

# Alcoholtest voor zwal- kende natuurconstanten

**Sinds Pythagoras het verband ontdekte tussen de lengte van een snaar en de toon die de snaar voortbrengt, heeft de wetenschap zich toegelegd op het ontdekken van de wetmatigheden in de natuur en deze beschreven in de vorm van zogenaamde natuurwetten. Deze wetten hebben twee algemene eigenschappen: (i) ze zijn geschreven in de vorm van mathematische vergelijkingen en (ii) ze bevatten empirische parameters, de natuurconstanten.** Paul Jansen

Een eenvoudig voorbeeld is de zwaartekracht aan het aardoppervlak,  $F_z = mg$ . Wiskundig gezien zegt deze vergelijking dat de zwaartekracht, op bijvoorbeeld een appel, recht evenredig is met de massa van de appel, terwijl de 'koppelingsconstante'  $g$  bepaalt dat een vallende appel een versnelling ondervindt van ongeveer  $10 \text{ m/s}^2$ . De constante  $g$  is echter geen fundamentele natuurconstante, want uit nauwkeurige metingen volgt dat  $g$  varieert over het aardoppervlak. Newtons algemene gravitatiewet is in staat de waarde van  $g$  en de kleine variaties daarin te verklaren op een meer fundamenteel niveau;  $g$  kan worden geschreven als functie van de massa van de aarde, de afstand tot het (massa)middelpunt van de aarde en

de gravitatieconstante  $G$ . Een logische vraag is nu of we de waarde van  $G$  ook kunnen verklaren op een dieper niveau. Dit blijkt (nog) niet het geval te zijn en  $G$  kan dus worden beschouwd als een echte fundamentele natuurconstante. Dat de waarde van  $G$  ook echt constant is, volgt niet uit de zwaartekrachttheorie of enige andere theorie, maar is een aanname die gebaseerd is op observaties en een sterk geloof in het principe dat de resultaten van een experiment onafhankelijk zijn van ruimte en tijd (lokale positie-invariantie). Een van de eerste wetenschappers die speculeerde over een mogelijke variatie in de waarde van  $G$  was Dirac. In zijn *Large Number Hypothesis* (1937) stelt hij dat de waarde van  $G$  omgekeerd evenredig is met de leeftijd van het heelal. Hoewel Diracs theorie onjuist bleek, opende het toetsen ervan aan paleontologische en kosmologische waarnemingen de zoektocht naar veranderende natuurconstanten.

## Zijn de natuurconstanten wel constant?

Ook het succesvolle standaardmodel bevat een aantal fundamentele natuurconstanten. De fijnstructuurconstante,  $\alpha = 1/137,035999074(44)$ , en de massaverhouding tussen het pro-

ton en het elektron,  $\mu = m_p/m_e = 1836,15267245(75)$ , zijn hiervan het meest relevant voor de atoom- en molecuulfysica. In 1999 publiceerde een Australische groep een artikel waarin zij stelde een indicatie gevonden te hebben voor een variatie in  $\alpha$  [1]. De fijnstructuurconstante is een maat voor de kracht van de elektromagnetische wisselwerking en bepaalt in grote mate de stabiliteit van atomen en moleculen. Het is precies deze afhankelijkheid waardoor de Australiërs een minimale variatie in  $\alpha$  konden detecteren. Een verandering van  $\alpha$  manifesteert zich namelijk als een verandering in het spectrum van atomen en moleculen. Door met een telescoop spectra van atomen in gaswolken in het vroege universum te vergelijken met spectra gemeten op aarde, was de Australische groep in staat een verandering van  $\alpha$  te detecteren op zes cijfers achter de komma.

Aan de Vrije Universiteit houden wij ons voornamelijk bezig met  $\mu$ . Omdat de massa van het proton voor 99% bestaat uit de bindingsenergie tussen de drie quarks waaruit het proton is opgebouwd, is  $\mu$  een maat voor de wisselwerking van de sterke kernkracht. In 2006 heeft onze groep een indicatie gevonden voor een variatie in  $\mu$  door het vergelijken van absorptielijnen in moleculair waterstof [2].

Paul Jansen studeerde scheikunde aan de Vrije Universiteit. Het onderwerp van zijn promotieonderzoek (onder leiding van Rick Bethlem en Wim Ubachs in de groep Atomen, Moleculen en Lasers aan de VU) is precisie-metingen aan koude moleculen met als doel een limiet voor  $\mu$ -variatie te bepalen. Een deel van zijn onderzoek is hier beschreven.

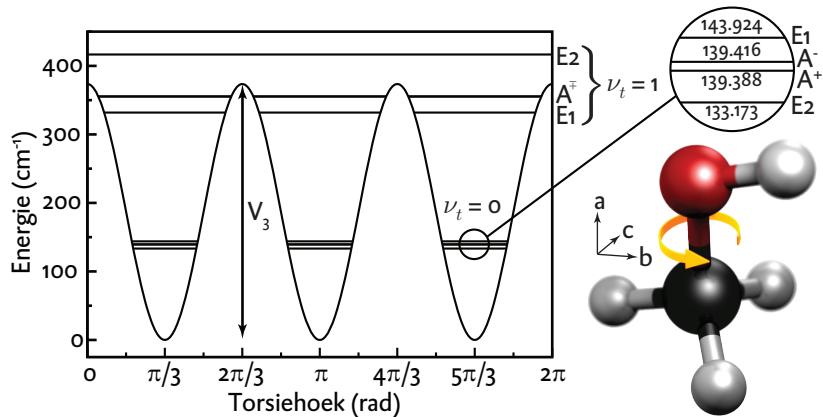


pjansen@few.vu.nl

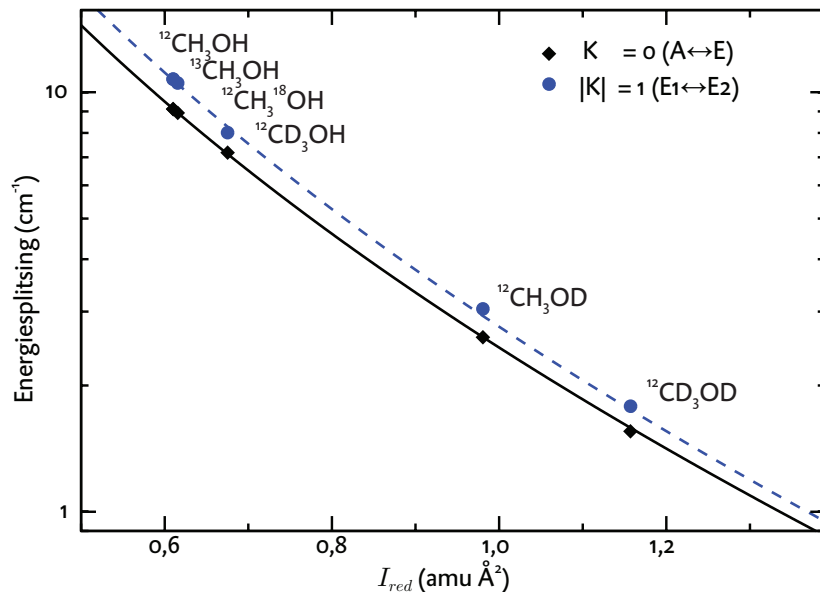
De massa-afhankelijkheid van alle energieniveaus, en dus ook van alle absorptielijnen, wordt uitgedrukt in een gevoeligheidsfactor  $K_\mu$ . De waargenomen spectraallijnen in het waterstofmolecuul hebben gevoeligheidsfactoren tussen de -0,02 en +0,05. Dit betekent dat de absorptielijnen in  $H_2$  niet meer dan 0,05% verschuiven, als  $\mu$  met 1% verandert. Het is dus van groot belang om een molecuul te vinden dat veel gevoeliger is voor een verandering in  $\mu$  dan moleculair waterstof. Ongeveer een jaar geleden ontdekten wij dat bepaalde overgangen in methanol aan deze eis voldoen [3] en daarmee uitermate geschikt zijn om vast te stellen of  $\mu$  daadwerkelijk verandert. In dit artikel laten we aan de hand van metingen aan methanol zien dat de verandering onvoorstelbaar klein is, als  $\mu$  verandert.

### Gehinderde interne rotatie in methanol

Methanol (figuur 1) is het kleinste alcoholmolecuul en bestaat uit een methylgroep ( $CH_3$ ) met daaraan een hydroxylgroep (OH). De C-O-binding is niet star, zodat de methylgroep kan draaien ten opzichte van de hydroxylgroep. Deze zogenaamde interne rotatie wordt sterk gehinderd door de waterstofatomen op beide groepen met als gevolg dat er bij een volledige rotatie drie energiebarrières moeten worden overwonnen. In het extreme geval dat de barrières oneindig hoog zijn, vindt er geen interne rotatie plaats, maar oscilleert de hydroxylgroep in een van de drie equivalente energiminima. De oplossingen van de Schrödingervergelijking komen in dit geval overeen met die van een drievoudig ontaarde harmonische oscillator. In het andere uiterste is de barrière verwaarloosbaar laag en kunnen de groepen vrij links- of rechtsom draaien ten opzichte van elkaar en zijn de energieniveaus tweevoudig ontaard. De hoogte van de barrière in methanol ligt tussen deze twee extremen in. Klassiek gezien kan de interne rotatie alleen plaatsvinden wanneer de rotatie-energie hoog genoeg is om de barrière te overwinnen. Dankzij het quantummechanische tunnelffect (zie kader Quantummechanische tunnelbeweging) kan het waterstofatoom door de barrière heen tunnelen om zich zo van het ene naar het andere minimum te verplaatsen. Als gevolg



Figuur 1 Schematische weergave van methanol (rechts) en de potential voor interne rotatie (links).



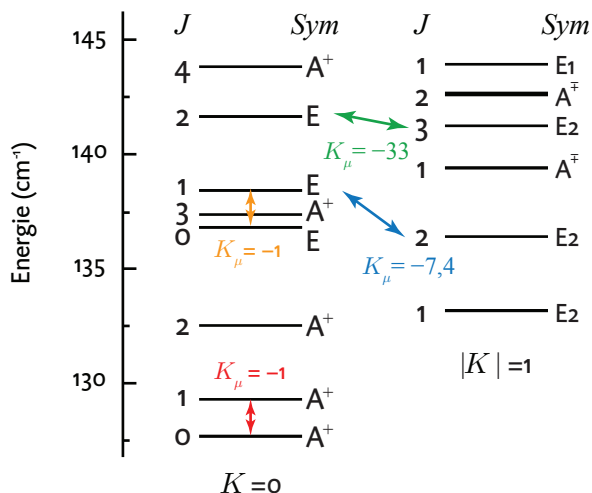
Figuur 2 Energiesplitsing in de isotopologen van methanol als functie van het gereduceerde traagheidsmoment.

## Quantummechanische tunnelbeweging

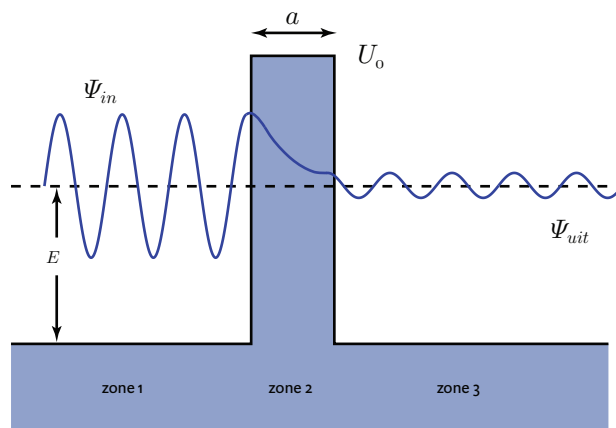
Een bijzonder verschijnsel in de quantummechanica is het effect waarbij een deeltje, dat niet genoeg energie heeft om over een barrière heen te gaan, door de barrière heen 'tunnelt'. Het tunnelffect speelt onder meer een rol bij het uitzenden van alfastraling door radioactieve kernen en de inversie van het ammoniakmolecuul. Een simpele situatie is weergegeven in figuur 4. De ruimte kan worden opgedeeld in drie zones. In zone 1 en 3 is de energie van het deeltje  $E$  groter dan de barrière  $U_0$ , en in zone 2 is dit net andersom. Wanneer de Schrödingervergelijking voor iedere zone apart wordt opgelost, volgt dat in zone 1 en 3 de golf functie sinusvormig is terwijl deze in zone 2 afvalt als een negatieve  $e$ -macht. De afzonderlijke oplossingen kunnen worden samengevoegd om de totale (continu differentieerbare) golf functie te vinden. Er volgt dat er een kans bestaat om het deeltje aan de andere kant van de barrière te vinden. De kans dat het deeltje met massa  $m$  naar de andere kant tunnelt wordt gegeven door

$$T = \exp\left[-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\right]$$

Het tunnelffect hangt dus exponentieel af van de effectieve massa van het deeltje.



**Figuur 3** Energie van de laagst gelegen rotatietoestanden in methanol.



**Figuur 4** Het tunneffect voor een simpele barrière.

## Rotatieovergangen in methanol

De totale torsie-rotatie-energie in methanol wordt in twee stappen uitgerekend. In de eerste stap wordt alleen de Schrödingervergelijking voor de interne rotatie opgelost. Uit deze berekening volgt de torsie-energie voor de verschillende  $K$ -niveaus,  $E_{tors}(K)$ . In de tweede stap wordt de algehele rotatie van het methanolmolecuul meegenomen. Omdat in methanol het waterstofatoom van de alcoholgroep niet ver van de moleculaire as ligt, kan de algehele rotatie redelijk goed worden vergeleken met een tol. Figuur 5 toont een methanolmolecuul waar de rotatie is aangegeven met de hoekmomentvector  $J$ . De grootte van  $J$  is gegeven door  $\hbar[J(J+1)]^{1/2}$  en de projectie van  $J$  op de moleculaire as wordt aangeduid met  $K$ . Onder de aanname dat methanol echt symmetrisch is, wordt de totale torsie-rotatie-energie in eerste benadering gegeven door

$$E_{rot}(J,K) = BJ(J+1) + (A-B)K^2 + E_{tors}(K),$$

met de rotatieconstanten  $A = \hbar^2/2I_a$  en  $B = \hbar^2/2I_b$  en waar  $I_a$  en  $I_b$  de traagheidsmomenten zijn langs de  $a$ - en  $b$ -as ( $I_c = I_b$ ). Omdat de traagheidsmomenten lineair schalen met de atoommassa's in het molecuul, schaalde de pure rotatie-energie omgekeerd evenredig met de massa's. Een variatie in  $\mu$  van 1% leidt tot een verandering in pure rotatie-energie van -1% en een verandering in torsie-energie van -2,5% (zie tekst).

van deze tunnelbeweging worden de energieniveaus van de harmonische oscillator in drieën gesplitst. Deze drie niveaus worden aangeduid met de symmetrielabels A, E<sub>1</sub> en E<sub>2</sub>. Naast interne rotatie (of torsie) van de methyl- en hydroxylgroep langs de C-O-binding kan het methanolmolecuul als geheel draaien langs de  $a$ -,  $b$ - en  $c$ -as. De totale energie is de som van de torsie- en algehele rotatie-energie.

### De gevoeligheid van methanol voor een verandering in $\mu$

De grootte van de splitsing van de energieniveaus in methanol hangt exponentieel af van de hoogte van de

barrière en van de 'effectieve massa' die door de barrière heen tunnelt. Het ligt dus voor de hand dat het energieverval tussen bijvoorbeeld een A- en een E<sub>1</sub>-niveau of tussen een E<sub>1</sub>- en E<sub>2</sub>-niveau erg gevoelig is voor een verandering in  $\mu$ . In figuur 2 is het energieverval tussen deze toestanden voor verschillende isotopologen van methanol weergegeven als functie van de 'effectieve massa'. Omdat het hier om een relatieve rotatie gaat tussen twee groepen, is de effectieve massa gelijk aan het gereduceerde traagheidsmoment van de methyl- en hydroxylgroep. De definitie van het gereduceerde traagheidsmoment is analoog

aan die van de gereduceerde massa,  $I_{red} = I_{CH_3}I_{OH}/(I_{CH_3} + I_{OH})$ . Doordat  $K_\mu$  is gedefinieerd als de proportionaliteitsconstante tussen de fractionele verandering in  $\mu$  en fractionele verandering in overgangsenergie, volgt uit de afgeleide van de gefitte lijnen in figuur 2 dat het energieverval tussen de niveaus in methanol 2,5% kleiner wordt, als  $\mu$  1% groter wordt. Dit is 50 maal gevoeliger dan de overgangen in H<sub>2</sub>. Helaas volgt uit quantummechanische selectieregels dat er geen overgangen mogelijk zijn tussen de A-, E<sub>1</sub>- en E<sub>2</sub>-niveaus omdat deze een andere symmetrie hebben. Alleen overgangen tussen dezelfde symmetrietoestand zijn toegestaan. Interessant genoeg zal blijken dat juist deze overgangen extreem gevoelig zijn voor een variatie in de waarde van  $\mu$ .

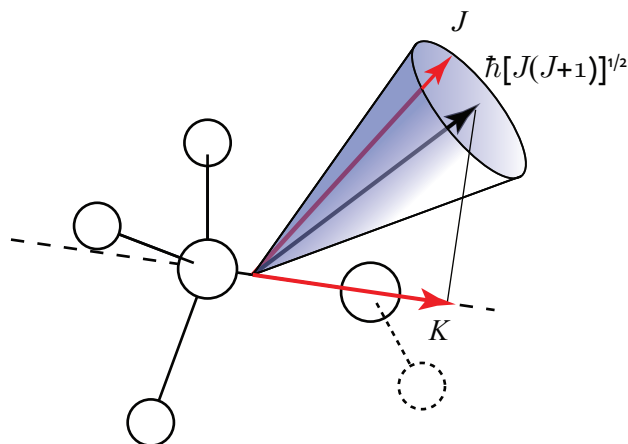
### Gemengde overgangen

Om de verschillende overgangen in methanol te karakteriseren wordt, naast de symmetrie van de niveaus, gebruikgemaakt van de twee quantumgetallen  $J$  en  $K$  (zie kader Rotatieovergangen in methanol). In figuur 3 zijn de laagste energietoestanden van methanol weergegeven. Een overgang tussen niveaus met verschillende  $J$  maar gelijke  $K$ , zoals aangegeven met de rode en gele pijl, verandert alleen de rotatie-energie van het molecuul (de torsie-energie blijft gelijk). De gevoeligheidsfactor van deze overgangen is  $K_\mu = -1$ . Wanneer ook de waarde van  $K$  verandert, verandert naast de rotatie-energie ook de torsie-energie. Omdat rotatie- en torsie-energie beide op een andere manier afhankelijk zijn van  $\mu$ , zal een verandering in  $\mu$

altijd een absolute verandering in de overgangsenergie teweegbrengen. Voor sommige overgangen gebeurt er iets interessants: het verschil in rotatie-energie wordt grotendeels gecompenseerd door het verschil in torsie-energie en de twee niveaus hebben bijna dezelfde energie. Hierdoor wordt de relatieve verandering in de overgangsenergie enorm versterkt. Overgangen waarbij algehele rotatie wordt omgezet in interne rotatie (of andersom) vertonen dus de grootste gevoeligheid voor  $\mu$ -variatie. De gevoeligheidsfactoren  $K_\mu$  van de blauwe en groene pijl in figuur 3 zijn respectievelijk -7,4 en -33. Wat methanol erg bijzonder maakt is de aanwezigheid van overgangen die compleet anders reageren op een verandering in  $\mu$ . Het is dus mogelijk om variatie van  $\mu$  te onderzoeken door enkel gebruik te maken van overgangen in methanol, waardoor een groot aantal systematische effecten te vermijden is.

### Metten aan methanol

Methanol is een van de meest voorkomende complexe moleculen in het heelal. Radioastronomen treffen zelfs zo vaak methanollijnen aan tijdens hun zoektocht naar andere moleculen, dat ze methanol ook wel het 'onkruid van de ruimte' noemen. Kort geleden is er zelfs methanol ge-



**Figuur 5** Definitie van quantumgetallen  $J$  en  $K$  in methanol.

detecteerd in een gaswolk op een afstand van zeven miljard lichtjaar van de aarde. Het afgelopen jaar hebben wij, samen met collega's van het Max Planck Instituut voor Radioastronomie te Bonn, de vier lijnen aangegeven in figuur 3 in deze gaswolk geobserveerd met de 100 m-radiotelescoop in Effelsberg en de lijnposities vergeleken met labmetingen. Uit deze vergelijking concludeerden wij dat  $\Delta\mu/\mu = (0,0 \pm 1,0) \cdot 10^{-7}$  [4]. Een mogelijke verandering van  $\mu$  is dus kleiner dan één honderdduizendste procent in zeven miljard jaar. De onzekerheid in de bepaling van  $\Delta\mu/\mu$  met behulp van methanol is ruim twee ordes van grootte kleiner dan de onzekerheid in

de bepaling van  $\Delta\mu/\mu$  met behulp van moleculair waterstof en is consistent met een nulresultaat. Moleculen op aarde lijken dus, tot zeven cijfers achter de komma, gebonden te zijn aan dezelfde natuurwetten als moleculen in een gaswolk die zeven miljard lichtjaar van de aarde verwijderd is.

### Referenties

- 1 J.K. Webb et al., *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 884.
- 2 E. Reinhold et al., *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 151101; W. Ubachs et al., *NTvN* **72** (2006) 184.
- 3 P. Jansen et al., *Phys. Rev. Lett.*, **106** (2011) 100801.
- 4 J. Bagdonaite, P. Jansen et al., *Science* **339** (2013) 46.

## Nieuws

### Tube4proof

De website Sciencespace.nl schrijft dit jaar voor de derde maal de wedstrijd Tube4proof uit voor middelbare scholieren. Als ze een filmpje maken van een proef en deze op YouTube zetten, kunnen ze leuke prijzen winnen. Op de website vind je aanwijzingen voor het maken van een filmpje en is omschreven wat je moet inzenden. Ook vind je er een aantal inzendingen van voorgaande jaargangen. De bovenbouwprijs is een reis naar Parijs, naar het Cité des Sciences. Voor de beste inzending uit de onderbouw is een digitale videocamera beschikbaar. De aanmoedigingsprijzen zijn abonnementen op Quest. Het insturen van een filmpje kan tot 8 juni 2013. Meer info: <http://bit.ly/WBKFEo>.

### Verkiezing NNV-voorzitter

De verkiezing van de nieuwe NNV-voorzitter loopt bijna ten einde. U kunt in de laatste dagen van maart nog stemmen op [www.nnv.nl](http://www.nnv.nl). Op de website zijn bij de verkiezingsmodule stukken te vinden die door de kandidaten zelf zijn geschreven waarin zij meer persoonlijke informatie geven. In het vorige nummer van het NTvN zijn interviews van de drie kandidaat-voorzitters opgenomen. Deze zijn ook geplaatst op [www.ntvn.nl](http://www.ntvn.nl).

## Erratum

### Geen Delft maar Nijmegen

In het maartnummer staat in de uitslag van de NTvN-prijsvraag per abuis dat eerste prijswinnaar Duncan den Boer zijn promotieonderzoek aan de TU Delft heeft verricht. Dit had Radboud Universiteit Nijmegen moeten zijn.