting betekent dit dat het deeltje zich als het ware niet langer bevindt in een zuivere Coulomb-put, maar in een 'effectieve'-potentiële-energieput V_{eff} met (zie fig. 65):

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}$$

Kwantummechanisch betekent dit dat we nu naar staandegolfpatronen moeten zoeken die passen in de effectieve-

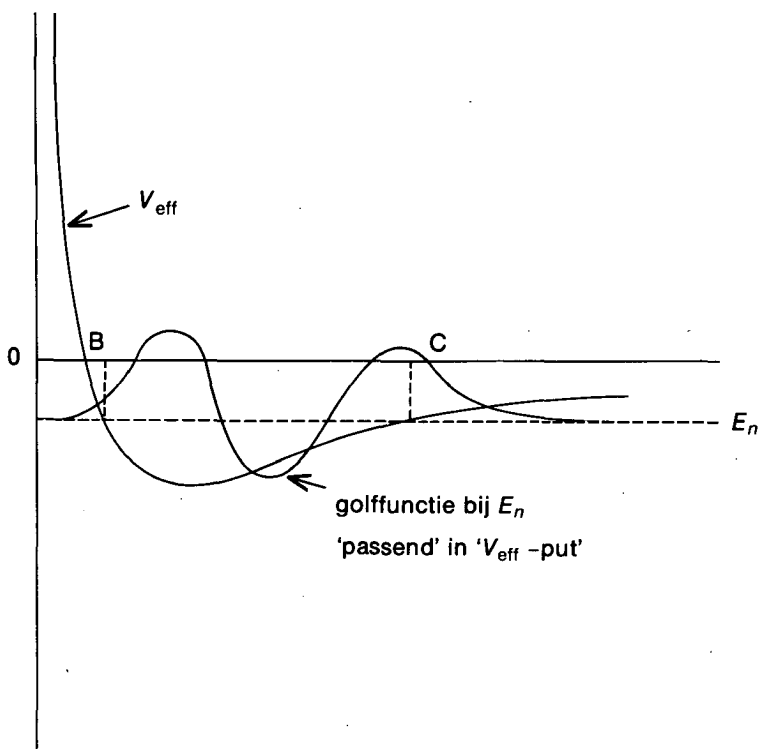


Fig. 66. Een 'staande golf' in de effectieve-potentialput. Let erop dat er nu zowel voor kleine als voor grote r een klassiek verboden gebied is.

potentialput, in plaats van in de zuivere Coulomb-put (zie fig. 66). Als we dat doen, blijken er twee dingen. De toegelaten energiewaarden voor $l \neq 0$ blijken, althans voor het H-atoom, dezelfde als wanneer $l = 0$ en dus alleen bepaald te worden door het kwantumgetal n . Maar ook blijkt dat bij een bepaalde energie E_n niet alle l -waarden zijn toegestaan. Immers, de 'bodem van de effectieve-potentiële-energieput' moet natuurlijk wel lager liggen dan de totale energie E_n . Of, in kwantumgetallen vertaald, bij een bepaalde waarde van n kan l slechts de waarden $0, 1, 2 \dots n-1$ aannemen. Ook blijkt dat voor grotere l -waarden de 'golffpatronen' steeds verder van de kern afkomen. Het elektron wordt als het ware meer naar buiten gedrongen. Omdat er, voor $l \neq 0$, ook rond de kern een klassiek verboden gebied is, dat steeds breder wordt naarmate l groter wordt.

4.2.10 Tenslotte: wat een toestanden!

Laten we ons tenslotte opnieuw buigen over de vraag hoe het H-atoom er 'nu eigenlijk uitziet'. En daarmee al het voorgaande afronden en samenvatten. We vragen dus nu opnieuw naar de *totale* ruimtelijke waarschijnlijkheidsverdelingen die corresponderen met de verschillende mogelijke stationaire toestanden van het elektron. Of, anders gezegd, we vragen naar de mogelijke vormen van:

$$|\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)|^2 dV$$

waarbij dV een klein volume-elementje voorstelt rond het punt met coördinaten r , θ en ϕ (zie fig. 67). Zoals nu te verwachten valt, kunnen we deze $\psi_{n,l,m}^2$ ook schrijven als een produkt van twee andere functies, te weten:

$$\psi_{n,l,m}^2 dV = R_{n,l}^2(r) Y_{l,m}^2(\theta,\phi) dV$$

Dus als een produkt van een radiale verdeling en een hoekverdeling. De $Y_{l,m}^2$ kennen we; maar waarom staat hier nu $R_{n,l}^2(r)$ in plaats van de $P_{n,l}(r) = u_{n,l}^2(r)$ die we al zijn tegengekomen? De achtergrond daarvan blijkt uit fig. 67. Immers, de $P_{n,l}(r) dr$ gaven de kans het

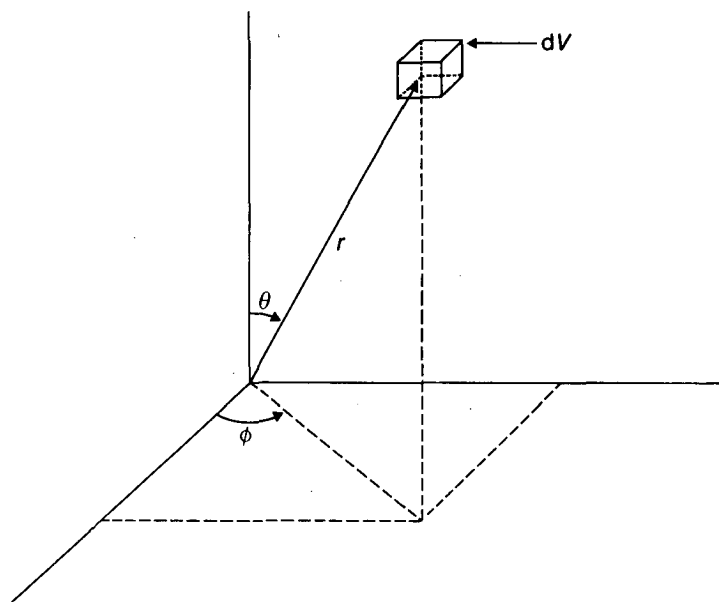


Fig. 67. Een klein volume-elementje dV rond het punt met coördinaten r, θ en ϕ .

elektron aan te treffen in de *hele* bolschil met straal r en volume $4\pi r^2 dr$. Maar nu moeten we niet de kans hebben voor de hele bolschil, maar slechts in een klein volume-elementje dV ter plaatse (r, θ, ϕ) . Deze gewenste kansverdeling $R_{n,l}^2(r)$ vinden we echter eenvoudig door de $P_{n,l}(r) dr$ te vermenigvuldigen met de volumeverhouding $dV/4\pi r^2 dr$. Het verloop van deze $R_{n,l}^2(r)$ staat aangegeven in fig. 68.

Daarmee hebben we dan, naar het lijkt, eindelijk alle ingrediënten klaar om het verloop van $\psi_{n,l,m}^2$ voor een vaste waarde van dV te tekenen. Maar opnieuw duiken er problemen op. Immers, om een

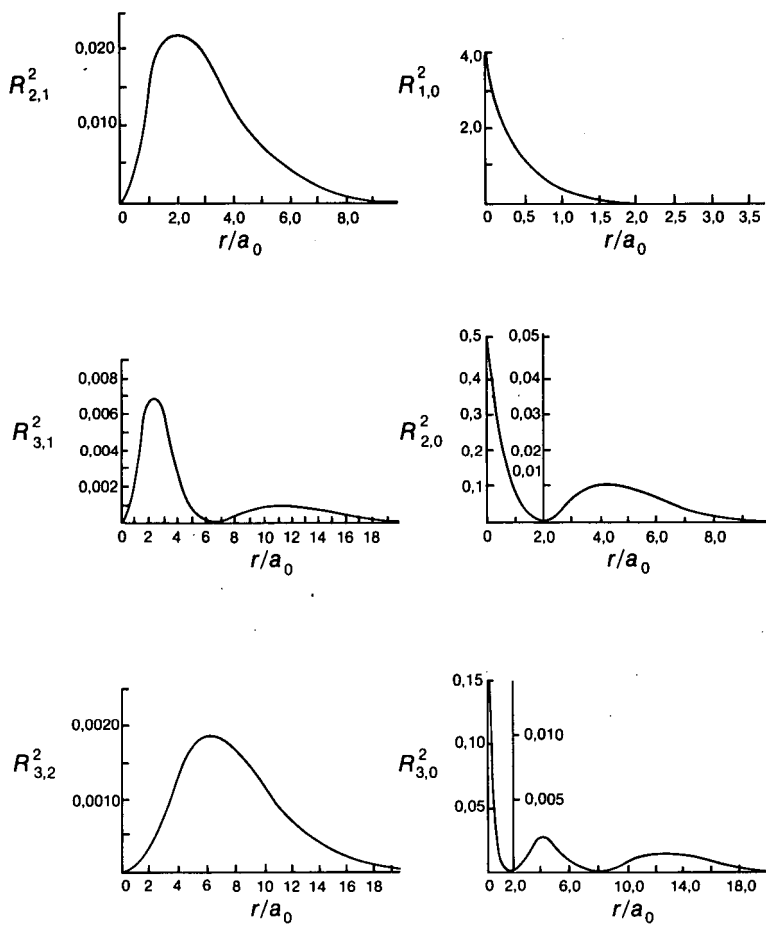


Fig. 68. Het verloop van enkele $R_{n,l}^2$.

driedimensionale functie te kunnen tekenen, hebben we een vierdimensionale ruimte nodig! Daarom is in fig. 69 de volgende kunstgreep toegepast. Allereerst blijkt het voldoende om alleen een doorsnede in een verticaal vlak te tekenen, bijvoorbeeld het xz -vlak. Dit komt omdat de verdelingen rotatiesymmetrisch zijn om de z -as. Dat wil zeggen dat je alle plaatjes uit fig. 69 kunt ronddraaien om de z -as, om zo een driedimensionaal beeld te krijgen. Verder is in het getekende vlak de 'stippeltjesdichtheid' evenredig met de waarde van $\psi_{n,l,m}^2$. Dus: hoe zwarter de plaatjes, hoe groter de kans het elektron daar aan te treffen, en omgekeerd! Fig. 69 geeft zo een beeld van wat wel de 'grondpatronen' of 'oervormen der natuur' genoemd worden. Je kunt zelf nagaan hoe de patronen uit fig. 69 een synthese vormen van de patronen uit fig. 64 en fig. 68 (het verschil tussen $Y_{l,m}$ en $Y_{l,m}^2$ is daarvoor slechts van ondergeschikt belang).

De verschillende *orbitalen*, zoals ze genoemd worden, kunnen worden geïnclassificeerd met behulp van de kwantumgetallen n , l en m . Voor $l = 0, 1, 2, 3 \dots$ spreekt men van respectievelijk s -, p -, d -, f ...-orbitalen. Het hoofdkwantumgetal n wordt voor deze letteraanduiding geplaatst. Wanneer we dus zeggen dat het elektron in een $3d$ -orbitaal zit, dan bedoelen we de waarschijnlijkheidsverdeling beho-

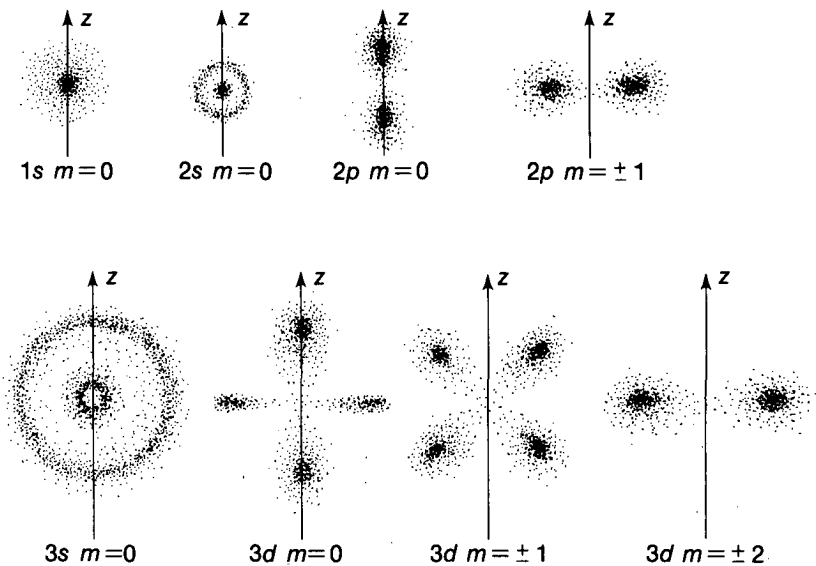


Fig. 69. Een beeld van de mogelijke kwantummechanische toestanden van het H-atoom.

rende bij een van de golffuncties met $n = 3$ en $l = 2$. En het is de *waarschijnlijkheidsinterpretatie* van grondpatronen als getekend in fig. 69, die representatief is voor het huidige kwantummechanische beeld van de atoombouw. Zowel voor het H-atoom als voor alle andere atomen.

4.2.11 Oervormen der natuur

De bekende fysicus Weisskopf kan dit allemaal zo mooi zeggen. Vandaar dit citaat:

*'Let me stress the fact that quantum mechanics has introduced into physics the elements of form, shape and symmetry. Nature is full of ever-recurring characteristic shapes and symmetries, from crystals to flowers. There must be a fundamental reason for the typical properties of materials and forms which we observe in the flow of natural events. The reason is found in quantum mechanics: the wave nature of electrons forces them into typical patterns, the shapes of standing waves in the spherically symmetric Coulombfield. These shapes are the fundamental patterns of nature which are the basis of all shapes which we observe – the German language has a better expression: "die Urformen der Natur". They not only exhibit the typical shapes of atoms, but also a stability against changes and an ability to regenerate after having been perturbed by influences from the surroundings. Nature combines these patterns puzzlelike to molecular structures exhibiting the ever-recurring variety of substances which we find in our environment, from minerals to the macromolecules which are the basis of life.'*¹

Ook hiervan zullen we nu een klein stukje gaan bekijken!

4.3. Over helium... en de rest

4.3.1 Meer elektronen

Na waterstof, komt helium. Slechts twee elektronen en een kern. Hoewel ik ook op het He-atoom niet diep in wil gaan, duikt er toch een nieuwe 'eigenaardigheid' op die de moeite waard is om even bij stil te staan. Deze 'eigenaardigheid' komt altijd om de hoek kijken zodra we te maken hebben met een systeem dat meerdere (≥ 2) elektronen bevat.

De golffunctie voor de twee He-elektronen samen, zouden we symbolisch kunnen schrijven als $\psi(1,2)$. Hiermee kunnen we dan in principe de bijbehorende waarschijnlijkheidsverdeling $|\psi(1,2)|^2 dV_1 dV_2$ uitrekenen. Wat betekent dit nu precies? Wel, dat

moet natuurlijk de waarschijnlijkheid weergeven om elektron 1 in een volume-elementje dV_1 aan te treffen en elektron 2 in een volume-elementje dV_2 . En net zo zou dan $|\psi(2,1)|^2 dV_1 dV_2$ de waarschijnlijkheid moeten weergeven om nu elektron 2 in dV_1 aan te treffen en elektron 1 in dV_2 .

Althans, dit zou je verwachten, maar zo is het niet! Immers, lang geleden bij het tweespletenexperiment hebben we al gesproken over de principiële niet-onderscheidbaarheid van elektronen. ‘Elektronen hadden geen eigen identiteit.’ Maar dat betekent dat je, in dit geval, wel kunt *meten* dat er één elektron in dV_1 is en één elektron in dV_2 , maar nooit *welk* elektron precies *waar* zit. Tussen beide veronderstelde waarschijnlijkheidsverdelingen bestaat geen *waarneembaar* verschil, zodat we van de golffunctie moeten *eisen* dat:

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2$$

Ofwel: voor de golffunctie van twee gebonden elektronen moet kennelijk gelden dat óf $\psi(1,2) = +\psi(2,1)$ óf dat $\psi(1,2) = -\psi(2,1)$. We zeggen dan dat de golffunctie óf symmetrisch (voor het plusteken) of antisymmetrisch (voor het minteken) moet zijn voor verwisseling van twee elektronen. De vraag rijst dan: wat is nu het ‘goede’ teken, en wat betekent dat dan?

Het blijkt nu, en daarmee hebben we opnieuw een fundamenteel principe te pakken, dat een systeem van meerdere elektronen beschreven moet worden met een *antisymmetrische* golffunctie. En ook hier geldt weer: ‘vraag niet waarom, maar kijk of het werkt’. En dát het werkt, blijkt uit het volgende!

4.3.2 Het Pauli-principe

Stel eens dat de waarschijnlijkheidsverdeling om het ene elektron ergens aan te treffen, precies gelijk zou zijn aan de waarschijnlijkheidsverdeling voor het andere elektron. Of met andere woorden, dat beide elektronen in precies dezelfde toestand zouden zitten. Dan is het duidelijk dat in dat geval de golffuncties er voor beide elektronen *precies hetzelfde* zouden moeten uitzien. Of, anders gezegd, de golffunctie zou dan *symmetrisch* moeten zijn voor verwisseling van beide elektronen:

$$\psi(1,2) = \psi(2,1)$$

Maar, omdat het om elektronen gaat, weten we nu dat de golffunctie in ieder geval *ook antisymmetrisch* moet zijn:

$$\psi(1,2) = -\psi(2,1)$$

Welnu, aan beide eisen kan natuurlijk alleen maar tegelijk voldaan zijn als:

$$\psi(1,2) = 0$$

En dat voert tot de verrassende conclusie dat zo'n golf functie helemaal niet kan bestaan. Kennelijk moet ons uitgangspunt dus verkeerd geweest zijn. De veronderstelling dat de twee elektronen in precies *dezelfde toestand* zouden kunnen zitten, blijkt strijdig te zijn met de eis dat de *golf functie antisymmetrisch* moet zijn. Dus, als we deze eis handhaven, en dat doen we, dan leidt dit onvermijdelijk tot de conclusie dat in het He-atoom de twee elektronen *altijd in verschillende toestanden moeten zitten!*

Dit is een heel belangrijke conclusie, die zelfs nog veel algemener geldig is. Immers, we hebben in de afleiding nergens gebruik gemaakt van de speciale eigenschappen van het He-atoom. Afgezien dan natuurlijk van het feit dat het twee elektronen heeft, maar dat was ook het enige. Dat betekent dat onze conclusie ook geldig is voor elk atoom dat meerdere elektronen bezit. Alle elektronen in een atoom moeten altijd in verschillende toestanden zitten. Of, anders gezegd, elk elektron heeft altijd zijn eigen toestand! Nog anders gezegd: *er kan nooit meer dan één elektron in een bepaalde toestand zitten!*

Maar komt deze regel ons niet bekend voor? Is dat niet precies hetzelfde als wat in de scheikundelessen het Pauli-verbod of uitsluitingsprincipe werd genoemd? Inderdaad, en wat we hier gezien hebben is hoe dit Pauli-verbod in kwantummechanische termen wordt 'vertaald' als een eis tot antisymmetrie van meerelektron-golf functies. Wolfgang Pauli formuleerde dit principe al in 1925 op basis van de analyse van spectroscopische gegevens, nog voordat de kwantummechanische theorie was geformuleerd. Echter ook dit principe bleek later uitstekend in deze theorie in te passen.

4.3.3 Belangrijk voor de atoombouw?

Het Pauliverbod speelt, zoals we nu zullen zien, een uitermate belangrijke rol bij het begrijpen van de atoombouw. Als het bijvoorbeeld niet zou gelden, zou dat betekenen dat in elk atoom alle elektronen in dezelfde orbitaal zouden gaan zitten. En wel in die toestand waarin ze zo dicht mogelijk bij de kern zouden zijn. Dan zouden alle atomen praktisch even groot zijn. Of liever, allemaal even klein, want de 'gemiddelde straal' van die ene orbitaal zou erg klein zijn. Alle atomen zouden zich dan ook ruwweg net zo gedragen als we nu kennen van edelgasatomen. Dan zouden er dus ook nauwelijks moleculen kunnen worden gevormd. Kortom, zonder het

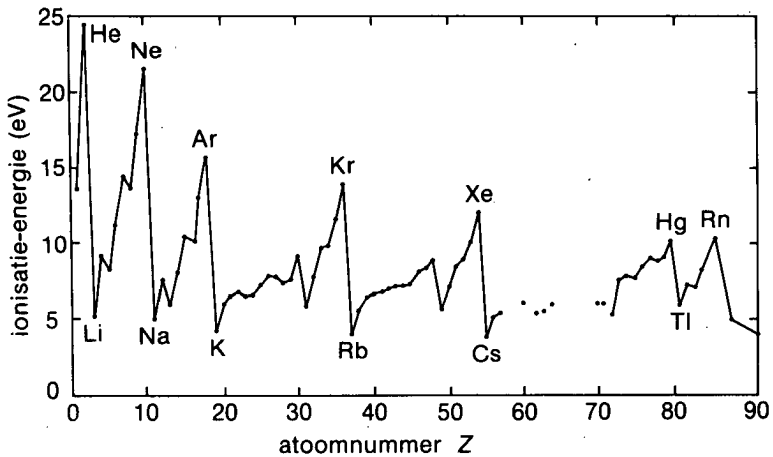


Fig. 70. Er is een zekere periodiciteit in het verloop van de ionisatie-energieën der elementen.

uitsluitingsprincipe zou de hele wereld er totaal anders uitzien, en zouden wij niet eens kunnen bestaan.

Maar gelukkig doen wij dat wel, evenals een groot aantal atomen met heel verschillende eigenschappen. Toch is er in al die verschillen ook een zekere regelmaat te ontdekken. Een zekere periodiciteit, op grond waarvan al in de vorige eeuw geprobeerd is de verschillende elementen te rangschikken in een periodiek systeem. Fig. 70 geeft een voorbeeld van zo'n periodiciteit in eigenschappen voor wat betreft de gemeten ionisatie-energieën van de verschillende atoomsoorten. We zien daarin een zeker periodiek verloop, dat zich na elk edelgas min of meer herhaalt. Deze edelgassen, met atoomnummers $Z = 2, 10, 18, 36, 54$ en 86 vormen kennelijk een soort 'grens'. Waarbij de bijbehorende atoomnummers een soort geheime code weerspiegelen die kennelijk een sleutelrol speelt. Welnu, het was precies deze code die Pauli probeerde te ontraadselen met zijn uitsluitingsprincipe. Bij de behandeling van het H-atoom bleek dat de toestand van een elektron gekarakteriseerd kan worden door de waarden van vier kwantumgetallen, te weten n, l, m en m_s . Het Pauli-verbod kan dus ook nog anders geformuleerd worden, namelijk dat in een atoom geen twee elektronen dezelfde serie kwantumgetallen mogen hebben. Welke waarden konden die ook al weer aannemen?

Voor het hoofdkwantumgetal n gold: $n = 1, 2, 3 \dots$

bij een gegeven n -waarde: $l = 0, 1, 2 \dots n-1$

bij gegeven n - en l -waarden: $m = -l \dots +l$

bij gegeven n -, l - en m -waarden: $m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

niveau	elektronen in schil		totaal aantal elektronen als iedere schil vol is
7 p	6	} 32	----- 118(?)
6 d	10		
5 f	14		
7 s	2		
6 p	6	} 32	----- 86(Rn)
5 d	10		
4 f	14		
6 s	2		
5 p	6	} 18	----- 54(Xe)
4 d	10		
5 s	2		
4 p	6	} 18	----- 36(Kr)
3 d	10		
4 s	2		
3 p	6	} 8	----- 18(Ar)
3 s	2		
2 p	6	} 8	----- 10(Ne)
2 s	2		
1 s	2	2	----- 2(He)

Fig. 71. De schilstructuur van de atomaire energieniveaus.

Als we vervolgens bedenken dat met elk viertal kwantumgetallen ook een energiewaarde is vastgelegd en dat de laagste energieniveaus het eerst bezet moeten worden, dan doemt het volgende beeld voor ons op. Bij elk atoom worden de elektronen als het ware netjes 'van onderop' verdeeld over de mogelijke energieniveaus. Een hoger gelegen niveau wordt pas bezet met een elektron als alle lagere niveaus al 'gevuld' zijn. Berekeningen wijzen uit dat de ligging van de energieniveaus in een atoom vooral bepaald wordt door de waarden van n en l (zie fig. 71). Maar dan moeten we wel bedenken dat bij elk n, l -niveau nog $2(2l + 1)$ 'elektronenplaatsen' horen, vanwege de mogelijke waarden van m en m_s .

Uit fig. 71 blijkt dat de niveaus te verdelen zijn in dicht bij elkaar liggende groepjes die schillen genoemd worden. De schillen zijn

onderling van elkaar gescheiden door relatief grote energieafstanden. Deze grotere energieafstanden, dus nieuwe schillen, blijken steeds op te treden nadat een edelgas aan de beurt is geweest. Natuurlijk is dat niet toevallig, maar juist een van de redenen waarom die elementen juist edelgassen heten! Maar daarmee hebben we wel de eerder genoemde 'geheime getallencode' ontcijferd! En daarmee is dus ook het periodiek systeem der elementen, althans in principe, met al zijn scheikundige consequenties doorzichtig geworden. Het is het Pauli-principe dat de elektronen dwingt in steeds hogere energieniveaus te gaan zitten, met bijbehorende orbitalen die steeds verder van de atoomkern afkomen. Zo krijgt elk atoom zijn eigen ruimtelijke structuur, en 'hardheid'. Of: elke atoomsoort inderdaad haar eigen 'identiteit'!

4.3.4 En de golffuncties?

En hoe zien die ruimtelijke structuren er dan wel uit? Of, wat op hetzelfde neerkomt, hoe zien nu de golffuncties van al die atomen eruit? Een terechte vraag naar het lijkt, maar tevens een welhaast onoplosbare. In het voorgaande hebben we eigenlijk net gedaan of we alle elektronen in een atoom apart mochten behandelen. Of, als het ware, een volgend atoom gelijk is aan het voorafgaande atoom, maar dan met een elektron extra er aan toegevoegd, waardoor de al aanwezige elektronen niet worden beïnvloed. Maar zo simpel ligt dat natuurlijk niet. Immers, elk elektron wordt niet alleen aange trokken door de atoomkern, maar ondervindt ook een afstoting van alle andere elektronen in het atoom. Waarbij de grootte van die afstoting steeds afhangt van de plaatsen waar al die elektronen zich bevinden. En dat maakt het probleem van het berekenen van de atoomgolffuncties uitermate gecompliceerd, want in de Schrödinger-vergelijking moeten ook alle krachten tussen alle elektronen onderling in rekening gebracht worden. Daaruit resulteert dan ook een vergelijking die volstrekt onoplosbaar is, althans als je het exact wilt doen. Zelfs van het He-atoom, waar het maar gaat om twee elektronen, is een exacte oplossing al niet meer mogelijk. Vandaar dat allerlei *benaderingsmethoden* gebruikt moeten worden om toch verder te kunnen komen. Het nadeel daarvan is natuurlijk wel dat je a priori niet meer weet hoe goed het is wat je uitrekent. Vandaar dat vaak variabelen in de berekening worden meegenomen, die het mogelijk maken de uitkomst zo goed mogelijk aan te passen bij de beschikbare experimentele gegevens. Deze gegevens bestaan nog steeds voor het grootste deel uit de nauwkeurige analyse van spectra, maar dan wel over een groot frequentiegebied. Van röntgenspectra tot en met infraroodmetingen.

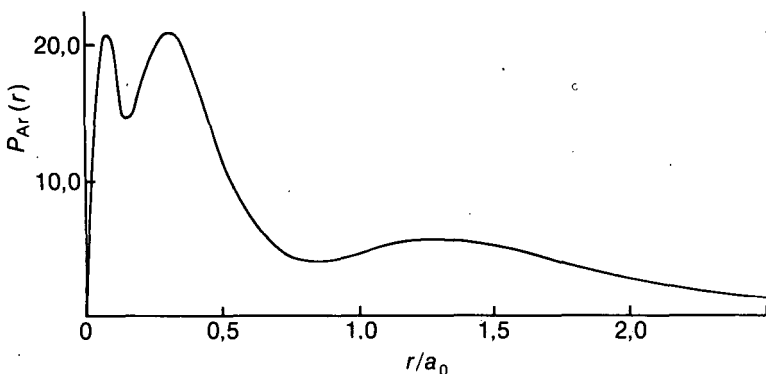


Fig. 72. Het verloop van de waarschijnlijkheid om een elektron op zekere afstand van de argonkern aan te treffen (a_0 is de grootte van de eerste Bohrse baan).

Een veel gebruikte benadering in de berekeningen is bijvoorbeeld om toch maar net te doen of alle elektronen wél onafhankelijk van elkaar bewegen. En dan de golffuncties van het atoom te benaderen door produkten van waterstofachtige eenelektron-golffuncties, die dan natuurlijk wel netjes antisymmetrisch gemaakt moeten zijn. Daardoor worden de uitdrukkingen voor de atoomgolffuncties, zeker voor wat grotere atomen, toch nog gruwelijk ingewikkeld. De eenelektron-golffuncties worden meestal gevonden als oplossingen van een Schrödinger-vergelijking waarin de wisselwerking met alle andere elektronen wordt benaderd door een soort gemiddelde, bolsymmetrische potentiële-energieterm. Fig. 72 geeft een voorbeeld van het resultaat van zo'n berekening. Eigenlijk zijn deze berekeningen pas goed mogelijk geworden, sinds het gebruik van moderne, grote en snelle computers. Het zal dan ook duidelijk zijn dat we er hier niet uitgebreider op in kunnen gaan.

Tot zover over de atombouw. Het principe blijkt in feite eenvoudig, en wel als volgt.

'Kijk hoe de potentiële-energieputten van alle elektronen in het atoom eruitzien. Probeer daarin staande golfpatronen voor alle elektronen tegelijk in te passen. De Schrödinger-vergelijking en het Pauli-principe geven daarvoor het recept. Deze golfpatronen van alle elektronen, op de goede manier geïnterpreteerd, bepalen te zamen de ruimtelijke structuur van het atoom.'

De praktijk echter, is vaak heel wat ingewikkelder!

4.4. Iets over moleculen

4.4.1 Het probleem

Het meest verwonderlijke van moleculen is misschien nog wel dat ze überhaupt gevormd worden. Hoe komt het eigenlijk dat atomen bij elkaar blijven om 'samen verder te leven'? Soms maar weinig, slechts twee of drie, maar soms ook heel veel, wel honderden tot zelfs duizenden. Kunnen we dat begrijpen? Mogen we eigenlijk wel spreken van atomen die samen een molecule vormen? Of verliezen die atomen dan hun eigen identiteit en moeten we elk molecule als een apart systeem op zich beschouwen? Als een hoeveelheid kernen en elektronen die op grond van hun onderlinge wisselwerking samen kennelijk een stabiel systeem kunnen vormen? Dat wil zeggen dat al die deeltjes bij elkaar een toestand kunnen vormen die energetisch voordeliger is dan wanneer ze opgesplitst zouden zijn in losse atomen. Kwantummechanisch zou dit betekenen dat we één Schrödinger-vergelijking moeten opschrijven voor alle deeltjes in het molecule en daarvan dan de stationaire oplossingen proberen te vinden. Wel, het zal duidelijk zijn dat als deze procedure voor atomen al niet mogelijk is, ze voor moleculen al vlug nog veel meer problemen op zal leveren. Vandaar dat ook moleculegolf functies eigenlijk alleen maar met behulp van benaderingsmethoden gevonden kunnen worden. Daarbij wordt als uitgangspunt wel degelijk gebruik gemaakt van de kennis omtrent de samenstellende 'moeder'-atomen. Net zoals de kennis van het H-atoom model stond voor het berekenen van ingewikkelder atomen, wordt de kennis van de atoomgolf functies gebruikt bij het berekenen van de moleculetoestanden. De precieze berekening van die toestanden is natuurlijk vaak weer een gigantisch rekenwerk, waar we hier aan voorbij zullen gaan. Slechts een tipje van de sluier zullen we oplichten door te kijken naar het allereenvoudigste molecule. Nee, niet H_2 , maar nog eenvoudiger: H_2^+ !

Het H_2^+ -ion

Het H_2^+ -ion bestaat uit twee protonen en één elektron. Het elektron beweegt dus in de gezamenlijke Coulomb-put van de beide protonen. Fig. 73 geeft deze resulterende potentiële energie weer, bij een zekere proton-afstand. De vorm van de resulterende Coulomb-put doet in ieder geval het belangrijke vermoeden rijzen dat de waarschijnlijkheidsverdeling van het elektron symmetrisch moet zijn ten aanzien van beide protonen.

Hoe komen we nu aan die verdeling? Wel, bedenk daartoe het volgende. Stel eens dat de afstand tussen beide protonen zo groot is

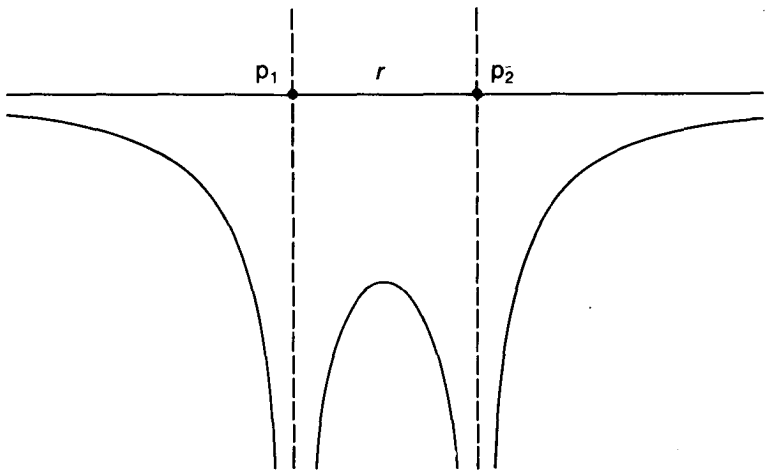


Fig. 73. Het verloop van de potentiële energie van het elektron in het H_2^+ -ion, in een vlak door de twee protonen.

dat de beide Coulomb-putten elkaar maar heel weinig overlappen. Het elektron zal dan met verreweg de grootste kans óf bij het ene proton in de buurt zitten óf bij het andere. Hoewel we natuurlijk niet weten bij welk. Maar stel eens dat het bij proton één zit. Lijkt het dan niet redelijk om aan te nemen dat zijn golf functie praktisch gelijk is aan een pure waterstoffunctie rond dat proton? Bijvoorbeeld $\psi_1(1s)$ van de grondtoestand rond proton één. En net zo $\psi_2(1s)$ voor als het elektron rond proton twee zit. Maar omdat we niet weten waar het elektron zit, moeten we deze twee atomaire golf functies combineren tot één moleculegolf functie die nog beide mogelijkheden openlaat. En uiteraard, beide even waarschijnlijk. Indachtig de gewenste symmetrie, kan dit nog op twee manieren, namelijk als:

$$\psi_+ = \psi_1 + \psi_2 \text{ en } \psi_- = \psi_1 - \psi_2$$

Verklaren deze functies nu ook dat er een stabiel molecule kan ontstaan? Laten we daartoe kijken naar de kansverdelingen die bij deze twee functies horen (zie fig. 74). Dan zien we dat in het geval van $|\psi_+|^2$ er een grote kans is het elektron *tussen* de twee protonen in aan te treffen, terwijl diezelfde kans bij $|\psi_-|^2$ juist relatief klein is. Het is nu essentieel je te realiseren dat juist als het elektron zich tussen beide protonen in bevindt, het deze naar elkaar toe zal trekken. Het schermt dan hun onderlinge afstoting als het ware af en werkt daardoor als een soort 'lijm' die beide protonen bij elkaar wil houden. Vandaar dat ψ_+ inderdaad een toestand beschrijft waarin moleculevorming kan optreden. Terwijl dat in de toestand beschre-

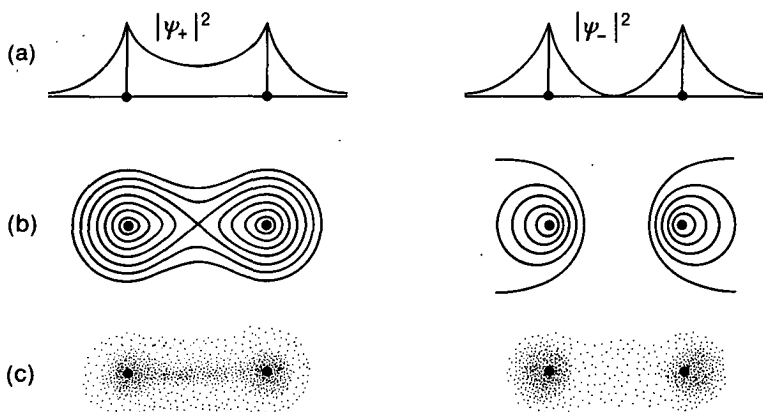


Fig. 74. Waarschijnlijkheidsverdeling voor ψ_+ en ψ_- ; (a) verdeling langs de verbindinglijn van de twee protonen, (b) en (c) verdeling in een vlak dat de twee protonen bevat.

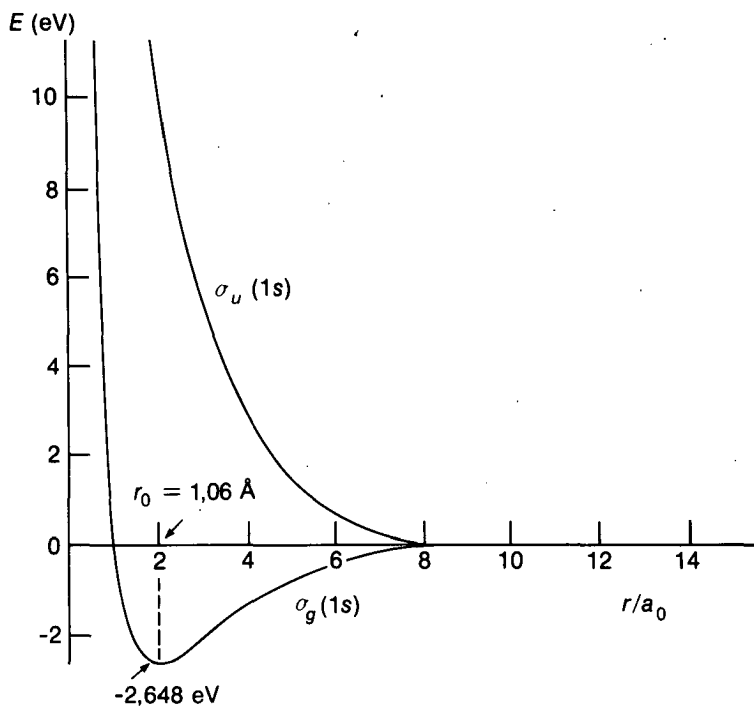


Fig. 75. Verloop van de potentiële energie van H_2^+ als functie van de afstand tussen de protonen voor de $\sigma_g(1s)$ - en $\sigma_u(1s)$ -toestanden.

ven door ψ_- niet het geval is. Dan staan de protonen bijna steeds 'bloot' tegenover elkaar en overheerst dus hun onderlinge afstoting. Het verschil tussen beide moleculetoestanden blijkt ook nog eens duidelijk als we deze golf functies gebruiken om de verwachtingswaarde van de potentiële energie van het systeem H_2^+ uit te rekenen. En dat doen als functie van de protonafstand r (zie fig. 75). In het ene geval (voor ψ_+) vertoont deze energie een duidelijk minimum dat lager ligt dan de energie van het ongebonden systeem $H^+ + H$ (dus voor $r = \infty$). Vandaar dat ψ_+ een *bindende* moleculeorbitaal wordt genoemd, aangegeven met $\sigma_g(1s)$. Terwijl ψ_- duidelijk een toestand beschrijft waarin geen moleculevorming kan optreden, zodat hierdoor een *niet-bindende* moleculeorbitaal bepaald wordt $\sigma_u(1s)$.

De belangrijkste les van dit H_2^+ -ion is dat we gezien hebben hoe we inderdaad, uitgaande van atoomtoestanden, moleculetoestanden kunnen vormen. En dat deze moleculetoestanden ook begrijpelijk maken waarom stabiele moleculen gevormd kunnen worden. Soms wordt wel gezegd dat in een molecule bepaalde elektronen door de samenstellende atomen moeten worden 'gedeeld'. Dit kwantummechanische beeld maakt duidelijk wat daar precies mee bedoeld werd.

4.4.2 Andere moleculen

Het principe is nu verder eigenlijk eenvoudig. Uitgaande van de mogelijke atoomorbitalen kun je moleculeorbitalen construeren en daar dan, met in achtneming van het Pauli-verbod, de elektronen van het molecule in onder brengen. En afhankelijk van het aantal gevulde, bindende en niet-bindende orbitalen zal er dan al of niet een stabiel molecule gevormd kunnen worden. Zo is H_2 gemakkelijk te vormen, want het tweede elektron kan nog in de bindende $\sigma_g(1s)$ -toestand, maar HeH blijkt niet gevormd te kunnen worden. Het derde elektron moet in een niet-bindende toestand en sluit daardoor moleculevorming uit. Fig. 76 laat enkele moleculeorbitalen zien, alsmede de atoomorbitalen waaruit ze gevormd kunnen worden.

In fig. 76 zijn alleen orbitalen getekend uitgaande van twee dezelfde atoomorbitalen. Dus voor homonucleaire moleculen als H_2 , N_2 of O_2 . Maar voor een molecule als $NaCl$ ligt de zaak weer anders. Dan verdwijnt de genoemde symmetrie uit de golf functies omdat de aantrekking van de elektronen door beide kernen niet langer even sterk is. In het geval van $NaCl$ bijvoorbeeld, blijkt het valentie-elektron van Na in een orbitaal terecht te komen die bijna helemaal rond het Cl -aatom gecentreerd is. Vandaar dat het begrijpelijk is te zeggen dat $NaCl$ gevormd wordt door een ionbinding, volgens

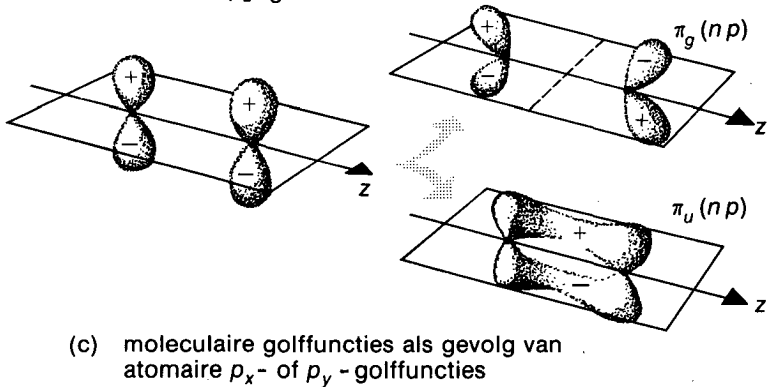
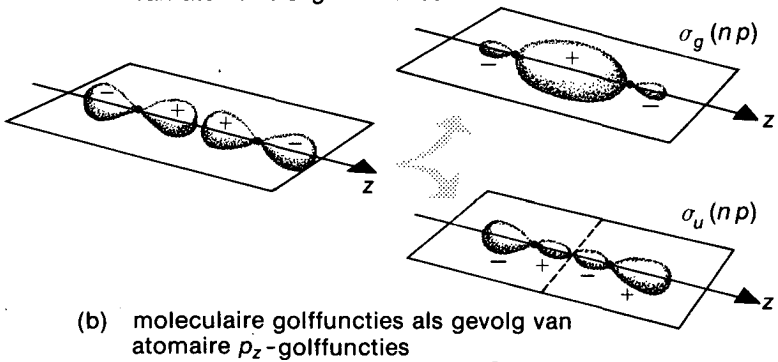
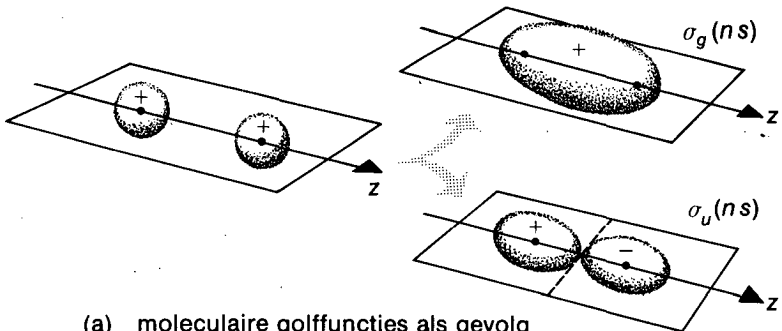


Fig. 76. Hoe moleculaire golffuncties gevormd kunnen worden uit een combinatie van atomaire golffuncties.

Na^+Cl^- . Dit is afwijking van de binding bij moleculen als H_2 of O_2 , die covalent genoemd wordt.

Moge het verklaringsprincipe van de moleculvorming dan nu eenvoudig zijn, de praktijk van het berekenen is dat meestal helemaal

niet. Zeker als het gaat om moleculen met veel atomen of elektronen. Gelukkig is het echter vaak een goede benadering om alleen op de elektronen te letten die in de buitenste schil van het atoom zitten, de zogenaamde valentie-elektronen dus. Van de andere elektronen nemen we dan aan dat die zo sterk aan hun respectieve atoomkernen gebonden zitten dat ze aan de molecuulvorming nauwelijks bijdragen. Ondanks deze drastische reductie blijft de precieze berekening van de moleculetoestanden van ingewikkelder moleculen toch nog vaak een gigantisch probleem, vandaar dat we ook hierop niet verder in zullen gaan. Alleen nog een paar illustrerende voorbeelden, en... een waarschuwing!

4.4.3 Model

Die waarschuwing betreft het *model*-karakter van de moleculeorbitalen. Er zit een zekere willekeur in de beschreven manier waarop in de theorie atoomorbitalen tot moleculeorbitalen worden gecombineerd. Het doel daarvan was natuurlijk om te begrijpen hoe molecuulvorming überhaupt kan optreden. En ook om een verklaring te vinden voor de verdere specifieke eigenschappen van moleculen. Voor dit doel kan de theorie van de moleculeorbitalen uitstekende diensten bewijzen. Op die manier bouw je in feite een *model* van een molecule dat voldoende verfijnd is om de beschikbare experimentele gegevens te verklaren. Maar de vraag of het molecule er *in werkelijkheid* nu ook zo uitziet, is natuurlijk een heel andere. Daarop weten we eigenlijk geen antwoord. Of misschien, beter gezegd, dat zal wel niet, gegeven het benaderingskarakter van de gevolgde procedure. Maar het is in ieder geval wel een procedure die 'werkt' (dezelfde opmerking kun je trouwens ook maken voor de atoomorbitalen).

4.4.4 Voorbeelden

Als voorbeeld kunnen we kijken naar het, voor het leven op aarde, zo belangrijke H_2O -molecule. Het O-atoom heeft acht elektronen. Twee daarvan zitten in de $1s$ -toestand; twee in de $2s$ -toestand en twee in de $2p_z$ -toestand.³⁵ De overblijvende twee zitten, ongepaard zoals dat heet, vanwege hun onderlinge afstoting ieder in een aparte toestand. De een in de $2p_x$ -toestand en de ander in de $2p_y$ -toestand. Juist deze twee laatste elektronen zijn bepalend voor de chemische bindingsmogelijkheden van het O-atoom.

Fig. 77 laat zien hoe het H_2O -molecule gevormd wordt. Je ziet hoe de ladingsverdeling in het H_2O -molecule asymmetrisch wordt. De H-elektronen 'schuiven' weg van hun H-kernen in de richting van

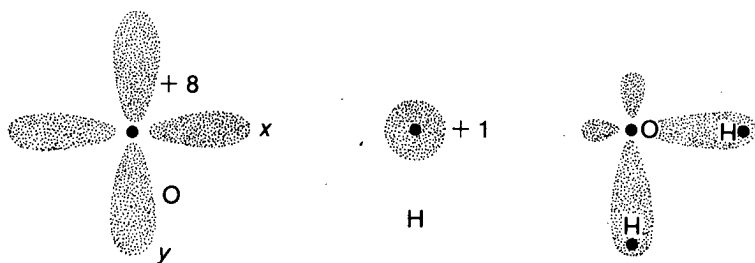


Fig. 77. De vorming van het watermolecule.

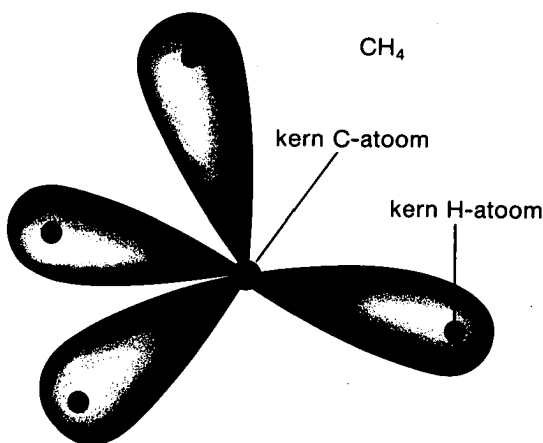


Fig. 78. Kwantummechanische voorstelling van het CH_4 -molecule.

het O-atoom. Net zoals de twee valentie-elektronen van het O-atoom iets 'opschuiven' in de richting van de H-kernen. Juist dank zij deze gerichte asymmetrische kansverdeling van de bindingselektronen vertoont water in veel opzichten zo'n bijzonder gedrag.

Een ander bekend molecule is methaan, CH_4 . Fig. 78 laat de ruimtelijke tetraëdische structuur van dit molecule zien. Ook hier ligt de achtergrond van de structuur in de betrokkenheid van p -orbitalen in het C-atoom bij deze bindingen. Omdat p -orbitalen, zoals we weten, immers een duidelijk niet-bolsymmetrische kansverdeling hebben. Anderzijds is de situatie van het CH_4 -molecule wel ingewikkelder dan van H_2O .

Uit de organische scheikunde weten we dat ook moleculen met lange koolstofketens gevormd kunnen worden. Fig. 79 laat aan de hand van het eenvoudigste voorbeeld, C_2H_6 (ethaan), zien hoe dit gebeurt.

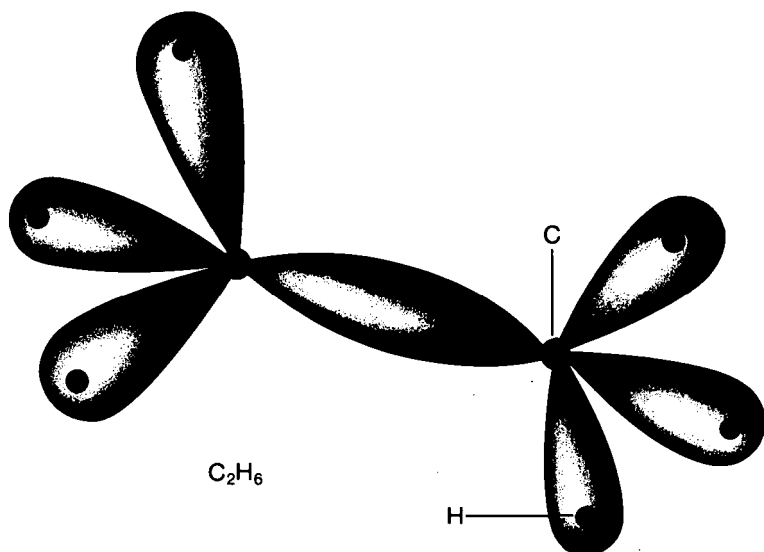


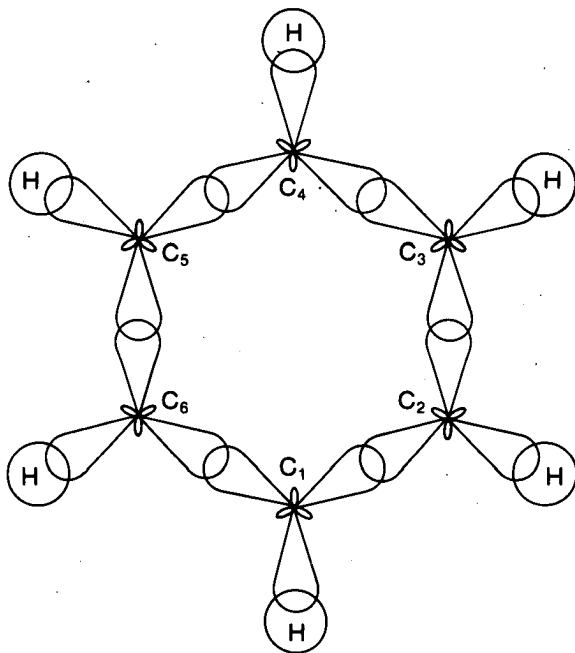
Fig. 79. Kwantummechanische voorstelling van het C_2H_6 -molecule.

Maar deze ketens kunnen nog veel langer worden. Fig. 80 toont bijvoorbeeld de bindingen in het benzeenmolecule C_6H_6 . Behalve de zogenaamde 'horizontale' σ -bindingen zie je dat ook zogenaamde π -bindingen ontstaan, uit 'verticaal staande' atomaire p -orbitalen. De elektronen in zo'n π -binding zijn niet meer gelokaliseerd rond één C-atoom, maar kunnen betrekkelijk gemakkelijk rondlopen langs de hele keten, zoals je uit de figuur kunt begrijpen. In feite is dit net zo'n situatie als we eerder gezien hebben bij het bespreken van de kleurstofmoleculen. Nu zie je waarom je in het geval van een lineaire keten de betrokken π -elektronen inderdaad redelijk kunt beschrijven met de benadering van elektronen die in een rechthoekige put gebonden zijn.

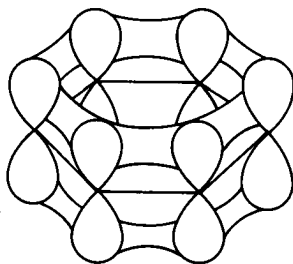
Tenslotte geeft fig. 81 een model van een klein stukje uit het immens 'grote' DNA-molecule. Alhoewel de situatie in dit molecule natuurlijk ontzettend veel ingewikkelder is dan bij al het voorgaande, zie je dat de basis voor het begrijpen van ook deze structuur in principe toch geleid is.

4.4.5 Eenheid in de natuur

En daarmee komen we als vanzelf tot een belangrijke conclusie. Je zou kunnen zeggen dat de kwantummechanica tegenwoordig niet alleen een duidelijk uitgangspunt verschaft voor het begrijpen van



σ -bindingen in benzeen



π -bindingen in benzeen

Fig. 80. De horizontale σ - en de verticale π -bindingen in het benzeenmolecule.

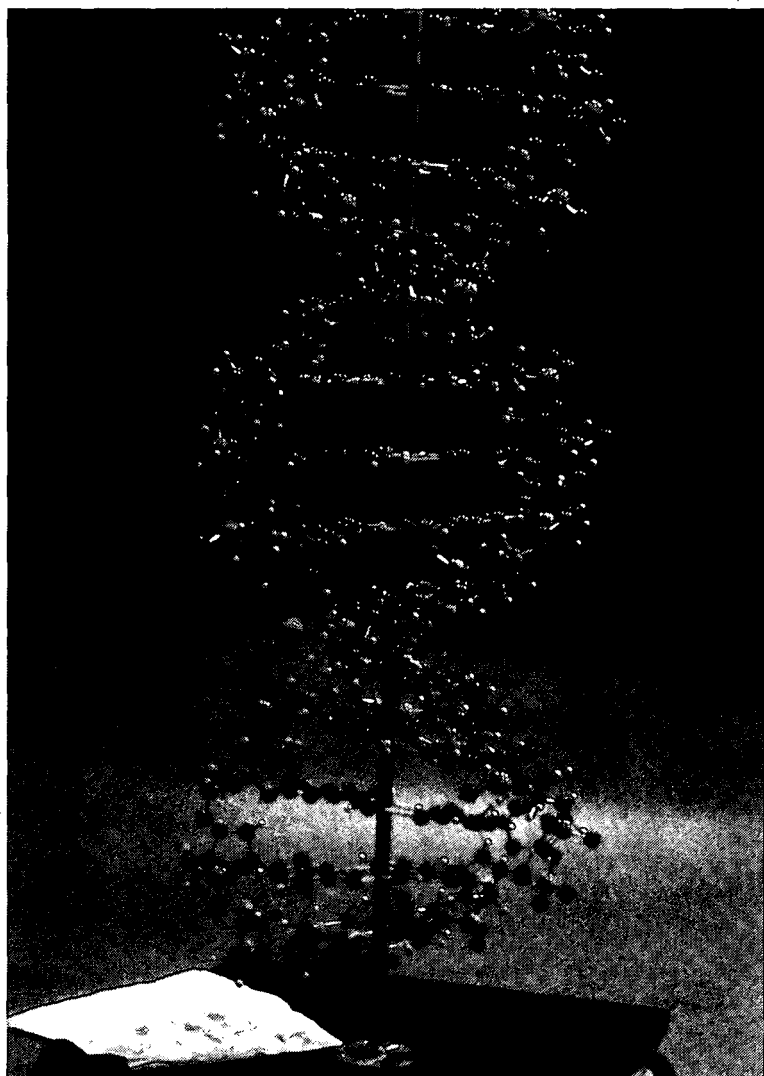


Fig. 81. Een model van een stukje uit het DNA-molecule.

natuurkundige processen, maar ook van veel *scheikundige* en zelfs *biologische* processen. Daarmee heeft ze een gemeenschappelijke basis gegeven aan wat nog niet zo lang geleden als drie verschillende takken van wetenschap werd gezien. Als een nieuwe vormgeving van

het oude idee van 'eenheid in de natuur'.

Zo heeft de kwantummechanica van de elektrische wisselwerking tussen atoomkernen en elektronen (natuurkunde!) ons niet alleen het principe, maar vaak ook de details voor het begrijpen van allerlei soorten molecuulvorming (scheikunde!). Zelfs met inbegrip van de macromoleculen die de basis vormen van alle mogelijke leven (biologie!).³⁶

4.4.6 Massaverschil

Daarbij dient nog op één essentieel feit te worden gewezen dat tot nu toe onder de tafel is gebleven. Dat is het grote massaverschil tussen kernen en elektronen. Atoomkernen zijn immers zo'n duizend tot tienduizend keer 'zwaarder' dan elektronen. Door deze grote massa-verhouding wordt het mogelijk dat de kernen betrekkelijk goed gedefinieerde vaste posities blijven innemen in een molecule. Bijgehouden door de lichte, zeer snel bewegende elektronen, die als een soort lijm fungeren die de moleculestructuur in stand houdt.

Bewegen de kernen dan helemaal niet? Jazeker, dat doen ze wel. Je kunt hun beweging het beste opvatten als een trilling en draaiing ten opzichte van elkaar. Maar zoals gezegd, vanwege hun grote massa zijn de kernen relatief traag en langzaam. En vandaar dat we ze ten opzichte van de veel sneller bewegende elektronen vaak in eerste benadering als praktisch stilstaand mogen beschouwen. Als we dat echter niet doen en hun beweging juist wel willen beschrijven, dan moet dat natuurlijk ook kwantummechanisch. En omdat zowel draaiingen als trillingen begrensde bewegingen zijn, zal het nu geen verbazing meer wekken dat uit oplossing van de betreffende Schrödinger-vergelijking volgt dat moleculen ook alleen in zeer bepaalde trillings- en draaiingstoestanden kunnen zitten. Met bijbehorende discrete energieniveaus, die echter vergeleken met de elektronenniveaus, zeer dicht bij elkaar liggen. Ook tussen deze trillings- en draaiingsniveaus zijn overgangen mogelijk, waarbij dan een corresponderend foton wordt uitgezonden of geabsorbeerd. De frequenties van deze fotonen liggen echter, vanwege de kleine energieverschillen tussen de niveaus, in het onzichtbare infrarode of zelfs microgolfgebied van het elektromagnetisch stralingsspectrum. Toch ligt hierin een belangrijke sleutel tot het verkrijgen van kennis omtrent de moleculestructuur. Analyse van deze moleculespectra biedt namelijk de mogelijkheid om betrekkelijk direct experimentele gegevens te krijgen omtrent de atoomafstanden in het molecule en de krachten daartussen. Maar voor de verklaring van de chemische binding tussen de atomen moeten we, zoals gezegd, toch vooral naar de snelle 'lijmelektronen' kijken, en juist niet naar de langzame

kernbeweging. Zo helpt die grote massaverhouding ons om de verschillende belangrijke zaken uit elkaar te rafelen. De kernen vormen als het ware het zware moleculaire skelet, bijeengehouden door het lichte spierweefsel van de elektronen. Op die manier is men in staat gebleken de moleculaire architectuur te doorgronden. Een architectuur die opnieuw, zowel op zichzelf als door zijn bouwstenen, een manifestatie is van het belang van staande-golfpatronen. En daarmee ook opnieuw een manifestatie van de 'Urformen der Natur'.

4.4.7 Van H tot DNA

Laten we de hoofdlijn nog eens samenvatten. Als een elektron opgesloten zit in de kleine Coulomb-ballon van het H-atoom, *moet* het wel in een zeer sterke kwantumbeweging zijn. Het veroorzaakt als het ware een continue 'eendeeltjeverkeerschaos'. Maar als er een tweede aantrekkende kern bijkomt, neemt de speelruimte toe en dienovereenkomstig kan de snelheid afnemen. Het elektron 'wordt rustiger'. De elektronengolven spreiden zich dan uit over twee kernen, de kinetische energie wordt kleiner en de hele configuratie wordt stabiel. Zo kan uit twee kernen en hun elektronen een molecule worden gevormd. De verschillende situaties van de atomaire golfpatronen met $l \neq 0$ geven aanleiding tot verschillende karakteristieke bindingsrichtingen. Zo zien we hoe deze fundamentele atomaire golfpatronen ook een verklaring bieden voor de ingewikkelde moleculaire bouwstenen van het leven, van de sneeuwvlok tot het eiwitmolecule of de DNA-spiraal. De grote macromoleculen van enzymen bijvoorbeeld, hebben patronen die juist complementair zijn aan die van eenvoudige voedselmoleculen. Daardoor zijn zij in staat deze voedselmoleculen samen te binden en als katalysator op te treden voor de opbouw van grotere organische structuren.

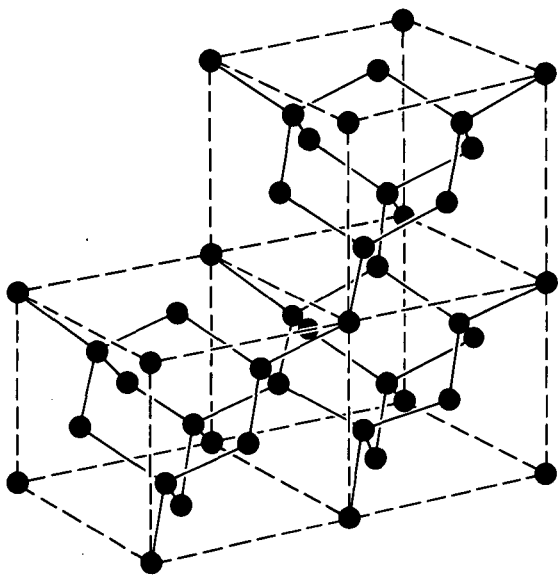
Ondanks de in die tijd nog niet zo omvangrijke kennis van de bouw van grote moleculen stelde Schrödinger zichzelf reeds in het begin van de jaren veertig de vraag: 'Wat is leven?' De vraag op zich was natuurlijk niet nieuw, maar wel dat hij het antwoord zocht in de richting van de kwantummechanica. Zijn verwondering kwam voort uit enerzijds de opmerkelijke stabiliteit in de natuur en anderzijds uit het natuurlijke vermogen tot reproduceerbare verandering. Enerzijds produceert de natuur steeds opnieuw dezelfde vormen, en anderzijds is er de evolutionaire ontwikkeling van de soorten. Daarmee was Schrödinger een van de pioniers van wat nu wel als een van de meest veelbelovende onderzoeksgebieden wordt gezien: de moleculaire biologie. Schrödinger ging uit van het experimentele gegeven dat het erfelijk materiaal van levende wezens, de zogenaamde genen, microscopische afmetingen heeft. Deze genen

bevatten op een of andere manier een onvoorstelbare hoeveelheid informatie en zijn daarenboven generaties lang opmerkelijk stabiel. Echter, klassieke systemen van zulke microscopische afmetingen zouden deze stabiliteit nooit kunnen vertonen. Alle informatie zou in de loop van de tijd onvermijdelijk verloren gaan ten gevolge van de onvermijdelijke, willekeurige Brown-beweging, waaraan microscopische deeltjes nu eenmaal onderhevig zijn. Daarom concludeerde Schrödinger dat genetisch materiaal noodzakelijkerwijs een kwantumsysteem moest vormen. Dan zou zijn stabiliteit een gevolg kunnen zijn van de stabiliteit van staande-golfpatronen. En geconcentreerde energiepakketjes zouden dan mutaties kunnen induceren: erfelijke veranderingen in het genetische materiaal; met twee mogelijkheden: degeneratie en evolutie. Daarmee suggereerde Schrödinger dat een biologische mutatie niets anders was dan een kwantumsprong van het ene golfpatroon naar het andere. Natuurlijk was deze voorstelling van zaken wat al te simpel. Toch is ze in essentie door de loop van de geschiedenis bevestigd, en wel een jaar of twee later met de ontdekking van de DNA-spiraal door Watson en Crick. Een ontwikkeling, in gang gezet door Schrödinger, die waarschijnlijk nog veel verrassingen voor de mensheid in petto zal hebben. Helaas zowel ten goede als ten kwade.

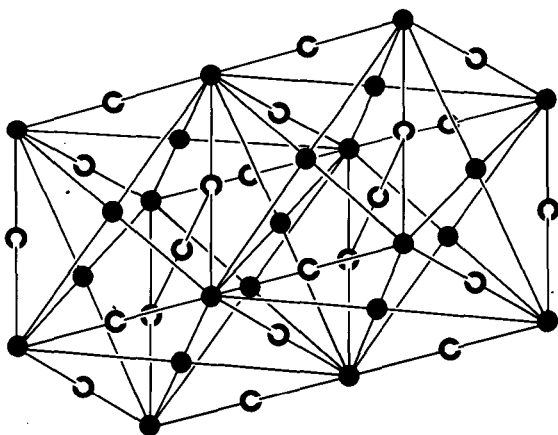
4.5. Over vaste stoffen, kernen en de kwantumladder

4.5.1 Vaste stoffen

Een volgende halteplaats op onze weg door de materie zijn de vaste stoffen. Hoe kunnen we begrijpen dat vaste stoffen überhaupt gevormd worden en waarom zijn ze zo verschillend in eigenschappen? De stap van moleculen naar vaste stoffen lijkt enorm groot. Immers, het aantal atomen in een vaste stof is van de orde van 10^{24} per cm^3 . Een gigantisch aantal dat niet te vergelijken is met het aantal atomen in de 'simpele' moleculen die we tot nu toe bekeken hebben. Hoe kun je in vredesnaam verwachten hier ooit iets van te kunnen beschrijven als drie deeltjes al zo'n probleem geven. Voor al die deeltjes kan toch nooit een Schrödinger-vergelijking opgeschreven worden? Inderdaad, dat kan niet, maar gelukkig hoeft dat ook niet. Het blijkt dat in de meeste vaste stoffen de atomen of atoomgroepen keurig netjes regelmatig gerangschikt zijn. Die keurige regelmaat heet een kristalrooster (zie fig. 82). Daardoor wordt het vaste-stofprobleem ontzettend vereenvoudigd. Immers, in plaats van dat je alle atomen in een stuk vaste stof moet bekijken, is het om de structuur en eigenschappen te kunnen begrijpen, voldoende om je te beperken tot het bestu-



diamantrooster



NaCl-rooster

Fig. 82. Het diamantrooster en het NaCl-rooster.

deren van een *rooster cel*. Dat is de fundamentele *eenheid* in de structuur, die zich steeds opnieuw herhaalt. Ook de eigenschappen herhalen zich dus steeds opnieuw van cel tot cel. Tenminste als er geen zogenaamde roosterfouten optreden. Dus als we maar eenmaal de eigenschappen en bouw van een rooster cel kunnen begrijpen, hebben we het vaste-stofprobleem al een heel eind opgelost. Althans voor zover die stoffen natuurlijk ook inderdaad een kristalstructuur bezitten.

Vanuit kwantummechanisch standpunt gezien is er eigenlijk geen principieel verschil tussen het bepalen van de structuur van vaste stoffen en die van moleculen. In beide gevallen gaat het om het vinden van een stabiele configuratie van kernen en elektronen die onderworpen zijn aan hun elektromagnetische wisselwerkingen. En zoals gezegd, wordt daarbij het grote verschil in aantal atomen in zekere zin gecompenseerd door de periodieke roosterstructuur. In grote lijnen kunnen we dan ook hier de resultaten uit de vorige paragrafen herhalen. Het gaat opnieuw om het vinden van de juiste, toegelaten staande-golfpatronen! Daarbij is ook hier het grote massaverschil tussen kernen en elektronen uitermate belangrijk. De relatief trage kernen vormen het skelet, bijeengehouden door de snelle 'lijm'-elektronen.

Dit verschil in massa heeft ook tot gevolg dat we opnieuw, in goede benadering, afzonderlijk kunnen zoeken naar de staande-golfpatronen voor de kernbeweging en voor de elektronenbeweging. Want de kernen staan uiteraard ook in een vaste stof niet helemaal stil in de ruimte, maar trillen als het ware om een evenwichtstand. Omdat alle kernen via de elektrische krachtwerkingen met elkaar in verbinding staan, plant een trilling van een enkele kern zich altijd voort door het hele kristal. Vandaar dat het geen zin heeft te kijken naar de trilling van afzonderlijke kernen, maar dat je beter naar het hele kristal tegelijk kunt kijken. We noemen dat dan ook roostertrillingen. Je zou het kunnen vergelijken met de trillingstoestand van een heleboel balletjes die allemaal met veertjes aan elkaar gebonden zitten (zie fig. 83a). Het hele 'collectief' van kernen staat gezamenlijk op alle mogelijke manieren te trillen. Met de nadruk op *mogelijk*, want omdat de beweging van de kernen in het kristal uiteraard sterk begrensd is, is hun bewegingsenergie gekwantiseerd. Deze collectieve trillingspatronen, of kwantummechanische staandegolfpatronen, worden fononen genoemd. Ze spelen bijvoorbeeld een belangrijke rol bij het begrijpen van de warmte-eigenschappen van vaste stoffen.

Maar voor de elektronbeweging kunnen we de roostertrillingen in eerste instantie verwaarlozen. De elektronen bewegen dan in de gezamenlijke stilstaande Coulomb-putten van alle kernen te zamen

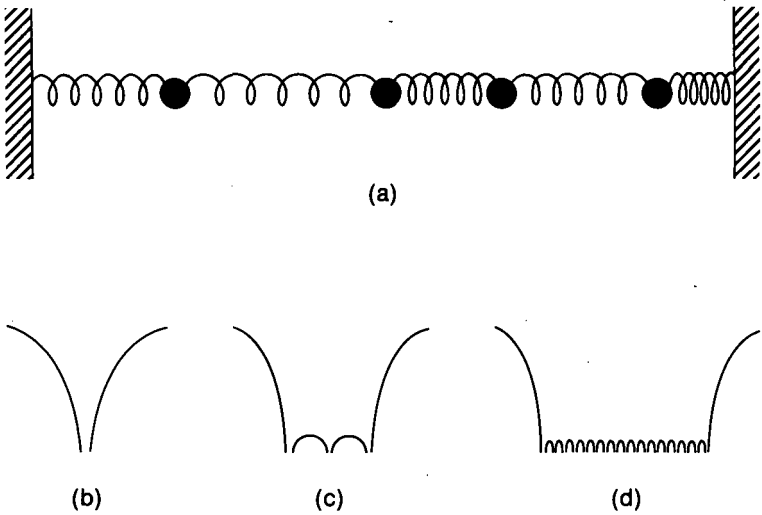


Fig. 83. De atomen in een kristal zijn via de Coulomb-krachten aan elkaar gekoppeld. Je kunt je dat voorstellen als een rij balletjes, gekoppeld door veertjes. Met als gevolg dat als er één gaat trillen, ze dat allemaal gaan doen (a). In (b), (c) en (d) is het verloop van de potentiële energie getekend van een elektron in de gezamenlijke Coulomb-putten van resp. 1, 3 en 17 stilstaande ionen.

(zie fig. 83b-d). Het probleem is nu om in deze potentiële-energieputten de goede golfpatronen voor de elektronen te vinden met de bijbehorende energiewaarden. En dat alles natuurlijk met inachtneming van het Pauli-principe. Het probleem is simpel samen te vatten, maar in werkelijkheid opnieuw moeilijk op te lossen. Fig. 84 laat een deel van de oplossing zien voor een 'rooster' van vier(!) gelijke atomen. De elektronen die de laagste energieniveaus bezetten, 'diep in de Coulomb-putten', zijn nog betrekkelijk sterk gebonden aan hun 'eigen' kernen. Hun golf functies zijn sterk gepiekt rond de kernen, met maar weinig overlap. Voor de *hogere* niveaus wordt de overlap van de golf functies steeds groter. Dat wil zeggen dat de elektronen in die niveaus niet meer heel sterk aan één kern gebonden zitten, maar al door het hele kristal kunnen worden aangetroffen. Voor de *hoogste* niveaus is het zelfs zo dat de elektronen praktisch helemaal vrij door het kristal kunnen bewegen. Alleen aan de randen van het kristal ontmoeten ze een potentiaalbarrière die ze tegenhoudt (dus bijna net zo als in een rechthoekige put). In fig. 84 is ook aangegeven dat de energieniveaus in groepjes bij elkaar komen te liggen, de zogenaamde banden. Hoe de niveaus en banden precies liggen, hangt natuurlijk af van de specifieke atomen waaruit

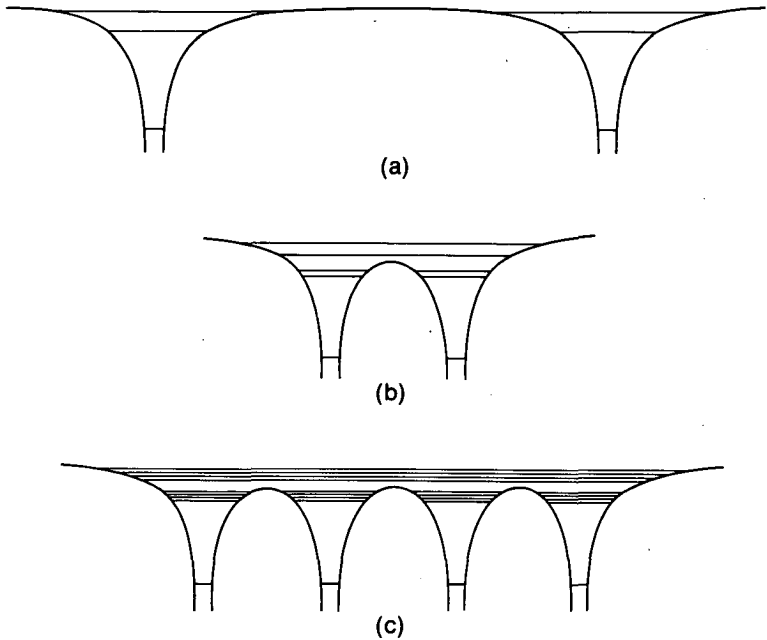


Fig. 84. Energieniveaus van: (a) twee geïsoleerde atomen; (b) dezelfde atomen als in (a), maar nu gebonden in een tweeatomig molecule; (c) vier van dezelfde atomen als in (a), maar nu gebonden in een eendimensionaal kristal. Merk op dat de laagste energieniveaus nauwelijks opsplitsen omdat de atoomgolffuncties van deze niveaus elkaar nog nauwelijks overlappen. Dit in tegenstelling tot de functies van de hogere niveaus.

het kristal is opgebouwd. Het algemene beeld is echter als in fig. 84. Het hangt dan verder af van het aantal aanwezige elektronen welke niveaus en banden al of niet gevuld worden. Dat is vooral belangrijk voor het begrijpen van het elektrische geleidingsvermogen van vaste stoffen. De bandentheorie van de elektronen heeft het mogelijk gemaakt om te begrijpen waarom sommige stoffen, bijvoorbeeld metalen, zo goed elektriciteit en warmte geleiden. Terwijl andere stoffen, isolatoren, dat juist heel slecht doen. Ook maakt deze bandentheorie duidelijk dat sommige stoffen bij hogere temperatuur wel, maar bij lage temperatuur niet geleidend zijn. Dit zijn de zogenaamde halfgeleiders. Daarmee heeft de kwantummechanische theorie van de vaste stof op essentiële wijze bijgedragen tot een van de belangrijkste ontwikkelingen van deze eeuw: de elektronica-explosie, met alle voor- en nadelen voor de mensheid die daaraan vastzitten. Tot zover enkele woorden over vaste stoffen.

4.5.2 Kernen

In het voorgaande zijn we – uitgaande van het H-atoom – uiteindelijk – via andere atomen, kleine en grote moleculen – terechtgekomen bij vaste stoffen. Maar we hadden natuurlijk ook de andere kant op kunnen gaan. Naar de atoomkernen of naar de bouwstenen daarvan, de zogenaamde elementaire deeltjes. Dat dit niet gebeurd is, is vooral om redenen van persoonlijke voorkeur. Het leek me niet alleen eenvoudiger, maar ook relevanter om voorbeelden te kiezen die meer aansluiten bij de voor iedereen ‘grijpbare’ wereld. Maar daarover valt natuurlijk te twisten.

Anderzijds is er ook gewoon de complicatie dat in de esoterische wereld van kernen en elementaire deeltjes toch weer aparte, specifieke problemen hun rol spelen. Al was het bijvoorbeeld alleen maar de nog beperkte kennis van de krachten die de kerndeeltjes bij elkaar houden. Dit in tegenstelling tot de zeer goed bekende Coulombkrachten bij atomen en moleculen. Als gevolg van het verschil in deze krachten spelen de kernprocessen zich in een heel ander energiegebied af. In de ‘gewone’ kernfysica gaat het om energieën in de orde van 1 MeV (= 10^6 eV) tot 100 MeV. Terwijl atomaire processen ruwweg plaatsvinden in het gebied van zo’n 0,1 eV tot 100 eV. Maar er bestaat ook een grote analogie tussen atoom- en kernfysica. Net zoals een atoom wordt opgevat als een gebonden systeem van een kern met elektronen, kun je een kern opvatten als een gebonden systeem van protonen en neutronen. Voor zo’n systeem kun je weer zoeken naar stationaire toestanden, met bijbehorende energieniveaus (zie fig. 85). Ook de kerndeeltjes hebben weer een baan- en spinimpulsmoment waarvoor het Pauli-principe geldt. Ook zijn er weer schillen te ontdekken die al of niet helemaal gevuld zijn. En aangeslagen toestanden, die kunnen vervallen onder uitzending van fotonen, die ditmaal dan wel in het γ -gebied van het spectrum liggen. Zelfs rotatie- en vibratieniveaus, als bij moleculen, zijn ook voor kernen, berekend en gemeten. Toch klopt het hele beeld tot nu toe minder mooi dan bij atomen het geval is. Vandaar ook dat er nog steeds met verschillende kernmodellen naast elkaar gewerkt wordt, die ieder hun eigen specifieke sterke, maar ook zwakke punten hebben.

Aanzienlijk groter worden de problemen nog als we opnieuw een energiestap hoger gaan. Als we ons bijvoorbeeld afvragen welke deeltjes eigenlijk ten grondslag liggen aan alle materie. Dan zitten we in het gebied van de ‘elementaire deeltjes’, de hoge-energiefysica, waar de wijzer op de energieschaal in het gebied van de GeV’s staat (10^9 eV). En liefst steeds maar hoger. In dit gebied kunnen we de

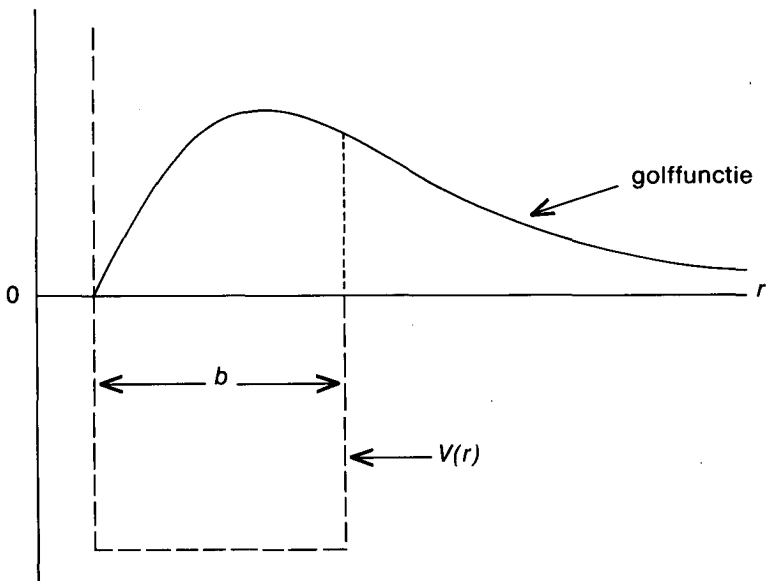


Fig. 85. De golffunctie van de grondtoestand van het deutron. $V(r)$ geeft het benaderde verloop van de potentiële energie van een proton in de buurt van een neutron.

eenvoudige Schrödinger-theorie niet meer toepassen. Die schiet dan aan alle kanten te kort. En niet alleen omdat de krachten die in dat energiegebied bepalend zijn, nog slecht bekend zijn. Maar onder andere ook omdat bij deze energieën de natuur uitsluitend relativistisch beschreven mag worden. Dat wil zeggen dat de theorie dan moet voldoen aan de uitgangspunten van de relativiteitstheorie van Einstein (wat voor de Schrödinger-vergelijking niet het geval is). Bijvoorbeeld omdat ook deeltjes zonder rustmassa beschreven moeten kunnen worden, zoals fotonen. Ook daarvoor is de simpele Schrödinger-vergelijking ontoereikend. Toch blijft gelden dat juist ook in dat 'elementaire' gebied getracht wordt de natuurbeschrijving terug te brengen tot eenvoudige 'mooie structuren'. Tot nog fundamentele 'Urformen der Natur'. Zij het dan dat de schoonheid van deze 'Urformen' – nog sterker dan bij de voorgaande – vooral gezocht moet worden in de 'doorzichtige klaarheid van de wiskunde', zoals het eerdere citaat van Heisenberg al voorspelde!

4.5.3 De kwantumladder

Dit brengt ons tot de afsluiting van dit hoofdstuk. Tot een afronding van de 'korreltjes van de oogst'. Een grote oogst, zoals naar ik hoop de korreltjes hebben laten zien. Als slot volgt hier opnieuw een citaat van Weisskopf.¹ Hij introduceert daarin het idee van de kwantumladder. Het idee dat de plaats op de energieschaal de bepalende factor is voor de specifieke stabiliteit en identiteit van elke mogelijke materievorm. Een idee gebaseerd op het kwantumkarakter van alle materie.

Ladder op

'We arrive at a characteristic sequence of conditions which we may call the "quantum ladder".'

At very low temperatures, the molecules of every substance form one big unit, a tightly bound crystal, in which one part is identical to any other. If we warm it to a higher temperature, melting or evaporation sets in and liquids or gases result. In a gas such as air at normal temperature, each molecule moves for itself in differing paths, bouncing against one another in irregular motion. The motions of the molecules are no longer alike; they are constantly changing, and they correspond to what we expect on the basis of classical mechanics. The molecules themselves, however, are still identical, one to the other. They interact as do inert billiard balls. The collision energies are not high enough to destroy their quantum state.

At still higher temperatures, the energy of collision surpasses the excitation energies of the molecules. The internal motion of the atoms and electrons participates in the exchange of energy. These are the temperatures at which the gas begins to glow and emit light. If still more energy is supplied, the molecules split into atoms, and further on the electrons are torn off the atoms. Then the atoms lose their individuality and specificity. Electrons and atomic nuclei move freely and in random fashion; no two electrons move exactly alike. This state of affairs occurs at temperatures as high as exist in the interior of stars. It is possible, however, to create similar conditions in the laboratory for a small number of atoms. This is the object of "plasma physics". At those energies the atomic nuclei are still in their ground states. They are still identical and specific, whereas the atoms are already reduced from their specific qualities to unspecific random behavior. Only if the energies of millions of electronvolts are fed into the system, as is done in our big particle accelerators, are the higher quantum states of the nucleus excited or the nucleus even disintegrated into its constituents, the protons and the neutrons. Once this is done, the nucleus also has lost its quality and its specific properties, and has become a classical

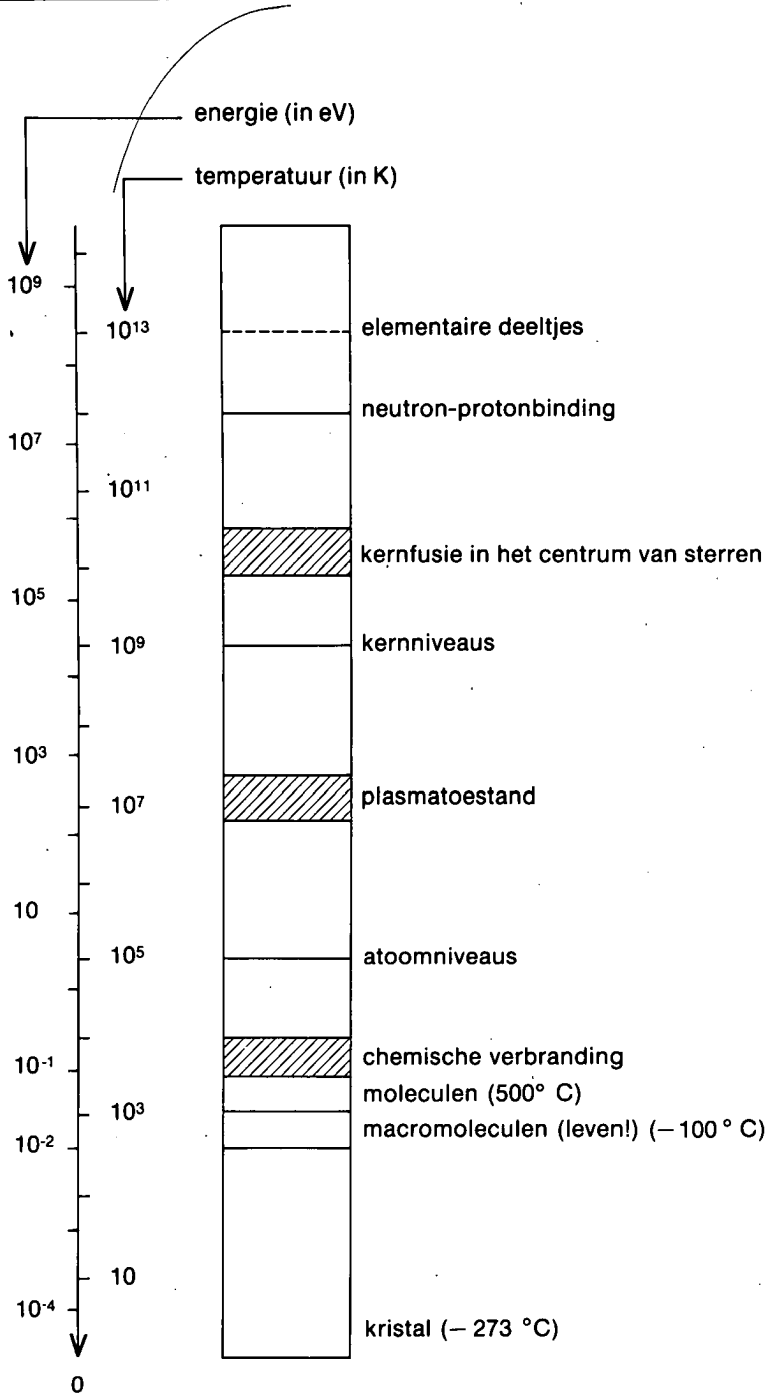


Fig. 86. De kwantumladder.

gas of protons and neutrons. The newest giant accelerators are about to pour so much energy into the protons and neutrons themselves that the latter will begin to show internal structure and differentiation, and thus lose their innate identity. This development may advance toward new and unknown structures if the energy is further increased – or it may stop at some point, without yielding any new particles. We do not know and probably will never know unless we try it out.

The quantum ladder has made it possible to discover step by step the structure of the natural world.'

En ladder af

'Let us now descend the quantum ladder, starting at the highest step known today. This may be a gas of protons, neutrons, and electrons at extremely high temperatures with kinetic energies of many million electron volts. Not much individuality can be found under these conditions, except for the three elementary particles. Their motion is random and hence without any special order. At lower temperatures, say with kinetic energies of less than a million electron volts, the protons and neutrons assemble and form atomic nuclei. Much more specificity now enters into the picture. There are many possible atomic nuclei, the nuclei of the ninety-two elements and their isotopes, each a well-defined individual state.'

Om tenslotte te eindigen met:

'Because of the large length of the macromolecules, the number of possible quantum states is enormously greater than in the case of simple atoms or molecules, and their forms are much more intricate and complicated. This is reflected by the great variety of living species. The existence of life requires that the temperature must be low enough to allow the formation of the macromolecules, but it also requires temperatures high enough for the supply of energy necessary for life processes. If we proceed downward on our quantum ladder to zero temperature, life decays, and all matter forms a big crystal in which many of the existing varieties are preserved but are frozen into inactivity. Everything is then found in its lowest state, a state of high specificity but without any change or motion. This is the stage of death.'

5. Tenslotte

'Want in veel wijsheid ligt veel verdriet, en als iemand kennis vermeerdert, vermeerdert hij smart.' – PREDIKER 1 : 18

5.1. Terugblik

Dit boek is begonnen met een stukje geschiedschrijving. Het ging daarbij om een korte schets van de problemen die zijn voorafgegaan aan het ontstaan van de kwantummechanica. Deze problemen waren, zoals we gezien hebben, niet alleen groot in aantal, maar ook groot in complexiteit. Je zou dan ook kunnen zeggen dat de weg die geleid heeft tot de kwantummechanica, meer overeenkomst vertoont met de kronkelweg in een doolhof dan met de rechte weg die de kortste verbinding vormt tussen twee punten.

In het tweede hoofdstuk zijn we nader ingegaan op het gedrag van de wereld op atomaire schaal. We hebben daartoe het tweespletenexperiment besproken, met kogeltjes en watergolven, en met fotonen en elektronen. Dat bleek nogal verrassende resultaten op te leveren. Reden waarom we elektronen zijn gaan 'bekijken'. En toen zagen we die elektronen interfereren of juist niet, al naar gelang dat we de elektronen zelf wél of niet gezien hadden. Dat leidde ook tot een bespreking van de onzekerheidsrelaties.

Daarna is het kwantummechanisch formalisme aan bod gekomen, dat het doel heeft dit merkwaardige atomaire gedrag te beschrijven. Dit formalisme is in zijn eenvoudigste vorm gepresenteerd en toegepast op een 'pathologisch putdeeltje'. Deze toepassing bleek toch wel zijn nut te hebben. Niet alleen omdat zo'n putdeeltje dienst kan doen als ruw model voor reële fysische systemen, maar ook omdat we zo een aantal algemeen geldige principes op eenvoudige wijze konden demonstreren.

Tenslotte is geprobeerd een beeld te schetsen van de verworvenheden van de kwantummechanica. Dank zij deze theorie, zoals die zich sinds de beginjaren in al zijn complexiteit ontwikkeld heeft, hebben we nu een goed inzicht in de bouw en eigenschappen van alle materie. Van vaste stoffen tot elementaire deeltjes toe. Waarbij nogmaals benadrukt dient te worden dat het stukje van het formalisme dat we hier enigszins hebben kunnen bespreken, niet meer is dan een tipje van de sluier. Maar hopelijk genoeg om iets te kunnen voorstellen bij wat de rest van de sluier verborgen houdt.

In de drie hoofdstukken na hoofdstuk I is de historische lijn bewust losgelaten. De ontstaansgeschiedenis van een theorie is nu eenmaal vaak een heel andere dan de manier waarop een theorie zich achteraf het best in zijn principes laat samenvatten en presenteren. Toch zit er aan zo'n presentatie achteraf ook een groot gevaar. Het lijkt dan soms net of die theorie vanaf het begin aan alle betrokkenen volledig duidelijk is geweest. Alsof ze als het ware in haar geheel en momentaan aan de mensheid geopenbaard is geworden. Maar zo rechtlijnig gaat dat niet. Vandaar dat ik dit boek wil afronden met het plaatsen van nog enkele historische en filosofische kanttekeningen. Zonder daarbij overigens ook maar enige volledigheid na te streven.³⁷

5.2. Historische kanttekeningen

Historisch gezien is de kwantummechanica eigenlijk niet gestart met de Schrödinger-theorie zoals die in haar eenvoudigste vorm is beschreven, maar met de zogenaamde matrixmechanica van Heisenberg. Deze matrixmechanica, die stamt uit 1925, leent zich echter minder voor een elementaire uiteenzetting dan de Schrödingertheorie. In zijn theorie introduceerde Heisenberg wel het belangrijke idee dat de kwantummechanica alleen uitspraken hoort te doen over grootheden die ook waarneembaar zijn. Bijvoorbeeld voor zoiets als 'de baan van een elektron' was in zijn theorie geen plaats omdat, zoals we inmiddels gezien hebben, zo'n baan toch nooit waarneembaar kan zijn. Het heeft dan ook geen zin daarover te praten, volgens Heisenberg. Zijn theorie leek heel veelbelovend; diverse problemen kon hij er goed mee beschrijven, maar ze bleek toch één eigenaardigheid te bevatten waar ook Heisenberg zelf niet zo goed raad mee wist. Zelf zei hij er later over dat hij soms heeft gedacht dat hij zijn werk maar beter had kunnen verbranden. Maar gelukkig heeft hij dat – dank zij de steun van anderen, waaronder met name Pauli – niet gedaan. Deze eigenaardigheid die hem aanvankelijk zo verontrustte, bleek trouwens uit te groeien tot een formulering van zijn onzekerheidsrelaties. Geen wonder dus dat dit in eerste instantie wat vreemd leek.

De natuurkundewereld was nog maar nauwelijks gekomen van de schok die Heisenbergs matrixmechanica veroorzaakte, of Schrödinger publiceerde zijn golfmechanica (1926). In eerste instantie leken beide theorieën totaal verschillend, hoewel ze uiteraard voor hetzelfde doel waren ontwikkeld. Heisenberg schreef bijvoorbeeld in een brief aan Pauli:

'Hoe meer ik nadenk over het fysische deel van Schrödingers theorie, des te afschuwelijker [desto afscheulicher] lijkt ze mij.'

Terwijl Schrödinger op zijn beurt zeer veel moeite had met het accepteren van de wel zeer abstracte matrixalgebra van Heisenberg. Hij schreef daarover:

'Ik werd afgeschrikt, zo niet afgestoten, door wat mij overkwam als een nogal moeilijke manier van hogere algebra, die elke aanschouwelijkheid te boven ging.'

In één jaar tijd publiceerde Schrödinger zeven fundamentele verhandelingen, waarin je bijna het volledige wiskundige formalisme van de golfmechanica kunt vinden zoals dat ook nu nog onderwezen wordt. Zoals eerder gezegd, Schrödinger was sterk geïnspireerd door De Broglies werk, evenals door de grote analogie tussen het zogenaamde Hamilton-formalisme van de klassieke mechanica en het principe van Fermat in de geometrische optica.

In eerste instantie dacht Schrödinger aan een atoom als een soort 'trillend vlies' dat zich tot in het oneindige uitstrekt en 'klopt in het ritme' van de frequenties van Bohr. Het deeltje was in de voorstelling van Schrödinger eigenlijk volledig verdwenen. De wereld was bevolkt met golven en niets anders dan golven. Een deeltje was, in zijn opvatting, niets anders dan een 'groepje golven', of zoals dat ook wel genoemd wordt: een golfpakket. Na de schok van de wel zeer abstracte matrixmechanica was Schrödingers terugkeer tot zulke 'klassiek aandoende' dingen als golven voor velen een verademing. Einstein was enthousiast; Planck las Schrödingers werk, naar hij zei, zoals een kind een puzzel, en Born concludeerde dan ook later terecht:

'Was gibt es Grossartigeres in der theoretischen Physik als seine [Schrödingers] ersten sechs Arbeiten zur Wellenmechanik.'

Het enthousiasme van mensen als Einstein, Planck en De Broglie, maar ook van Schrödinger zelf, had ook een diepere reden. Dat had te maken met het geloof van deze mensen dat veranderingen in de natuur zich continu moeten voltrekken en niet op de vreemde discontinue manier die gesuggereerd werd door de kwantumsprongen in een atoom. Of, zoals Einstein zei, een gevoel van scepsis bij het idee dat het kwantumprobleem opgelost zou moeten worden door het continuüm op te geven. Schrödingers golftheorie leek dit geloof weer terechte grond onder de voeten te geven. Schrödinger zelf schreef bijvoorbeeld:

'Het is nauwelijks nodig aan te geven hoeveel meer bevredigend het zou zijn om een kwantumovergang op te vatten als een energieverandering van de ene trillingstoestand naar een andere, dan door ze te beschouwen als een sprong van elektronen. De verandering van trillingstoestanden kan behandeld worden als een proces dat continu plaatsvindt in ruimte en tijd en dat net zo lang duurt als het emissieproces.'

Ook was Schrödinger zeer gecharmeerd van het feit dat zijn theorie

automatisch gekwantiseerde energiewaarden selecteert. Daarmee was Bohrs uit de lucht gevallen postulaat van stationaire toestanden overbodig geworden. Maar hoe zat het nu met Heisenbergs matrixmechanica, die zeer sterk geënt was op de begrippen 'deeltje' en 'discontinuïteit'? Was die meteen van de tafel geveegd? Nee, want het merkwaardige was zelfs dat beide theorieën, ondanks de grote verschillen in uitgangspunten, eigenlijk identiek bleken te zijn. Dat wil zeggen, Schrödinger slaagde er al spoedig in aan te tonen dat beide theorieën via bepaalde transformatieregels *wiskundig* in elkaar waren over te voeren. Maar daarmee waren de verschillen in uitgangspunten nog niet verdwenen, hoewel Schrödingers golftheorie aanvankelijk wel de overhand leek te krijgen.

Aan de andere kant stonden echter Heisenberg en Bohr, waarbij vooral de laatste een geducht opponent van Schrödinger bleek te zijn. Heisenberg schreef hierover later bijvoorbeeld het volgende:

'In juli bezocht ik mijn ouders in München, en bij die gelegenheid woonde ik een voordracht bij die Schrödinger voor de Münchener fysici over zijn werk hield. Daar hoorde ik voor het eerst de interpretatie die Schrödinger aan zijn mathematisch schema van de golfmechanica wilde geven, en ik was bijna wanhopig over de begripsverwarring die naar mijn idee hierdoor in de atoomtheorie zou ontstaan. Helaas had mijn poging om in de discussie de begrippen weer te ordenen geen enkel succes. Mijn argument dat men met de interpretatie van Schrödinger niet eens meer de stralingswet van Planck zou kunnen verklaren, overtuigde niemand en Wilhelm Wien, de experimentele fysicus van de universiteit van München, antwoordde tamelijk scherp dat er nu maar eens een einde moest komen aan de kwantumsprongen en aan de hele atoommystiek en dat de moeilijkheden die ik noemde, wel snel door Schrödinger zouden worden opgelost. Of ik Bohr over deze gebeurtenissen geschreven heb, weet ik niet meer, maar in ieder geval nodigde Bohr kort daarop Schrödinger uit, niet alleen om een voordracht te komen houden over zijn golfmechanica, maar ook voor een wat langer verblijf om daarin ruimschoots gelegenheid te vinden wat te praten over de interpretatie van de kwantumtheorie.

Deze discussies, die naar ik mij meen te herinneren in september 1926 te Kopenhagen plaatsvonden, hebben een diepe indruk op mij gemaakt, vooral ook door de persoonlijkheid van Bohr. Want hoewel Bohr altijd vol consideratie was en zeer voorkomend, kon hij toch in dergelijke discussies, waar het om de in zijn ogen belangrijkste problemen van de wetenschap ging, met fanatisme en een haast angstaanjagende onverbiddelijkheid op uiterste helderheid in de argumentatie aandringen. Hij hield voet bij stuk, hoewel er urenlang moest worden gestreden, totdat Schrödinger toegaf dat zijn uitleg niet in staat was zelfs maar de wet van Planck te verklaren. Elke poging van Schrödinger om aan deze

*bittere conclusies te ontkomen, werd in oneindig moeizame gesprekken punt voor punt weerlegd. Misschien kwam het wel door deze inspanning dat Schrödinger na een paar dagen ziek werd en als gast van Bohr het bed moest houden. Maar ook hier week Bohr nauwelijks van Schrödingers zijde en steeds weer werd "maar Schrödinger, je zult moeten toegeven dat ..." gehoord. Eenmaal riep Schrödinger haast wanhopig uit: "Als het dan toch bij dit vervloekte kwantumgespring moet blijven, betreur ik het, mij ooit met de atoomtheorie te hebben ingelaten!" Bohr antwoordde daarop slechts: "Maar wij zijn je allen juist zo dankbaar voor wat je gedaan hebt, waardoor de atoomtheorie juist zo'n beslissende stap verder is gekomen." Schrödinger reisde tenslotte een beetje ontmoedigd naar huis, terwijl wij op het instituut het gevoel hadden dat Schrödingers iets te klassieke interpretatie van de kwantumtheorie nu weerlegd was, maar dat voor het volledig begrip van de kwantumtheorie toch nog een paar belangrijke gezichtspunten ontbraken.*¹⁴

Die paar belangrijke gezichtspunten waren, naar later bleek, de precieze formulering van de onzekerheidsrelaties en van het complementariteitsprincipe van Bohr.

Maar ook bleek dat Schrödingers interpretatie van zijn golf functie herzien moest worden. Zijn nadruk op golven als meest fundamentele begrip voor de bouw van de materie was niet langer houdbaar. Vooral zijn idee dat deeltjes niets anders waren dan een 'gelokaliseerd groepje golven' kwam onder steeds heviger kritiek te staan. Zo was het bijvoorbeeld moeilijk te begrijpen hoe in verstrooiingsexperimenten van elektronen aan kristallen, of in botsingsexperimenten met elektronen, een deeltje 'netjes bijeen kon blijven' als het niets anders zou zijn als een golfpakketje. Het was precies vanwege dit soort verstrooiingsexperimenten dat Max Born in 1926 een nieuwe interpretatie van de golf functie voorstelde. Later omschreef hij zijn reden om tegen Schrödinger in te gaan als volgt:

'Op dit punt kon ik hem (Schrödinger) niet volgen. Dit had te maken met het feit dat mijn instituut en dat van James Franck in hetzelfde gebouw van de universiteit van Göttingen gehuisvest waren. Elk experiment van Franck en zijn assistenten met betrekking tot elektronenbotsingen kwam mij voor als een nieuw bewijs van het deeltjeskarakter van het elektron.'

Aan de andere kant accepteerde Born wel het formalisme van Schrödinger omdat hij geneigd was dat te beschouwen als 'de meest diepgaande formulering van de kwantumwetten'. Om dit formalisme in overeenstemming te brengen met de botsingsexperimenten, was een nieuwe *waarschijnlijkheidsinterpretatie* nodig, die dan ook voor het eerst door Born werd voorgesteld. Niet langer beschreef de golf functie de in Schrödingers opinie werkelijke trillingstoestanden

in de natuur, maar van nu af aan beschreef ze alleen de kans om een deeltje ergens aan te treffen. Op die manier werden de golven van de golfmechanica getransformeerd tot 'golven van waarschijnlijkheid'. Een interpretatie die daarna nog door Bohr (in 1927) met zijn dualiteits- en complementariteitsprincipe werd afgerond. Daarmee had het Schrödinger-formalisme zijn uiteindelijke interpretatie en vorm gekregen.

In nauwelijks twee jaar was er een nieuwe theorie geboren en bijna tegelijkertijd volwassen geworden. Daarmee lag een heel nieuw gebied open voor verdere exploratie en de fysische wereld bruiste dan ook van activiteit in de jaren die volgden. De nieuwe theorie werd in razend tempo toegepast op alle mogelijke gebieden. Zoals bijvoorbeeld op het terrein van de atoombouw, moleculebouw, chemische binding, de structuur van atoomkernen, radioactiviteit enz. In feite was er een doorbraak, of beter: een revolutie, tot stand gekomen die de hele fysische kennis in een nieuw licht plaatste. En die een ontwikkeling in gang heeft gezet die nog heden ten dage voortgaat. Waarmee overigens niet gezegd wil zijn dat er sinds die tijd geen nieuwe fundamentele problemen zijn opgedoken. Integendeel, het nog betrekkelijk simpele Schrödinger-formalisme is zeker niet toereikend gebleken ter verklaring van alle nieuwe kennis. Zeer veel is er in de loop van de jaren aan toegevoegd, tot zelfs hele nieuwe theorieën toe, zoals bijvoorbeeld de kwantum-elektrodynamica, of de nieuwste loot: de kwantum-chromodynamica. De eerste voor het beschrijven van de wisselwerking tussen straling en materie; de laatste ter beschrijving van de nieuwste fundamentele bouwstenen der natuur: de quarks. Maar de grootste denkstap, de 'ware revolutie', vond toch wel plaats in die twee woelige jaren, midden in de 'roaring twenties'!

5.3. Filosofische kanttekeningen

Ondanks alle grote successen die de kwantummechanica sinds haar ontstaan geboekt heeft, neemt ze toch een bijzondere plaats in binnen het geheel van de natuurkundige theorieën. Alle fysici zijn het er zonder meer over eens dat de theorie een succes is, dat ze ontzettend goed 'werkt'. Als je het formalisme maar toepast volgens de gestelde regels, dan blijkt het resultaat tot dusverre in overeenstemming te zijn met alle beschikbare experimenten. En wanneer dat af en toe niet zo is, dan brengt dat geen twijfel over het formalisme op zich, maar wordt dat geweten aan het ontbreken van nog benodigde detailkennis. Daarover is geen discussie meer. Nee, het probleem ligt anders. Zoals Einstein schreef in 1953, zo is het nog steeds.

‘Das Eigentümliche in der gegenwertigen Situation sehe ich darin: über den mathematischen Formalismus der Theorie bestehen keine Zweifel, wohl aber über die physikalische Interpretation ihrer Aussagen.’

Het probleem zit hem in de interpretatie van de theorie, de zogenaamde grondslagen. Een aantal zaken die betrekking hebben op de interpretatie, zijn we natuurlijk al tegengekomen. Toen hebben we gezegd dat we de ‘Kopenhaagse school’ zouden volgen. Dat impliceert natuurlijk al dat er ook andere scholen zijn of op zijn minst geweest zijn. Wat hield de Kopenhaagse school ook alweer in?

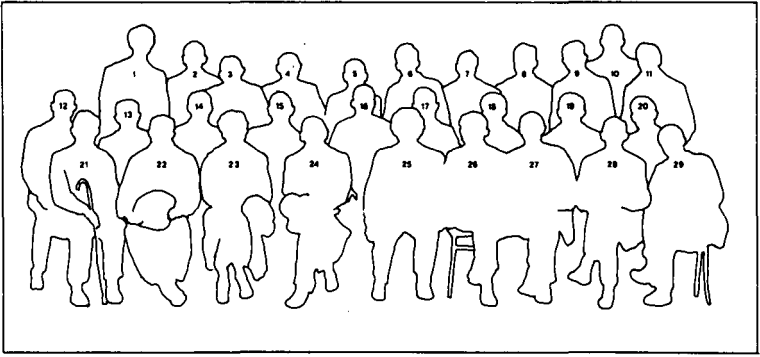
Kort samengevat waren dat vooral de volgende punten. De waarschijnlijkheidsinterpretatie van de golfmechanica is – volgens Bohr met als belangrijkste medestanders Heisenberg en Born – te beschouwen als de ‘laatste realiteit’. Dat wil zeggen, meer valt er over de natuur niet te weten te komen, want er is gewoon niet meer. De onzekerheidsrelaties weerspiegelen in hun opvatting een fundamenteel indeterminisme in de natuur. Bovendien is de natuur fundamenteel dualistisch van aard, wat wordt uitgedrukt in het complementariteitsbeginsel van Bohr.

Voor het eerst is deze interpretatie in zijn volle omvang geformuleerd in 1927, op de beroemde Brusselse vijfde ‘Solvay-conferentie’. Sindsdien heeft ze altijd de grootste aanhang gehad, maar toch ook veel tegenstanders. Waaronder zeer gerenommeerde fysici als Planck, Schrödinger, Einstein en De Broglie. De bekendste opponent is ongetwijfeld Einstein geweest. Vooral het zogenaamde Bohr-Einstein-debat, een discussie die verscheidene jaren heeft geduurd, is beroemd geworden. Einstein droeg daarin steeds nieuwe problemen aan die de tekortkomingen in de Kopenhaagse interpretatie moesten aantonen. Bohr en zijn medestanders zagen zich dan steeds opnieuw voor de taak gesteld deze ingenieuze aanvallen te ontzenuwen. In eerste instantie poogde Einstein vooral voorbeelden te geven waarin de onzekerheidsrelaties ‘omzeild’ werden. Heisenberg schrijft hierover als volgt:

‘Wij kwamen meestal reeds aan het ontbijt in het hotel bij elkaar zitten (tijdens de vijfde en zesde Solvay-conferenties in Brussel in 1927 en 1930) en Einstein begon een gedachtenexperiment te beschrijven waarbij naar hij dacht de tegenstellingen in de Kopenhaagse verklaring duidelijk werden. Einstein, Bohr en ik gingen dan gezamenlijk van het hotel naar het conferentiegebouw en ik luisterde naar de levendige discussie tussen deze beide, in hun filosofische instelling zo verschillende mensen en plaatste af en toe een opmerking over de structuur van het mathematisch formalisme. Tijdens de vergaderingen en vooral in de pauzes trachtten wij jongeren, vooral Pauli en ik, de experimenten van Einstein te analyseren en tussen de middag gingen de discussies tussen



Deelnemers aan de vijfde Solvay-conferentie voor Natuurkunde in Brussel, 23-29 oktober 1927.



1. A. Piccard
2. E. Henriot
3. P. Ehrenfest
4. Ed. Herzen
5. Th. De Donder
6. E. Schrödinger
7. E. Verschaffelt
8. W. Pauli
9. W. Heisenberg
10. R. H. Fowler
11. L. Brillouin
12. P. Debye
13. M. Knudsen
14. W. L. Bragg
15. H. A. Kramers
16. P. A. M. Dirac
17. A. H. Compton
18. L. de Broglie
19. M. Born

20. N. Bohr
21. I. Langmuir
22. M. Planck
23. Mme. Curie
24. H. A. Lorentz
25. A. Einstein
26. P. Langevin
27. Ch. E. Guye
28. C. T. R. Wilson
29. O. W. Richardson

Absent: sir. W. H. Bragg
H. Deslandres en
E. van Aubel

Bohr en de andere Kopenhagenaars weer verder. Meestal had Bohr de complete analyse van het gedachtenexperiment in de namiddag gereed en droeg haar dan Einstein bij het avondmaal voor. Einstein kon weliswaar formeel niets tegen de analyse inbrengen, maar hij was er in zijn hart niet door overtuigd. Bohrs Nederlandse vriend Ehrenfest zei tegen hem: "Einstein, ik schaam mij over jou, want je gedraagt je bij de kwantumtheorie nu net zo als de tegenstanders van jouw relativiteits-theorie bij hun vergeefse pogingen die te weerleggen."

Uiteindelijk heeft Einstein zich wat de onzekerheidsrelaties betreft gewonnen gegeven. Geen van zijn tegenvoorbeelden bleek het tenslotte vol te kunnen houden. (Overigens is het bedenken van situaties waarin de onzekerheidsrelaties kunnen worden ontdoken, een sport die ook nu nog steeds beoefenaars heeft.) Niet dat hij daarmee de Kopenhaagse interpretatie ook accepteerde, maar zijn verzet richtte zich nu vooral op wat hij de onvolledigheid van de kwantummechanica noemde. Daarmee richtte hij zijn kritiek vooral op de waarschijnlijkheidsinterpretatie van het formalisme. Einstein kon er geen vrede mee hebben dat waarschijnlijkheidsuitspraken zouden worden verheven tot de 'laatste waarheid'. Volgens hem kon dat niet meer zijn dan een tussenstation. Een gevolg van het feit dat het formalisme nog onvolledig was, nog niet zijn uiteindelijke vorm had bereikt. In 1926 schreef hij bijvoorbeeld in een brief aan Born:

'Die Quantenmechanik ist sehr achtungsgebietend. Aber eine innere Stimme sagt mir, dass das doch nicht der wahre Jacob ist. Die Theorie liefert viel, aber der Geheimnis des Alten bringt sie uns kaum näher. Jedenfalls bin ich überzeugt dass der nicht würfelt.'

Een opvatting die hij verder zijn hele leven trouw is gebleven, getuige andere legendarische uitspraken als:

'Gott würfelt nicht.'

'Raffiniert ist der Herr Gott, aber boshaft ist er nicht.'

*'Here in quantum mechanics I am a heretic, you know, but someday I believe my views will be found true. God did not invent the science of probability, you know.'*³⁸

In deze afwijzing van waarschijnlijkheidsuitspraken als diepste fundament voor de natuurbeschrijving stond Einstein overigens niet alleen. Anderen, waaronder als meest bekenden De Broglie³⁹ en de Amerikaan David Bohm⁴⁰, hebben geprobeerd wegen aan te geven waardoor de natuurbeschrijving weer meer deterministisch zou kunnen worden. Bohm bijvoorbeeld, deed dit door het postuleren van zogenaamde 'hidden variables'. Ruwweg komt dit erop neer dat hij veronderstelt dat er nog een dieper niveau van natuurbeschrijving mogelijk is dan de huidige kwantummechanica, maar helaas kennen we dat niveau (nog) niet. De variabelen die op dat diepere niveau een bepalende rol spelen, zijn nog voor ons verborgen. Als we

die nu maar wel zouden kennen, zou die diepere beschrijving vast weer wel deterministisch zijn. En dus zou het huidige indeterminisme niet fundamenteel zijn, maar alleen een gevolg van onze nu nog gebrekkige kennis. Tot nu toe is echter niemand erin geslaagd een bevredigende 'hidden variable'-theorie op te stellen, hoewel er wel vergaande pogingen in die richting zijn gedaan. Jammer merkt hierover op:

'The idea of hidden variables is as old as physical thought. It was applied in man's early attempts to explain the visible world in terms of a postulated invisible world.'

Ofwel: het zou te vergelijken zijn met het oeroude geloof van onze voorouders in onzichtbare geesten en demonen ter verklaring van allerlei natuurverschijnselen. Geen wonder dat Bohr – vanuit de positivistische Kopenhaagse school, met juist grote nadruk op observeerbare grootheden – dit een grote filosofische stap terug noemde.

Een andere, en misschien meer geduchte tegenstander van de Kopenhaagse school was Alfred Landé.⁴¹ Deze had geen bezwaar tegen waarschijnlijkheidsuitspraken, maar zijn fundamentele punt van kritiek geldt het golf-deeltje-dualisme, met bijbehorend complementariteitsprincipe. Zo schrijft hij bijvoorbeeld over het bekende optreden van interferentiepatronen in experimenten met elektronen het volgende:

'The dual theory ascribes the diffraction to a magic activity of the electrons, incident as particles spaced at any large time and space interval, then "manifesting" themselves as interfering waves, and finally as individual particles again, a fantastic assumption accepted for lack of anything better.'

Het 'supernatural' transformeren van deeltjes in golven en weer terug is echter volgens Landé niet alleen moeilijk voor te stellen, maar ook volstrekt overbodig. Deeltjes zijn deeltjes en blijven deeltjes. Het enige wat je moet doen om het 'interferentiegedrag' van deeltjes te kunnen beschrijven, is, naast de bestaande kwantisatieregels voor energie en impulsmoment, ook een kwantisatieregel invoeren voor de impuls van een deeltje. Nog zeer recent (1973) heeft Landé zijn ideeën uitgewerkt tot een nieuwe grondslag voor de kwantummechanica. Ideeën, die door deskundigen tot nu toe als zeer veelbelovend zijn omschreven.⁴²

Veel ouder tenslotte is de zogenaamde 'statistische interpretatie'.⁴³ De aanhangers hiervan, bijvoorbeeld de beroemde filosoof Karl Popper al in 1934, hebben niet zozeer behoefte aan een heel ander of uitgebreider formalisme, maar ze interpreteren in eerste instantie hetzelfde formalisme op een andere manier. Het gaat hierbij om de vraag of de kwantummechanica überhaupt wel uitspraken doet over

individuele gebeurtenissen. Of dit het geval is, hangt direct samen met hoe je het begrip waarschijnlijkheid interpreteert. Zegt een waarschijnlijkheidsuitspraak bijvoorbeeld wel iets over de plaats van *één bepaald elektron*? Of alleen iets over de relatieve frequentie waarmee elektronen uit een hele *verzameling* elektronen, die zich in 'dezelfde toestand' bevinden, voorkomen op een bepaalde plaats? In ieder geval is het zo dat elk experiment altijd een meting is aan een *verzameling* elektronen en nooit aan één elektron. Een belangrijk verschil met 'Kopenhagen' treedt bijvoorbeeld op bij de interpretatie van de onzekerheidsrelaties. Volgens Popper zeggen deze relaties iets over de *statistische spreiding* in de meetresultaten van bijvoorbeeld plaats en impuls aan een verzameling elektronen, maar nog niets over de meting van plaats en impuls van één elektron. Daarvan vindt hij dat '*an electron can have a precise position and momentum. It can!*'

Tot zover iets over de 'filosofie van de kwantummechanica'. Een zeer onvolledig beeld. Veel zaken die de gemoederen bezighouden of hebben beziggehouden, zijn niet eens genoemd. Zoals bijvoorbeeld het causaliteitsbegrip, het determinisme en de vrije wil, de rol van de waarnemer en de objectiviteit, het probleem van de meting, enz. Al deze zaken hebben aanleiding gegeven tot het schrijven van dikke boeken en het houden van heftige discussies. Daarop zullen we nu niet verder ingaan. Het ging er in deze paragraaf alleen om, een idee te geven van het feit dát er discussies geweest zijn en nóg zijn. Dat alles niet zo rechtlijnig en eenduidig tot stand komt als soms gesuggereerd wordt. Zelfs niet in de natuurkunde, waarin men het toch relatief gemakkelijk heeft omdat er alleen met manipuleerbare, dode materie wordt gewerkt. Wellicht dringt zich nu toch de vraag op, welke van de aangestipte interpretaties de goede is. Het antwoord daarop weet ik niet en is er ook niet. Ik weet dat niet omdat ik gewoon niet in staat ben daarover te oordelen. Mijn kennis van en inzicht in de kwantummechanica is daarvoor veel te gering. En dat geldt, denk ik, niet alleen voor mij, maar voor verreweg de meeste 'gewone' natuurkundigen. In die zin moet je het gegeven dat de meeste natuurkundigen aanhangers zijn van de Kopenhaagse school, met een flinke korrel zout nemen. Je hangt nu eenmaal vaak datgene aan waarvan je geleerd wordt dat het goed is. Het *kritisch* nadenken daarover is voor de gewone fysici ook niet eens nodig, want het formalisme 'werkt' immers toch!

Juist het kritisch en productief nadenken over de grondslagen van zo'n theorie, en daarmee ook over de basisvragen die je aan de natuur kunt stellen, vergt een grote kennis van en zeer diep inzicht in diezelfde natuur. Het is niet toevallig, denk ik, dat de voortgang op

dit gebied betrekkelijk langzaam gaat, en dat slechts een betrekkelijk klein aantal 'wijze' mensen hierover iets wezenlijks te zeggen heeft. Niet iedereen is nu eenmaal een Einstein of een Bohr. En zeker niet iedere natuurkundige! Maar Dirac hoort misschien wel in die categorie thuis. Vandaar dat het goed is nog even naar hem te luisteren, als hij zegt:

'I should like to suggest that one not worry too much about ... controversy. I feel very strongly that the stage physics has reached at the present day is not the final stage. It is just one stage in the evolution of our picture of nature, and we should expect this process to continue into the future. The present stage of physical theory is merely a steppingstone toward the better stages we shall have in the future. One can be quite sure that there will be better stages simply because of the difficulties in the physics today.'

5.4. Tot slot

Het einde van dit boek is nu aangebroken. Als schrijver kan ik daarbij een zekere zucht van verlichting niet inhouden. Schrijven is nu eenmaal een creatieve en daardoor uitputtende bezigheid, zelfs voor een boek als dit. We hebben ons daarin beziggehouden met het land natuurkunde. En in het bijzonder met de *centrum*-provincie: kwantummechanica. Door deze provincie hebben we ons een ruwe weg gebaad. Een weg, geplaveid voor beginners en geschreven door een halfgevorderde. Het beeld dat we zo van deze provincie hebben gekregen, laat zich misschien nog het best vergelijken met een luchtfoto. Maar dan wel genomen van grote hoogte. De brede hoofdwegen en de grootste steden en dorpen zijn in ruwe contouren zichtbaar geworden, maar de details zeker niet. Ook zien we op die foto dat de centrumprovincie niet geïsoleerd ligt. Integendeel, ze wordt omringd en begrensd door vele andere provincies. Te zamen vormen die het land natuurkunde. Maar tevens zien we dan dat dit land zelf ook niet geïsoleerd ligt. Het wordt omsloten en begrensd door het land van de techniek. Het dringt daarin ook op allerlei grillige manieren door. Een land van de techniek dat op zijn beurt weer op alle mogelijke manieren doordringt in een nog groter geheel: de maatschappij waarin wij allen leven, de alledaagse werkelijkheid. Ook al heb je nooit van kwantummechanica gehoord, via de techniek heb je in ieder geval met haar gevolgen te maken gehad. Of je wilt of niet, dat is niet tegen te houden. Het is hier nu niet de plaats om uitgebreid in te gaan op de manier waarop het verkrijgen van fundamentele kennis omtrent de natuur en het gebruik van de kennis in technische toepassingen met elkaar in verband staan. Vaak

is dat nog een vrij ingewikkeld en niet zeer eenduidig aan te geven binding. Feit is echter dat het moeilijk voorstelbaar is hoe veel van de moderne technologie zou hebben kunnen ontstaan zonder kennis van de kwantummechanica. Denk bijvoorbeeld aan de grote elektronica-explosie van de laatste decennia. Het is nauwelijks in te zien hoe computers, chips, automatisering, massacommunicatie enz. hun huidige angstaanjagende omvang hadden kunnen bereiken zonder met name een grondige kennis van de natuurkunde van de vaste stof. En speelt daar de kwantummechanica niet een onmisbare en onschatbaar grote rol in? Of wat te denken van het gebruik van kernenergie, vreedzaam of niet, zou dat mogelijk geweest zijn zonder de benodigde kennis van kernbouw, splitsing en fusie? Hoe zou de ruimtevaarttechnologie zich ontwikkeld hebben zonder de huidige fundamentele kennis omtrent het gedrag en eigenschappen der materie? Of zou die er dan juist helemaal niet geweest zijn? Zouden chemici dan ook allerlei mogelijke en onmogelijke stoffen en stofjes hebben kunnen ontwikkelen? En hoe zou de wapenindustrie er hebben uitgezien zonder kwantummechanica? Zouden er dan ook laserwapens, neutronen-, atoom- of H-bommen geproduceerd worden door elk land of landje dat er maar enigszins de mogelijkheid voor ziet? Hoe zou dan de politieke wereldsituatie er hebben uitgezien? Of ben ik nu aan het doordraven?

Hoe dat ook precies zij, feit is dat de ontwikkeling van de kwantummechanica en de technologische vooruitgang hand in hand zijn gegaan. Een vooruitgang die volgens velen langzamerhand is geworden tot 'vooruitgang'. Niet dat daarmee de schuld van alles wat misschien verkeerd is gegaan, bij de natuurkundigen komt te liggen. Het zou onzin zijn om het zo te stellen. Maar wel zouden natuurkundigen zich meer moeten afvragen wat er met de door hun verworven kennis maatschappelijk kan worden gedaan. En zich daar ook meer verantwoordelijk voor voelen.

In de tijd dat de kwantummechanica ontstond, werd er nog in het geheel niet gepraat over de maatschappelijke verantwoordelijkheid van wetenschappers. Die theorie werd ontwikkeld door een betrekkelijk klein, elitair groepje natuurkundigen, die wat hun werk betrof eigenlijk volkomen los van de normale maatschappij opereerden. Het vergaren van kennis omtrent de natuur werd gezien als een op zichzelf zeer waardevolle bezigheid, die verder niet door enig maatschappelijk nut gerechtvaardigd hoefde te worden. Een mening die trouwens nog steeds veel aanhang heeft. En dit vergaren van kennis had natuurlijk in die tijd inderdaad een spectaculair succes. Zozeer zelfs dat de natuurkunde tot voorbeeld werd gesteld aan andere wetenschappen als psychologie of sociologie. In die sfeer passen bijvoorbeeld ook de opgewonden verhalen over de 'helden der we-

tenschap', die met inzet van al hun grote wijsheid en energie de natuur haar geheimen ontputselen.

In de jaren vijftig en zestig beleefde dit geloof in wetenschap en techniek misschien wel zijn hoogtepunt. Toen werden daarin grote sommen geld gepompt in de verwachting dat de maatschappij daar ook inderdaad wel bij zou varen. En wie zal ontkennen dat de algemene welvaart in de westerse wereld in die tijd niet enorm is toegenomen? Maar zijn de mensen daardoor ook werkelijk gelukkiger geworden? Sindsdien heeft dit ongebreidelde optimisme bij velen dan ook plaats gemaakt voor een zeker scepticisme. En bij sommigen zelfs voor duidelijke afkeer. Natuurwetenschap en techniek, en dus ook de natuurkunde, zijn inmiddels onder forse druk komen te staan. In de menswetenschappen bijvoorbeeld, wordt de natuurkunde nu vaak eerder gezien als een voorbeeld van hoe het juist niet moet. En niet onterecht, denk ik. Wereldproblemen als milieuvervuiling, energiebehoefte, kernenergie en radioactief afval, bewapeningswedloop en kernbepapening werpen een wat schril licht op de zegeningen van wetenschap en techniek. Ook dat zullen we moeten erkennen als we het hebben over de kwantummechanica, want ook die speelt daarin een niet meer weg te denken rol. Mede dank zij deze theorie heeft de mensheid veel kennis vergaard, zonder daar overigens veel wijzer van te zijn geworden. Althans niet in vergelijking met de Chinese wijsgeer Tsjwang-Tse, die al vijfentwintig eeuwen geleden heeft gewezen op de gevaren van het gebruik van machines voor de mensheid, zoals het volgend verhaal vertelt.

Toen Tse-Koeng door de streek ten noorden van de rivier de Han kwam, zag hij een oude man druk bezig in zijn groentetuin. Hij had greppels gegraven voor de bevoeiing. Hij daalde zelf in de bron af en bracht een vat vol water naar boven, dat hij uitgoot. Hij spande zich tot het uiterste in en bracht toch weinig tot stand.

Tse-Koeng sprak: 'Er bestaat een methode om in één dag honderd greppels te bevoeien. Met weinig moeite wordt zo veel bereikt. Zoudt gij die ook niet willen toepassen?'

De tuinman richtte zich op en vroeg: 'En waaruit bestaat die methode?'

Tse-Koeng sprak: 'Men neemt een houten hefboomarm die van achteren verzaard en van voren licht is. Op deze wijze kan men zoveel water scheppen als er maar opborrelt. Men noemt dat een waterput.'

Het gezicht van de oude man vertoonde ergernis en hij zei met een glimlach: 'Ik heb mijn leraar horen zeggen: "Als iemand machines benut, dan worden al zijn handelingen machinaal; wie zijn handelingen machinaal verricht, krijgt een hart als een machine; wie een hart als een machine in zijn borst heeft, verliest de zuivere eenvoud. Als bij een mens de zuivere eenvoud ontbreekt, wordt hij onzeker in de gevoelens

van zijn geest. Onzekerheid in de gevoelens van de geest is iets dat niet samengaat met de ware geest." Niet dat ik zulke dingen niet ken, maar ik zou mij schamen ze te gebruiken.'

Noten

1. V. F. WEISSKOPF, *Physics in the twentieth Century*. M.I.T. Press, 1972.
2. De klassieke mechanicawetten van Newton zijn in het kort als volgt te omschrijven: 1) traagheidswet; 2) actie = - reactie; 3) $F = ma$ (kracht = massa maal versnelling); en enigszins los daarvan: 4) de gravitatiewet.
3. Voor een gepopulariseerde verhandeling over dit communicatieprobleem, zie: W. R. FUCHS, *Leven onder verre zonnen*, De Fontein, De Bilt, 1974.
4. Dit beeld is ontleend aan W. H. CROPPER, *The Quantum Physicists*, Oxford University Press, New York, 1970.
5. R. FEYNMAN, *Lectures on physics III*, Addison Wesley, Reading, 1965.
6. L. EISENBUD, *The conceptual foundations of Quantum Mechanics*, van Nostrand Reinhold Company, New York, 1971.
7. Een volkomen 'zwart lichaam' is een idealisatie die in werkelijkheid niet te verwezenlijken is. Fig. 5 is een voorbeeld van een situatie die het ideaal dicht benadert. Onder een zwart lichaam verstaat men een lichaam dat niet alleen *alle* opvallende straling absorbeert, maar zelf ook een zeer bepaald temperatuurafhankelijk stralingsspectrum uitzendt.
8. Aldus de natuurfilosoof en historicus M. JAMMER in zijn boek *The conceptual development of Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York 1966). De gegeven historische schets, zo ook een groot deel der vermelde citaten, is - naast CROPPER (noot 4) - grotendeels ontleend aan dit boek of afkomstig uit de in dit boek vermelde originele vindplaatsen.
9. Einstein zegt hier dus dat het misschien wel nodig is onderscheid te maken tussen wat er op een bepaald moment gebeurt en wat er gebeurt gemiddeld over een zeker tijdsinterval. Het laatste is wat je in optische experimenten waarneemt en zou beschreven moeten worden met de golftheorie van het licht. Maar deze theorie zou te kort kunnen schieten voor het beschrijven van momentane gebeurtenissen als absorptie of emissie van energiekwanten.
10. Geciteerd uit: F. BITTER en H. A. MEDICUS, *Fields and Particles*, Elsevier, New York, 1973.
11. De formule voor de zogenaamde Balmer-serie van waterstof luidt:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ met } m = 3, 4, 5 \dots$$

λ is de golflengte van de spectraallijnen en R de zogenaamde Rydberg-constante. ($R = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$).

12. Het beeld dat hier van de ontwikkeling van de natuurkunde wordt geschetst, is zeer gebrekkig. De opvattingen daarover lopen te ver uiteen om in het kader van dit boek voldoende tot uiting te kunnen komen. Het geschetste beeld komt ruwweg overeen met wat wel het standaardbeeld genoemd wordt. Een goede inleiding op deze materie biedt het boek van H. KONINGSVELD, *Het verschijnsel wetenschap*, Boom, Meppel, 1976.

13. Dit vormt het zogenaamde inductieprobleem in de wetenschapsfilosofie. Voor de filosoof Popper is dit mede aanleiding geweest voor het formuleren van zijn zogenaamde kritisch rationalisme, waarin het inductieprobleem niet langer relevant is (zie KONINGSVELD, *Het verschijnsel wetenschap*, Boom, Meppel, 1976).

14. Uit: W. HEISENBERG, *Fysica in Perspectief* (Aula Paperback 23), Het Spectrum, Utrecht, 1974.

15. Enigszins vrij vertaald uit: R. L. WEBER (ed), *A Random Walk in Science*, The Institute of Physics, London, 1973.

16. De behandeling van het zogenaamde 'tweespletenexperiment' is sterk geïnspireerd door R. Feynmans bekende uiteenzetting in zijn *Lectures on physics* (zie noot 5).

17. Uit: *Nuffield A-level Physics*, unit 10, Penguin Books, 1971.

18. De met een microscoop te bereiken vergroting wordt beperkt door zijn *scheidend vermogen*. Daaronder verstaat men de afstand tussen twee punten in het voorwerp die in het beeld nog net gescheiden waarneembaar zijn. Een berekening levert voor het scheidend vermogen: $R \approx \lambda/3$, als λ de golflengte van het gebruikte licht voorstelt. In formule:

$$R = \frac{\lambda}{n \sin \theta}$$

19. Uit: ADOLPH BAKER, *Modern Physics and antiphysics*, Addison-Wesley, 1970.

20. In het boek van J. ANDRADE E SILVA en G. LOCHAK, *Quanta, de quantumtheorie en de nieuwe fysica*, in de Wereldakademie reeks (De Haan en Meulenhoff, 1969) wordt hierop dieper ingegaan op vergelijkbaar moeilijkheidsniveau als in dit boek.

21. Zie JAMMER (noot 8), p. 344.

22. $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}$. Neem bijvoorbeeld een deeltje met een massa van 1 g, snelheid 1 cm/s, dat zich binnen een gebied van 1 cm bevindt. Daarvoor geldt dat het produkt $mv \cdot x = p \cdot x$ een grootte

heeft van:

$$p \cdot x = 10^{-3} \times 10^{-2} \times 10^{-2} = 10^{-7} \text{ Js} \approx 10^{26} h$$

Dus voor macroscopische voorwerpen is dit produkt zo groot dat een onzekerheid daarin ter grootte van h , geen enkele merkbare invloed heeft. Ter vergelijking, voor een elektron dat op een afstand van 10^{-10} m, met een snelheid van 10^6 m/s rond een kern beweegt, geldt dat hetzelfde produkt de waarde $\approx 1,4 h$ heeft. Hiervoor heeft een onzekerheid ter grootte h dus wel degelijk onmiddellijk consequenties.

GAMOV heeft in het boekje *Mr Tompkins in Wonderland* (Van Stoc-kum, Den Haag, 1953) o.a. op een zeer humoristische manier beschreven hoe een wereld waarin $h = 1$ er voor ons uit zou zien.

23. Uit: M. EBISON (ed), *The Harvest of a Quiet Eye*, The Institute of Physics, London, 1977.

24. Zie ook HEISENBERG in *Fysica in perspectief* (noot 14).

25. Uit: *Physics Today*, december 1976.

26. Dit los denken van zijn omgeving is eigenlijk een typisch klassieke gedachte. In de kwantummechanica kun je immers alleen iets van een systeem te weten komen door er aan te meten en daarmee het systeem te beïnvloeden. Juist de interactie met de omgeving is voor een kwantummechanisch systeem essentieel om het systeem überhaupt te kunnen kennen (zie bijv. JAMMER, noot 8, p. 352).

Eenzelfde probleem doet zich ook voor bij het begrip 'toestand' in de kwantummechanica. Algemeen gesteld gaat het om de rol van de waarnemer bij het meetproces in de kwantummechanica. Een probleem waarvoor nog geen duidelijke oplossing is gevonden (zie JAMMER, *The philosophy of Q.M.*, Wiley, New York, 1974).

27. Een complex getal z kun je schrijven als: $z = a + ib$, waarbij a en b reële getallen voorstellen en $i = \sqrt{-1}$. Deze i wordt wel de complexe eenheid genoemd. Het kwadraat van de absolute waarde van een complex getal is gedefinieerd als:

$$|z|^2 = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2$$

en dit is dus inderdaad wel een reëel getal.

28. De tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking heeft de vorm:

$$i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = - \frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t)$$

Als we nu $\Psi(x, t)$ schrijven als $\Psi(x, t) = \psi(x) \phi(t)$ dan resulteert, na substitutie, de volgende vergelijking voor $\psi(x)$:

$$- \frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \text{ (zie axioma III)}$$

Met voor $\phi(t)$ de uitdrukking $\phi(t) = e^{-2\pi i E t / h}$
 $\phi(t)$ is dus inderdaad een puur complexe functie.

29. $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$.

30. Het eerste couplet van een 'Researcher's prayer', uit: *A Random Walk in Science* (noot 15).

31. Deze Schrödinger-vergelijking ziet er als volgt uit:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{-8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi$$

waarbij het symbool $\frac{\partial}{\partial x}$ een partiële differentiatie voorstelt van de functie $\psi(x, y, z)$, die nu van alle drie de coördinaten afhangt.

Het verband tussen r en de coördinaten x, y en z wordt gegeven door:

$$r = \sqrt{(x^2 + y^2 + z^2)}$$

In plaats van de rechthoekige coördinaten x, y en z kunnen we ook gebruik maken van de bolcoördinaten r, ϕ en θ . Uitgedrukt in bolcoördinaten heeft de Schrödinger-vergelijking voor het H-atoom de volgende vorm:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) = \frac{-8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi$$

32. Het impulsmoment van een deeltje is gedefinieerd als het uitproduct van de impulsvector en de plaatsvector, volgens: $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$
 Als op een deeltje een kracht werkt, dan geldt dat de tijdsafgeleide van het impulsmoment gelijk is aan het krachtmoment:

$$\mathbf{M} = \frac{d\mathbf{L}}{dt}$$

met \mathbf{M} gedefinieerd als: $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$

Voor een zogenaamde centrale kracht, zoals bijvoorbeeld de Coulomb-kracht, geldt dat \mathbf{r} en \mathbf{F} evenwijdig zijn en dan is het uitproduct nul en dus ook het krachtmoment. Daaruit volgt dus dat het impulsmoment van een deeltje waarop alleen een centrale kracht werkt, constant is in de tijd (t.o.v. het krachtcentrum).

33. Trouwens als je het elektron wel opvat als een klein bolletje dat om zijn eigen as draait, ben je daarmee nog niet uit de problemen. Dit heeft een grote rol gespeeld bij de aanvaarding van het spinbegrip. Lorentz bijvoorbeeld, berekende toen dat de omtreksnelheid

aan de oppervlakte van het elektronbolletje dan groter moest zijn dan de lichtsnelheid. Nog afgezien van de zeer grote centripetale krachten die dan nodig zouden zijn om het bolletje een bolletje te laten blijven.

34. Een probleem is dat deze $Y_{l,m}(\theta,\phi)$'s complexe functies zijn, en dat we ze dus niet kunnen tekenen in één figuur. Echter, ze kunnen nog gesplitst worden in twee stukken:

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

Het blijkt nu dat de Θ -functies reëel zijn en de Φ -functies een complexe e-macht vormen. Dat betekent dat $|\Phi(\phi)|^2 = 1$, zodat de waarschijnlijkheidsverdelingen $Y_{l,m}^2$ niet meer van ϕ afhangen. Vandaar dat we toch een goed beeld krijgen van deze verdelingen door alleen het Θ -afhankelijke stuk te bekijken. Het verschil tussen $\Theta(\theta)$ en $|\Theta(\theta)|^2$ is daarvoor van ondergeschikt belang.

35. De woorden 'toestand' en 'orbitaal' worden hier steeds door elkaar heen gebruikt. Strikt genomen is dat niet juist, maar het is wel een (slordige) gewoonte.

36. Het succes van de kwantummechanica in dit opzicht heeft mede geleid tot de opvatting dat ook de beschrijving van alle levensprocessen, inclusief het voelen en denken, in feite is terug te voeren op zuiver fysische eigenschappen en processen. Tegen deze vorm van 'fysicalisme' bestaat echter ook veel verzet, dat eerder toe- dan afneemt.

37. De citaten in dit hoofdstuk zijn opnieuw hoofdzakelijk ontleend aan de boeken van JAMMER (noot 8, 26), HEISENBERG (noot 14) en CROPPER (noot 4).

38. Zie bijvoorbeeld ook: R. S. SHANKLAND, 'Conversations with Albert Einstein', *American Journal of Physics*, 41, p. 895, 1973.

39. Zie bijvoorbeeld: *Quanta, de quantumtheorie en de nieuwe fysica* (noot 20).

40. DAVID BOHM, *Causality and Chance in Modern Physics*, Van Nostrand, 1957. (Nederlandse vertaling: *Causaliteit en waarschijnlijkheid*, Aula 114.)

41. Zie bijvoorbeeld: A. LANDÉ, 'Quantum fact and fiction IV', *American Journal of Physics*, 43, p. 701, 1975. En: A. LANDÉ, 'Einstein and the Quantum Riddle', *American Journal of Physics*, 42, p. 459, 1974.

42. Zie bijvoorbeeld: CROPPER (noot 4) en JAMMER (noot 26).

43. Zie JAMMER (noot 26).



Register

- abstractie(niveau) 45-49
antisymmetrische golf-
functie 131
atoom, atomen 29, 33,
41, 95, 96, 101, 132-
137, 142, 143, 149, 161
-, energieniveaus in 12
-, gedrag 28
-, golf functies 135, 136,
141, 153
-, grootte 15, 102
-, identiteit 31
-, kwantummecha-
nisch 35, 118
-, stationaire toestand 33,
36-38, 84, 85, 92-95, 99,
102, 104, 112, 116, 127,
154, 162
atoomkern 30-33, 96,
114, 118, 137, 147-154
atoommodel
-, van Bohr 32 e.v.
-, van Bohr-
Sommerfeld 37
-, van Rutherford 29 e.v.
-, van Thomson 28 e.v.
atoomnummer 133
atoomorbitalen 140, 142
- baanimpulsmoment 118-
123, 154
Balmer, J. J. 33, 175
benzeen 144, 145
Bohm, D. 168
Bohr, N. 31-36, 49, 75,
79, 86, 115, 162-171
-, complementariteitsprin-
cipe 74-76, 163-165, 169
-, correspondentieprincipe
99-100
-, dualiteitsprincipe 164
-, frequenties 161
-, postulaten 34, 35, 95
Bohr-atoom *zie* atoom-
model van Bohr
Bohr-Sommerfeld-atoom
zie atoommodel van
Bohr-Sommerfeld
bolcoördinaten 111, 178
bolfuncties 122, 124
bolsymmetrie 110, 112, 115
- Boltzmann, L. E. 16
Born, M. 161, 163, 165,
167, 168
Bragg, W. 28
Broglie, L.-V. de 37-39,
50, 75, 87, 89, 161, 165-
168
-, vergelijking 38
- centripetale kracht 30, 32
chemische binding 42,
164
complementariteitsprin-
cipe van Bohr *zie* Bohr,
N.
complex getal 83-84, 177
Compton, A. 25, 26, 167
Compton-effect 25-26, 63
continuïteitsvoorwaarde
91
correspondentieprincipe
van Bohr *zie* Bohr, N.
Coulomb-kracht 30, 32,
109-114, 119-120, 152-
154, 178
Crick, F. H. C.
- Dalton, J. 115
Davisson en Germer, ex-
periment van 38-41
De-Broglie-vergelijking
zie Broglie, L.-V. de
deeltje(s) 17-18, 26, 28,
31, 38, 51, 57, 61, 72-
75, 82-83, 85, 87-106,
118-119, 162-164, 169,
178
-, elementaire 77-78,
154, 157, 159
deeltje-golf-dualisme 38,
41, *zie ook* golf-deeltje-
dualisme
Democritus 11
determinisme 16, 17, 74,
170
deuteron 155
-, grondtoestand 113, 155
diamantrooster 150
diëlektrische
constante 110
differentiaalvergelijking 90
- Dirac, P. A. M. 166, 167,
171
DNA-molecule 144, 146,
148
- edelgas 133, 135
Ehrenfest, P. 167, 168
eigenfuncties 95, 105
eigenwaarden 95
Einstein, A. 16, 22-25, 31,
34, 38, 50, 75, 87, 155,
161, 164, 165, 167, 168,
171, 175, 179
Eisenbud, L. 17
elektromagnetisme 16
elektronenschillen 134,
154
elementaire deeltjes 77,
78, 154, 157, 159
empirische wet 45, 49
energie 14
-, kinetische 24-26, 35,
97, 113, 114, 125, 148
energiekwanten 21, 22
energieniveau 12, 35, 95,
96, 99, 101, 112, 113,
116, 134, 135, 147, 152-
154
energieschaal 156
energiewaarden 88, 95,
97, 103-106, 112, 113,
115-117, 126, 134, 152,
162
ethaan 143
excitatie-energie 96
- Faraday, M. 16
Fermat, P. de 161
Feynman, R. 14, 175
formalisme 80, 86, 95,
107, 159-170
foto-elektrisch effect 22,
23, 25, 49
foton 12, 22, 24-27, 37,
51, 52, 56-69, 72-74,
101, 147, 151, 154, 155,
159
Franck, J. 35, 36, 163
-, proef van Franck en
Hertz 35
fysicalisme 179

- fysisch systeem 80-85, 87, 92, 100, 102, 105, 106, 109, 114, 130, 131, 137, 140, 154, 159, 177
 –, toestand 80, 82, 84, 90, 99, 131, 132, 133, 170, 177, 179
- gebonden (energie)toestand 97, 103, 105, 116
- Geiger en Marsden, experiment van 29
- geometrische optica 161
- Germer *zie* Davisson en Germer
- golf, golven 14, 17, 18, 26, 28, 41, 51-57, 61, 74, 75, 163, 164, 169
- golf functie 82, 83, 85, 88, 91, 92, 94, 95, 97, 99, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 111, 116, 117, 118, 121, 122, 130, 131, 132, 135, 138, 152, 155, 163
 –, antisymmetrische 131
- golfgetal 90
- golfmecanica 160, 161, 162, 164, 165
- golfpakket 161
- golfpatronen 94, 125
- golf-deeltje-dualisme 22, 37, 41, 50, 57, 70, 169, *zie ook* deeltje-golfdualisme
- gravitatiekracht 30
- grensgolflengte 24
- H₂-ion 137, 138, 140
- H₂O-molecule 142
- Hamilton-formalisme 87, 161
- H-atoom 109, 112, 115, 119, 121, 122, 126, 127, 130, 133, 137, 148, 154, 178
- Heisenberg, W. 46, 66, 69, 74, 77, 97, 155, 160, 161, 162, 165, 167, 176, 177, 179
- Helmholtz, H. L. F. von 16
- Hertz, G. 35, 36
 –, proef van Franck en Hertz 35
- Hertz, H. 23
- 'hidden variables' 168
- hoge-energiefysica 154
- hoofdkwantumgetal 129, 133
- impuls 14, 26, 63, 64, 67-72, 89, 97, 104, 169, 170
- impulsbehoud 69
- impulsmoment 118-122, 169, 178
- indeterminisme 165, 169
- inductieprobleem 176
- ionbinding 140
- interferentie 38, 57, 63, 64, 93
- interferentiepatroon 58, 60, 63-66, 99, 169
- interferentieterm 56
- Jammer, M. 22, 28, 169, 175, 179
- Jeans, J. 34, *zie ook* Rayleigh-Jeans-formule
- Joule, J. P. 16
- kansverdeling 54, 57, 60
- Kelvin, W. Th. 16, 18
- kern *zie* atoom
- kinetische energie 24-26, 35, 97, 113, 114, 125, 148
- kinetische gastheorie 16
- klassieke mechanica 12, 17, 31, 33, 70, 72, 87, 119, 161
- kleurstoffen 101
- Kopenhaagse school 75, 165, 169, 170
- kracht 12, 70, 118, 119, 178
- kristal 157
 –, rooster 149
 –, structuur 151
- kritisch rationalisme 176
- kwanten, kwantum 12, 16, 21, 26-28
- kwantumchromodynamica 164
- kwantumelektrodynamica 164
- kwantumgetal 32, 95, 97, 100, 115, 119, 121, 122, 126, 129, 133, 134
- kwantumhypothese 16
- kwantumladder 109, 149, 156, 157
- kwantummechanisch atoom 35, 118
- kwantumregels 37
- kwantumsprongen 161
- Landé, A. 169, 179
- Laplace, P. S. 17, 74
- Laue, M. Th. F. von 33
- Lewis, G. N. 22
- Lorentz, H. A. 27, 50, 167, 178
- macromoleculen 157
- Marsden *zie* Geiger en Marsden
- materiegolven 38, 41
- matrixalgebra 161
- matrixmechanica 160-162
- Maxwell, J. C. 16, 23, 25, 33
- mechanica van Newton 11, 12
zie ook klassieke mechanica
- methaan 143
- Millikan, R. 25
- moleculaire
 – biologie 148
 – golf functies 141
- molecule 15, 101, 102, 109, 132, 137, 140-157
- molecule-orbitalen 140, 142
- mutatie 149
- NaCl-rooster 150
- natuurwet 43, 44, 78
- neutron 154, 155
- Newton, I. 11, 12, 14, 17, 21, 33, 70, 87, 175
- niveau van abstractie *zie* abstractie
- normeringsvoorwaarde 91, 92, 105, 106
- nulpuntsenergie 97, 113
- onzekerheidsrelaties 66, 69, 70, 72, 74, 76, 97, 99, 113, 115, 159, 160, 163, 165, 168, 170
- orbitalen 129, 132, 135, 140, 179
- π -bindingen 144, 145
- π -elektronen 101
- Pauli, W. 132, 133, 160, 165, 167
- Pauli-principe 131, 132, 133, 135, 136, 140, 152, 154
- periodiek systeem 42, 133, 135

- Planck, M. 16, 18, 20-22, 25, 31, 33, 37, 50, 161, 162, 165, 167
 –, constante van 21, 23, 49, 51, 74
 Plato 77, 78
 Popper, K. 169, 170, 176
 postulaten van Bohr *zie* Bohr, N.
 potentiaalput 87, 88, 92, 103
 potentiële energie 85-89, 102, 109, 110, 113, 114, 137-139, 140, 152, 155
 proton 96, 109, 110, 120, 137, 138, 154, 155
- quarks 164
- randvoorwaarde 90, 92, 93, 103-105, 113, 119
 Rayleigh, J. W. 19, 20
 Rayleigh-Jeans-formule 20
 relativiteitstheorie 38, 168
 roosterceel 151
 roostertrillingen 151
 Rutherford, E. 28, 29
 Rutherford-model *zie* atoommodel van Rutherford
 Rydberg-constante 33, 176
- σ -bindingen 144, 145
 scheidend vermogen 176
 Schrödinger, E. 11, 86, 87, 148, 149, 160-165, 167
 Schrödinger-vergelijking 85-87, 89, 92, 103-105, 109, 112, 116, 119, 122, 135-137, 147, 149, 155, 164, 177, 178
 Solvay-conferentie 165
 Sommerfeld, A. J. W. *zie* atoommodel van Bohr-Sommerfeld
 spinimpulsmoment 121-122, 154
 staande-golfpatronen 102, 104, 113, 115, 122, 123, 125, 136, 148, 149, 151
 stationaire toestand *zie* atoom
 statistische interpretatie 169
 stralingsspectrum 18-21, 33, 43, 49, 102-103, 135, 147, 154
 systeem *zie* fysisch systeem
- theoretische wetten 45, 46
 thermodynamica 16
 Thomson, G. P. 39, 41
 Thomson, J. J. 28-30
 Thomson-atoom *zie* atoommodel van Thomson
 tijd 14, 84, 119
 tijdsafhankelijkheid 84, 94
- toestand *zie* fysisch systeem
 toestandsfunctie 82, 83, 84, 85
- uitsluitingsprincipe *zie* Pauli-principe
 ultravioletcatastrofe 20
- valentie-elektron 96, 140, 142
 vaste stof 109, 149, 151, 153, 154, 159, 172
 vectorgrootheid 118
- waarneembare grootheid 80-84, 90
 waarschijnlijkheidsamplitude 83
 waarschijnlijkheidsinterpretatie 83, 94, 130, 163, 165, 168
 waarschijnlijkheidsverdeling 68, 88, 116, 118, 123, 127 e.v., 137, 139, 179
 waterstof 33, 43, 175
 waterstofatoom *zie* H-atoom
 waterstofspectrum 49
 Watson, J. D. 149
 Weisskopf, V. F. 11, 28, 31, 130, 156, 175
 Wien, W. 162
- zwart lichaam 18, 19, 175
 zwarte straling 18, 20

Kwantum- mechanica

Een eenvoudige inleiding

De natuurkunde heeft sinds het begin van deze eeuw een ontzagwekkende ontwikkeling doorgemaakt. Daarin speelde en speelt de kwantummechanica een doorslaggevende rol. Zonder enige kennis van deze theorie is het dan ook niet meer mogelijk een goed beeld te krijgen van het huidige natuurkundige denken. Toch is die kennis veelal beperkt gebleven tot een betrekkelijk klein professioneel publiek. Te klein eigenlijk gezien het belang van deze theorie, en in ieder geval kleiner dan nodig is.

De oorzaak hiervan is onder meer dat er in ons taalgebied nauwelijks boeken voorhanden zijn waarin geprobeerd wordt de kwantummechanica op elementair niveau te behandelen. Dit boek wil in die leemte voorzien. Het biedt een eenvoudige behandeling van enkele grondbeginselen van de kwantummechanica op een niveau dat niet meer voorkennis vereist dan wat gewoonlijk op onze middelbare scholen aan natuurkunde wordt behandeld. Daarbij is het niet zozeer de bedoeling de lezer te oefenen in het gebruik van de theorie. Nee, de nadruk ligt vooral op het schetsen van een globaal beeld van de principes, achtergronden en het belang van deze theorie, om daarmee de ontwikkelingen in de twintigste-eeuwse natuurkunde enigszins doorzichtig te maken.

Dr. P.L. Lijnse is als wetenschappelijk hoofdmedewerker verbonden aan de vakgroep natuurkundendidactiek van de Rijksuniversiteit Utrecht.