

Een zwaar Bohratoom

Iedere natuurkundestudent die voor het eerst met quantummechanica in aanraking komt, wordt geconfronteerd met het Bohrmodel van het waterstofatoom. Daarbij gaat het om toestanden van een elektron. Dit elektron kan vervangen worden door een (zwaarder) H^- -deeltje, zoals onderzoekers aan het Lasercentrum VU laten zien.

Ofelia Vieitez, Toncho Ivanov, Elmar Reinhold, Kees de Lange, Wim Ubachs

De Coulomb- wisselwerking tussen proton en elektron, de elektrische aantrekking gerepresenteerd door de potentiaal $V_c = -e^2/4\pi\epsilon_0 R$, zorgt voor stabiliteit in een atoom. De energie van het systeem kan niet alle waarden aannemen, en quantumtoestanden aangeduid met hoofdquantumgetal n en met discrete bindingsenergieën doen voor het eerst hun intrede. Dit concept van gebonden toestanden met negatieve energie met daarboven een ionisatiecontinuüm kan eenvoudig generaliseerd worden tot de bekende Rydbergformule:

$$E_n = E_{lim} - \frac{R_A}{n^2} \quad (1)$$

Hierin vertegenwoordigt E_n (met quantumgetal n) een zogenaamde Rydbergreeks die convergeert naar een limietwaarde E_{lim} . Deze simpele beschrijving is geldig voor een breed scala van atomaire en moleculaire Rydbergtoestanden, die allemaal gemeen hebben dat de waarde van de Rydbergschaalfactor R_A in essentie constant is voor situaties gekarakteriseerd door een zware kern omcirkeld door een licht elektron:

$$R_A = \left(\frac{\mu}{m_e}\right) R_\infty \quad \text{met} \quad (2)$$

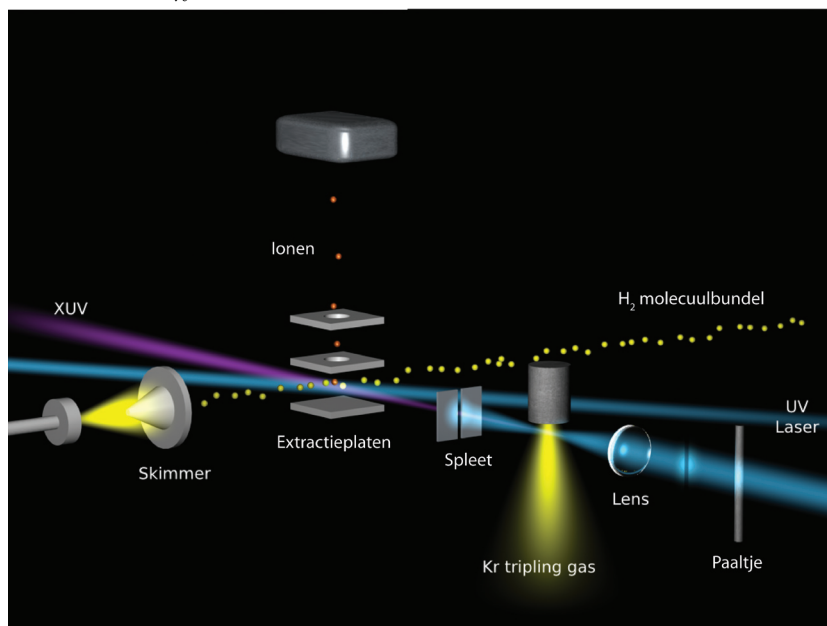
$$R_\infty = \frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2$$

De gereduceerde massa μ (de effectieve massa van het bewegende deeltje waarmee we de combinatie van kern en elektron kunnen beschrijven) is voor deze toestanden in goede benadering gelijk aan de elektronmassa m_e . Vanuit dit perspectief lijken alle atomen en moleculen sterk op elkaar. De $1/n^2$ -schaling is daarbij een gevolg van de $1/R$ -wetmatigheid in de potentiaal. De Rydbergconstante R_∞ bepaalt hoe ver de niveaus uiteen liggen [1].

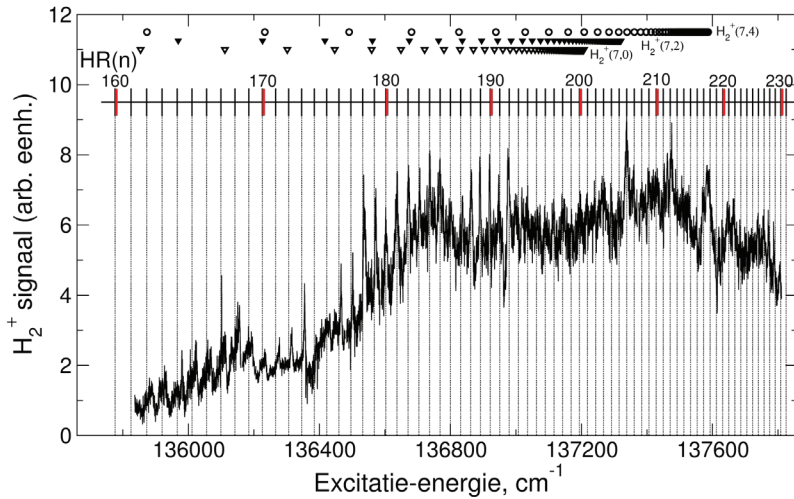
Zijn er nog andere fysische systemen met een $1/R$ -potentiaal waarbij het Rydbergconcept getest kan worden? Natuurlijk is er de gravitatiepotentiaal, die een centrale rol speelt in de Newtoniaanse hemelmechanica. Het is een leuke oefening om de Rydbergconstante voor de massa M_1 in dit systeem af te leiden:

$$R_g = (GM_1 M_2)^2 \frac{M_1}{2\hbar^2} \quad (3)$$

Voor het stelsel van zon en aarde kan dan snel berekend worden dat het overeenkomstige hoofdquantumgetal van de orde $n \sim 10^{74}$ is, zoals verwacht ruimschoots in de klassieke limiet. Voor twee waterstofatomen, uitsluitend gebonden door de gravitatie-wisselwerking, is de opsplitsing tussen de laagste twee quantumniveaus 10^{-64} cm^{-1} of 10^{-68} eV , met in de grondtoestand een Bohrstraal van $3,7 \times 10^7$ lichtjaar, een afstand die nog past binnen de afmetingen van het heelal. De vraag is of er illustraties zijn van de $1/R$ -potentiaal, die wat minder exotisch zijn dan bovenstaande voorbeelden en die bij voorkeur experimenteel toetsbaar zijn.



Figuur 1 Overzicht van de experimentele opstelling. Het paaltje en de spleet worden gebruikt om het geproduceerde XUV-licht (via generatie van de 3^e harmonische) te scheiden van het fundamentele licht. De skimmer zorgt ervoor dat een goed gecollimeerde molecuulbundel in de interactiezone komt.



Figuur 2 Gemeten spectrum waarin het energiegebied van de “zware Rydbergtoestanden” met hoofdquantumgetal $n=162$ tot $n=230$ is te zien. Ter vergelijking zijn ook de theoretische Rydbergwaarden volgens (1) en (2) toegevoegd, aangeduid als HR(n). De andere symbolen (driehoeken en cirkels) geven de posities aan waar “gewone” elektronische Rydbergtoestanden in H_2 (met een aangeslagen H_2^+ core) worden verwacht. In dit spectrum worden die niet waargenomen, in nabijgelegen energiegebieden echter wel.

Het concept van Rydbergtoestanden kan uitgebreid worden naar ‘zware’ systemen. Een systeem van een H^+ en een H^- fragment is in feite een waterstofatoom, waarin het elektron vervangen is door een zwaarder H^- deeltje. In eerder onderzoek werden golfpakketten waargenomen door foto-excitatie van H_2 net onder de dissociatielimit voor een ionpaar; dit was een indirecte aanwijzing voor zware Rydbergtoestanden [2]. Onlangs hebben we quantumtoestanden in een dergelijk ‘zwaar Bohratoom’ direct waargenomen [3].

Figuur 1 geeft een overzicht van onze experimentele opstelling. Een gepulste molecuulbundel van zuiver H_2 wordt gekruist met twee laserbundels. Een ervan is een extreem ultraviolette (XUV) bundel, die wordt gegenereerd in de vacuümkamer als derde harmonische van een gepulste UV-laser in kryptongas. De XUV-straling wordt in golflengte op een resonantie in het H_2 molecuul afgestemd, zodat wij de quantumgetallen kennen ($B^1\Sigma_u^+$ of $C^1\Pi_u$ elektronische toestand, met een welbepaald vibratie- en rotatiequantumgetal). Een tweede onafhankelijke UV-laser levert afstembare fotonen voor de tweede excitatiestap, waarmee de H^+H^- zware Rydbergtoestanden worden aangeslagen.

De totale excitatie-energie van de twee lasers is zorgvuldig gekozen: net onder de dissociatielimit voor een ionpaar ($139713,83 \text{ cm}^{-1}$), die berekend

kan worden uit bekende waarden voor de ionisatie-energie van H_2 , de dissociatie-energie van H_2^+ , en de elektronaffiniteit van het H -atoom [3].

Het energiegebied van de H^+H^- resonanties ligt boven de ionisatie-energie van het neutrale H_2 -molecuul, en na aanslag van de resonantie valt het deeltje op sub-nanoseconde tijdschaal naar een H_2^+ -ion en een elektron; op deze manieren detecteren we de zware Rydbergserie. Ook is er nog een ander vervalskanaal via dissociatie waarbij twee neutrale waterstofatomen worden geproduceerd; ook deze hebben we gemeten.

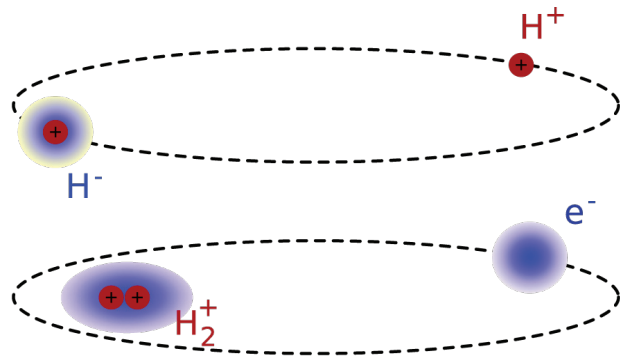
In Figuur 2 worden de experimentele resultaten samengevat. In het energiegebied tussen 134000 - 138000 cm^{-1} zien we bij excitatie, via een specifieke quantum-tussentoestand in H_2 , een lange reeks resonanties op regelmatige afstanden.

Deze resonanties kunnen eenvoudig geïnterpreteerd worden als een Rydbergreeks die convergeert naar de dissociatielimit van een ionpaar. De resonanties voldoen aan formule (1) voor quantumgetallen $n \sim 160$ - 230 ; alleen moet een

massaschaling plaatsvinden, want het elektron is immers vervangen door een zwaar H^- deeltje. Die vervanging verandert ook de gereduceerde massa in formule (2). Die wordt nu $\mu = 918,5761 m_e$, waardoor de Rydbergconstante bijna duizend keer groter wordt dan in een gewoon atoom. Vandaar dat we spreken over een ‘zwaar Bohratoom’.

Vergelijkbare resonanties kunnen worden waargenomen bij excitatie via verschillende tussentoestanden in H_2 . Dat de Rydbergreeks niet wordt waargenomen voor kleine quantumgetallen (< 100) is goed te begrijpen uit het feit dat het H^- fragment geen puntlading is. Door de ruimtelijke uitgebreidheid moet de afstand tussen H^+ en H^- meer dan ongeveer 12 atomaire eenheden bedragen om de vorming van een ‘zware’ Rydbergtoestand mogelijk te maken.

Omdat directe excitatie van ‘zware’ Rydbergtoestanden op basis van het Franck-Condonprincipe (dat zegt dat de intensiteit afhangt van de overlap van de golf functies in de grondtoestand en de aangeslagen toestand) uitermate onwaarschijnlijk is, moet er een ander mechanisme zijn dat na foto-excitatie leidt tot een bezetting van deze quantumtoestanden. Omdat het een experimenteel feit is dat bij excitatie van moleculaire waterstof juist boven de dissociatielimit voor ionparen ook H^- gedetecteerd wordt, blijkt een koppeling met het ionpaarkanaal aanwezig. Naar de details van dit mechanisme wordt nog onderzoek gedaan, hoewel duidelijk is dat we met een zogenaamde ‘complexe resonantie’ te maken hebben. In dit model speelt elektroncorrelatie een belangrijke rol. Ook onder totaal andere omstandigheden, waar de interactie tussen deeltjes



Figuur 3 Boven: Configuratie van zware Rydbergtoestanden. Onder: Configuratie van ‘gewone’ elektronische Rydbergtoestanden.

Maria Ofelia Vieitez studeerde voor haar Masters aan het Royal Institute of Technology te Stockholm. Daar begon ze ook aan haar PhD, maar ronde dit werk af aan het Lasercentrum VU. Inmiddels werkt ze als PostDoc aan de VU op een ESA-project over spontane Rayleigh-Brillouin verstrooiing in atmosferische gassen.



Toncho Ivanov behaalde zijn Masters aan de Universiteit van Sofia, na ook een stage aan de VU Brussel te hebben gedaan. Hij

werkt nu aan een promotieonderzoek in het Lasercentrum VU over spectroscopie en dissociatie van moleculair waterstof.

Elmar Reinhold studeerde in Münster (Dipl. Phys.) en behaalde zijn Doctorsgraad in het Lasercentrum VU. Heeft daarna in Parijs gewerkt, alsmede bij ESA en bij NIKHEF. Momenteel werkt hij aan onderwijsvernieuwing middelbare scholen via VU en UvA.



Kees de Lange studeerde natuurkunde aan de UvA, was hoogleraar Molecuulspectroscopie aan de VU, hoogleraar Laserspectroscopie aan de UvA, en is nu gasthoogleraar aan de VU.

Wim Ubachs behaalde zijn Doctorsgraad in Nijmegen en is nu hoogleraar Atoom, Molecuul en Laserfysika aan de VU en directeur van het Lasercentrum VU.



wimu@few.vu.nl

tjes door een $1/R$ -potentiaal beschreven wordt, kan sprake zijn van 'zware' Rydbergtoestanden. Te denken valt aan het proton-antiprotonpaar ($p\bar{p}$), waarvoor de Rydbergconstante gelijk is aan die van H^+H^- . In recente botsingsexperimenten tussen antiprotonen en neutrale edelgassen worden eerst een aantal elektronen door de impact van de botsing verwijderd, waarna het antiproton gebonden

wordt in de resterende Coulombpotentiaal. Het stralingsverval dat vervolgens optreedt, vindt stapsgewijs plaats via 'zware' Rydbergtoestanden [4]. Zoals zo vaak in de natuurkunde, blijft het boeiend dat een relatief eenvoudig concept de sleutel vormt tot een gedetailleerd begrip van al deze op het eerste gezicht totaal ongerelateerde verschijnselen.

Referenties

- 1 T.R. Gallagher, 'Rydberg Atoms', Cambridge University Press (1994).
- 2 E. Reinhold, W. Ubachs, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 013001 (2002); zie ook *NTvN* **68**, 118 (2002).
- 3 M.O. Vieitez, T.I. Ivanov, E. Reinhold, C.A. de Lange, W. Ubachs, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 163001 (2008).
- 4 D. Gotta, K. Rashid, B. Fricke, P. Indelicato, L.M. Simons, *Eur. Phys. J. D* **47**, 11 (2008).