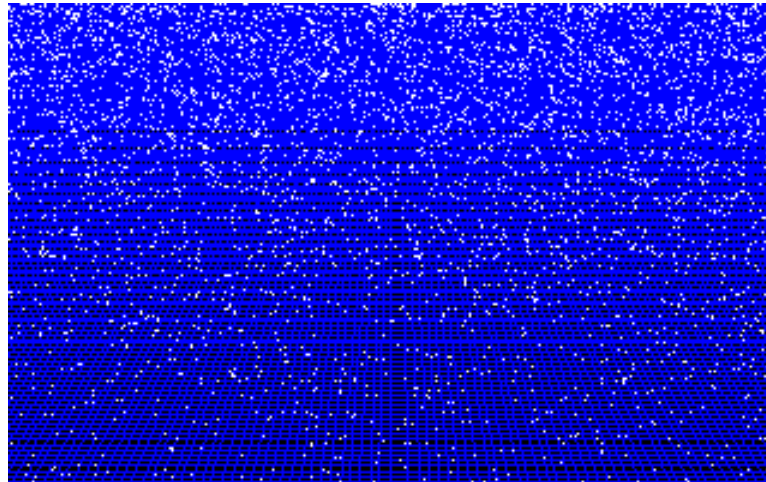


Kwantummechanica

HOVO cursus



Jo van den Brand

Lecture 3: 6 oktober 2016

Copyright (C) VU University Amsterdam 2016

Overzicht

- **Algemene informatie**
 - Jo van den Brand
 - Email: jo@nikhef.nl
 - 0620 539 484 / 020 592 2015
 - Nikhef, room: N3.47
- **Colleges**
 - Course information: www.nikhef.nl/~jo/kwantum
- **Boeken**
 - Dictaat
- **Zelfstudie**
 - Wiskunde: vectoren, complexe getallen, lineaire algebra
- **Response gedurende het college**

Week 3

- **Les 4: Grondslagen van de kwantummechanica**
 - Operatoren en Hilbertruimte
 - Grondslagen
 - Onzekerheid in de kwantumfysica
 - Tijdsevolutie van een system
 - Meer-deeltjes systemen
- **Opgaven: zie website**

Functies in de Hilbertruimte

Functies gedragen zich formeel als vectoren

Een n -dimensionale vector $\mathbf{a}$ wordt gedefinieerd door aan elke heeltallige waarde van de *index* i ($i = 1, \dots, n$) een getal toe te voegen, dat de component a_i van de vector voorstelt

Een functie f wordt gedefinieerd door aan elk waarde van het *argument* x ($-\infty < x < \infty$) een getal toe te voegen, dat de functiewaarde $f(x)$ voorstelt

Twee vectoren $\mathbf{a}$ en $\mathbf{b}$ kunnen worden opgeteld tot een nieuwe vector $\mathbf{c}$, indien men voor elke index i de componenten a_i en b_i optelt en de som gelijk stelt aan c_i

Twee functies f en g kunnen worden opgeteld tot een nieuwe vector h , indien men voor elk argument x de functiewaarden $f(x)$ en $g(x)$ optelt en de som gelijk stelt aan $h(x)$

Het inproduct $\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle$ van twee vectoren $\mathbf{a}$ en $\mathbf{b}$ wordt verkregen door voor elke index de twee componenten a_i^* en b_i te vermenigvuldigen. De som van al deze producten wordt het inproduct genoemd,

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n a_i^* \cdot b_i$$

Het inproduct $\langle f | g \rangle$ van twee complexe functies f en g wordt verkregen door voor elk argument x de functiewaarden te vermenigvuldigen. De integraal van al deze producten wordt het inproduct genoemd,

$$\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \cdot g(x) dx$$

Functies in de Hilbertruimte

Functies gedragen zich formeel als vectoren

De lengte of norm van een vector of functie wordt gedefinieerd als de wortel uit het inproduct van de vector of functie met zichzelf

$$|a| = \sqrt{\langle a|a \rangle} \quad |f| = \sqrt{\langle f|f \rangle}$$

De hoek tussen twee vectoren of functies wordt ook met behulp van het inproduct gedefinieerd,

$$\cos \phi = \sqrt{\frac{\langle a|b \rangle \langle b|a \rangle}{\langle a|a \rangle \langle b|b \rangle}} \quad \cos \phi = \sqrt{\frac{\langle f|g \rangle \langle g|f \rangle}{\langle f|f \rangle \langle g|g \rangle}}$$

Twee functies **f** en **g** zijn orthogonaal als $\langle f|g \rangle = 0$ en parallel als $\mathbf{f} = c\mathbf{g}$

Merk op dat $\langle f|g \rangle^* = \langle g|f \rangle$. Verder dient de functie kwadratisch integreerbaar te zijn, dus $\int |f(x)|^2 dx < \infty$

Hilbertruimte: een abstracte vectorruimte die voorzien is van de extra structuur van een inwendig product. Een hilbertruimte veralgemeent het begrip euclidische ruimte en breidt de methoden van de vectoralgebra en analyse van de 3-dimensionale euclidische ruimte uit naar ruimten met een eindig- of oneindig aantal dimensies



David Hilbert 1862 - 1943

Bases in de Hilbertruimte

Functies kunnen geschreven worden als lineaire combinaties van basisfuncties

Voorbeeld: verzameling van alle polynomen $P(N)$ van de graad $< N$

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{N-1}x^{N-1} \quad -1 \leq x \leq 1$$

Voor de handliggende basis $|e_1\rangle = 1, |e_2\rangle = x, |e_3\rangle = x^2, \dots, |e_N\rangle = x^{N-1}$

We hebben nu een N -dimensionale vectorruimte

Deze basis is niet orthonormal, $\langle e_1 | e_1 \rangle = \int_{-1}^1 1 dx = 2, \quad \langle e_1 | e_3 \rangle = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}$

Gram-Schmidt procedure levert een orthonormale basis: de Legendre-polynomen

$$|e'_n\rangle = \sqrt{n - \frac{1}{2}} P_{n-1}(x), \quad (n = 1, 2, N)$$
$$\begin{aligned} P_0 &= 1 \\ P_1 &= x \\ P_2 &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \\ P_3 &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \\ P_4 &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \\ P_5 &= \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x) \end{aligned}$$



A.M. Legendre, 1752 - 1833

Bases in de Hilbertruimte

Functies kunnen geschreven worden als lineaire combinaties van basisfuncties

Voorbeeld: Joseph Fourier, verzameling van alle goniometrische functies $T(N)$ van de vorm

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N-1} [a_n \sin(n\pi x) + b_n \cos(n\pi x)] \quad -1 \leq x \leq 1$$

Een orthonormale basis

$$|e_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{in\pi x}, \quad (n = 0, \pm 1, \dots, \pm(N-1))$$

We hebben nu een N -dimensionale vectorruimte

We gebruiken superpositie van orthogonale goniometrische functies om andere functies te beschrijven

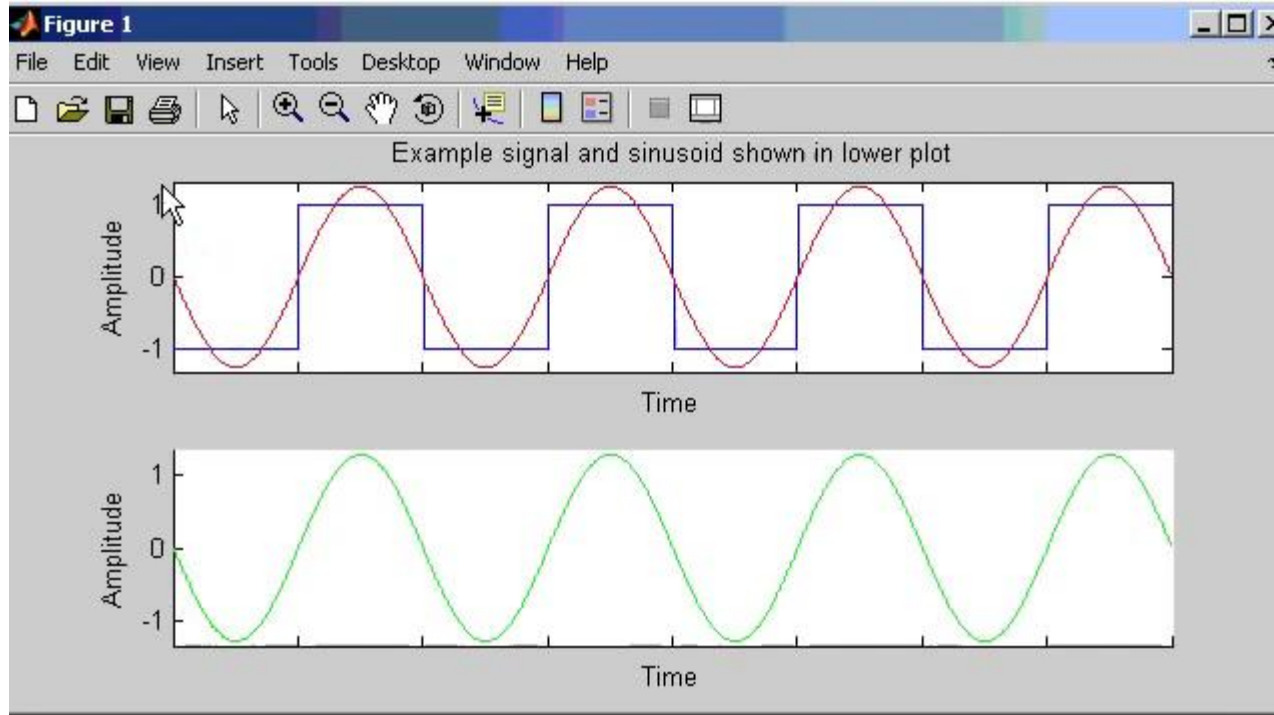
Dit staat bekend als Fourieranalyse



Joseph Fourier, 1768 - 1830

Fourieranalyse

We schrijven een *blokvormig* signaal als lineaire combinatie van goniometrische functies



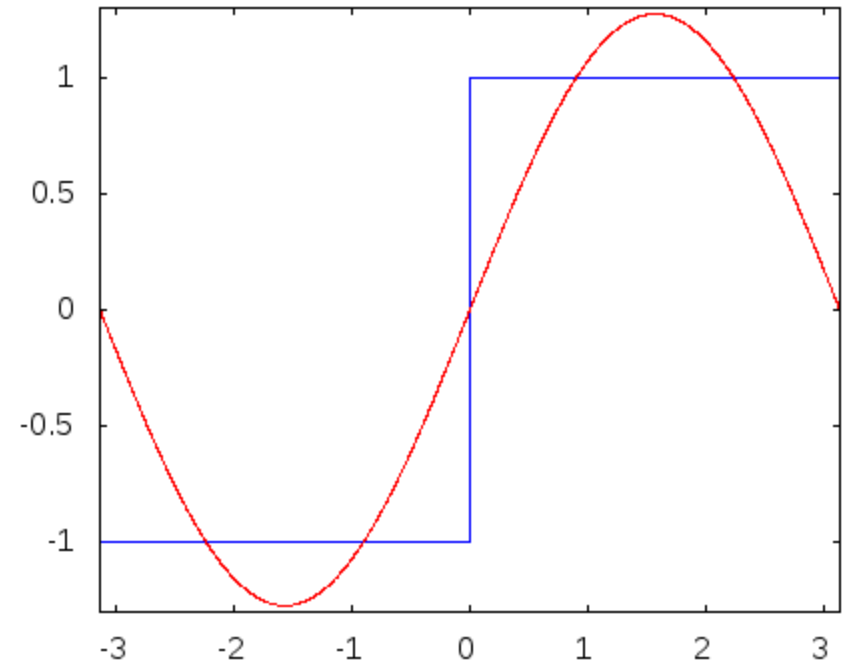
$$f(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

<https://www.youtube.com/watch?v=CXC3FTFEZyQ>

Fourieranalyse

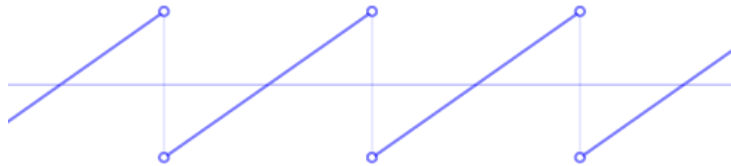
We schrijven een *blokvormig* signaal als lineaire combinatie van goniometrische functies

De som van de eerste 200 termen



Source: Wikipedia

Analyse van een *zaagtand*-signaal



$N = 0$

Fouriertransformatie

We kunnen de functie $f(t)$ vanuit het “tijd-domein” transformeren naar een nieuwe functie $\hat{f}(\omega)$ in het “frequentie-domein”

We kunnen de originele functie $f(t)$ zien als “amplitude in de tijd” en de getransformeerde functie $\hat{f}(\omega)$ als “amplitude per frequentie”

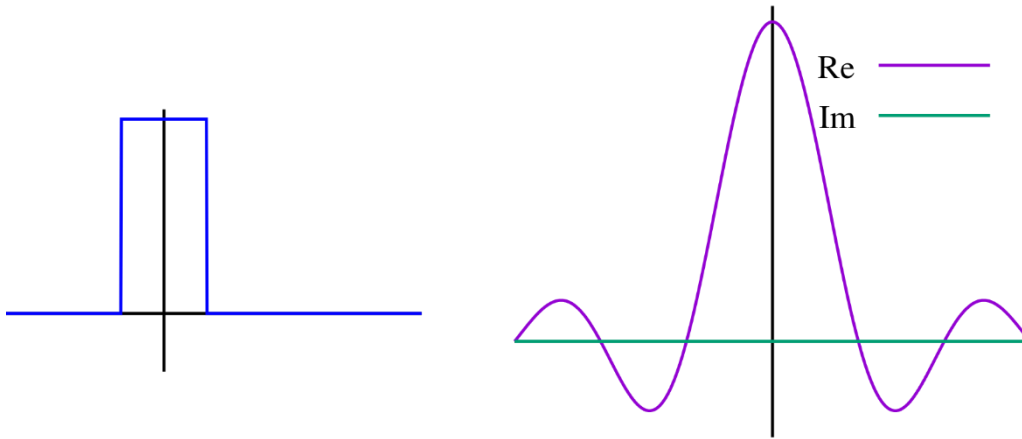


Source: Wikipedia

Fouriertransformatie

We kunnen de functie $f(x)$ vanuit het transformeren naar een nieuwe functie $F(k)$

We kunnen ook een Fouriertransformatie maken van een gelokaliseerde functie



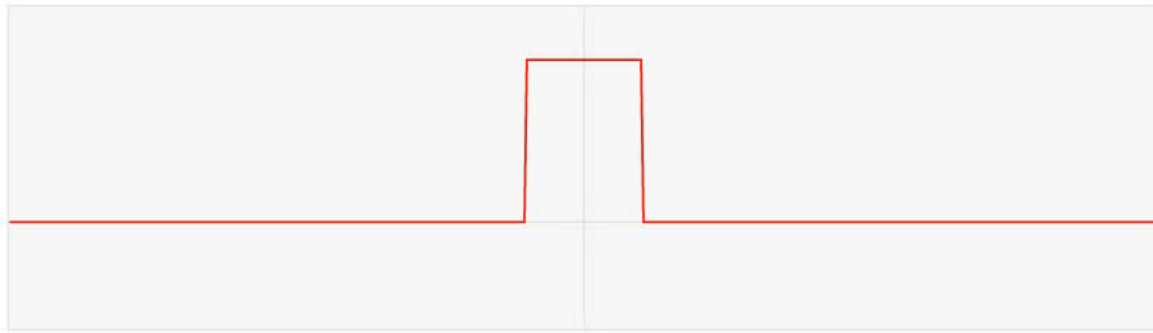
$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{2\pi i k x} dk$$

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i k x} dk$$

Fourieranalyse

We schrijven een *blokvormig* signaal als lineaire combinatie van goniometrische functies

We kunnen ook een Fouriertransformatie maken van de gelokaliseerde functie $f(x)$



$f(x)$

<https://www.youtube.com/watch?v=r4c9ojz6hJg>

Matrices en operatoren

Door matrixvermenigvuldiging kunnen we een nieuwe vector **b** verkrijgen uit een originele vector **a**

Voorbeeld: $\mathbf{M} = m_{ik} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$

Dan geldt $\mathbf{b} = \mathbf{M}\mathbf{a}$ met $b_i = \sum_{k=1}^n m_{ik} a_k$

De component i van vector **b** is het inproduct van rij i van de matrix met de vector **a**

Een matrix is een lineaire vectorfunctie en voegt aan elke vector **a** een andere vector **b** = **Ma** toe. Lineair betekent $\mathbf{M}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \mathbf{M}\mathbf{a} + \mathbf{M}\mathbf{b}$

Een lineaire operator voegt aan elke functie **f** een andere functie **g** = **Af** toe, waarbij

$$\mathbf{A}(\mathbf{f}_1 + \mathbf{f}_2) = \mathbf{A}\mathbf{f}_1 + \mathbf{A}\mathbf{f}_2$$

Voorbeeld	Actie
Additie van een constante	$\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{f} + a$
Vermenigvuldiging met een constante	$\mathbf{A}\mathbf{f} = a\mathbf{f}$
Vermenigvuldiging met x	$\mathbf{A}\mathbf{f} = x\mathbf{f}$
Differentiëren naar x	$\mathbf{A}\mathbf{f} = \frac{d}{dx}\mathbf{f}$
Integraaloperator met 'kernel' $K(x, x')$	$\mathbf{A}\mathbf{f} = \int K(x, x')f(x')dx' = g(x)$

Eigenfuncties en eigenwaarden

Een operator heeft op een functie - net zoals een matrix dat heeft op een vector - in het algemeen twee acties: hij verandert de lengte en hij verandert de richting

Van belang zijn vooral die gevallen waarbij een rotatie achterwege blijft, waarbij de functie $\mathbf{A}f$ parallel is aan de functie f

Dan geldt $\mathbf{A}f = af$

Functies die door een gegeven operator niet geroteerd worden heten de *eigenfuncties* van die operator. De bijbehorende waarden van a heten de *eigenwaarden* van de operator

Als er bij dezelfde eigenwaarde meerdere eigenfuncties horen, dan noemt men die eigenwaarden en eigenfuncties *ontaard*

In kwantummechanica zijn *hermitische* operatoren van belang

Definitie $\langle f | Ag \rangle = \langle Af | g \rangle$ voor alle functie f en g

Eigenschappen van hermitische operatoren

- eigenwaarden zijn reëel
- eigenvectoren die horen bij verschillende eigenwaarden zijn orthogonal
- de eigenvectoren zijn complete (eigenschap van *volledigheid*)

Axioma's van de kwantummechanica

Een operator heeft op een functie - net zoals een matrix dat heeft op een vector - in het algemeen twee acties: hij verandert de lengte en hij verandert de richting

1. De toestand van een systeem wordt door een toestandsfunctie ψ voorgesteld
2. Iedere fysische grootheid correspondeert met een hermitische operator
3. Een toestand van een systeem, waarin een fysische grootheid A een nauwkeurig bepaalde (zogenaamde *scherpe*) waarde heeft, moet door een eigenfunctie van de corresponderende operator beschreven worden. De waarde van de grootheid A is de bijbehorende eigenwaarde a
4. Als de fysische grootheid A , gekenmerkt door de operator $\mathbf{A}$, voor een systeem dat beschreven wordt door de toestandsfunctie ψ geen scherp bepaalde waarde heeft, dan kan men toch een *verwachtingswaarde* aangeven, namelijk

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle = \int \psi^*(x, t) \mathbf{A} \psi(x, t) dx$$

Indien de metingen aan het systeem in dezelfde toestand meerdere malen worden uitgevoerd, dan vindt men voor de gemiddelde waarde van A precies de waarde $\langle A \rangle$

Axioma's van de kwantummechanica

We geven nu een toelichting op de axioma's

1. De toestandsfunctie ψ geeft alle informatie over een systeem, maar is zelf niet observabel
2. De verwachtingswaarde van de observabele A voor een systeem beschreven door toestand ψ wordt gegeven door

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle = \int \psi^* \mathbf{A} \psi d\mathbf{r}$$

Deze verwachtingswaarden zijn reële grootheden (zoals plaats en energie) en er dient dus te gelden dat

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \langle \psi | A \psi \rangle^* = \langle A \psi | \psi \rangle$$

Dit is equivalent met
$$\int \psi^* \mathbf{A} \psi d\mathbf{r} = \int \psi (\mathbf{A} \psi)^* d\mathbf{r} = \int (\mathbf{A} \psi)^* \psi d\mathbf{r}$$

Een operator die voldoet aan bovenstaande condities wordt een hermitische operator genoemd. Observabelen dienen overeen te komen met hermitische operatoren

Een operator is hermitisch als geldt
$$\langle A \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle$$

Axioma's van de kwantummechanica

We geven nu een toelichting op de axioma's

Een operator is hermitisch als geldt $\langle A\psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle$

Dat is equivalent aan $\int \psi_1^* \mathbf{A} \psi_2 d\mathbf{r} = \int (\mathbf{A} \psi_1)^* \psi_2 d\mathbf{r}$

Bewijs: beschouw de toestand $\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$

Invullen $\sum_{m,n=1}^2 c_m^* c_n \left[\int \psi_m^* \mathbf{A} \psi_n d\mathbf{r} - \int (\mathbf{A} \psi_m)^* \psi_n d\mathbf{r} \right] = 0$

We vinden vergelijking (176), als geldt $\mathbf{A}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \mathbf{A} \psi_1 + c_2 \mathbf{A} \psi_2$

Een operator met deze eigenschap is een *lineaire operator*

Axioma's van de kwantummechanica

We geven nu een toelichting op de axioma's

3. Bestaan er toestanden waarvoor het resultaat van metingen van de observabele A uniek is, dus waarbij metingen van A altijd tot dezelfde waarde leiden

In het algemeen weten we dat het uitvoeren van meerdere metingen aan identiek geprepareerde systemen in de toestand ψ zullen leiden tot resultaten met een spreiding ΔA rond de meest waarschijnlijke waarde $\langle A \rangle$

Als een maat voor de spreiding nemen we de standaarddeviatie ΔA , gedefinieerd door

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \int \psi^* (\mathbf{A} - \langle A \rangle) (\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi d\mathbf{r} \\ &= \int [(\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi]^* [(\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi] d\mathbf{r} = \int |(\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi|^2 d\mathbf{r}\end{aligned}$$

Hieruit volgt dat $\Delta A = 0$ als $\mathbf{A}\psi = a\psi \quad \longrightarrow \quad \langle A \rangle = a$

Een meting aan een systeem in een eigentoestand van de betreffende hermitische operator, levert met *zekerheid* de bijbehorende eigenwaarde

Een hermitische operator heeft in het algemeen een *spectrum* van eigenfuncties en eigenwaarden $A\psi_n = a_n\psi_n$. Resultaten van metingen corresponderen met eigenwaarden a_n , en na de meting is het systeem beschreven door de bijbehorende eigenfunctie ψ_n

Axioma's van de kwantummechanica

We geven nu een toelichting op de axioma's

4. De eigenfuncties van een hermitische operator hebben de belangrijke eigenschap dat ze een orthonormaal stelsel vormen. Er geldt

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \int \psi_m^* \psi_n d\mathbf{r} = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$$

De eigenfuncties vormen ook een *complete set*. Dan geldt $\psi = \sum c_n \psi_n$

Vermenigvuldig met ψ_m^* en integreer. Dan vinden we $c_m = \int \psi_m^* \psi d\mathbf{r}$

De verwachtingswaarde van de observabele A voor een systeem, beschreven door toestand ψ , wordt gegeven door $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^* \mathbf{A} \psi d\mathbf{r}$

Gebruik het expansiethorema $\psi^* = \sum_m c_m^* \psi_m^*$ en $\psi = \sum_n c_n \psi_n$

$$\left. \begin{aligned} \text{Blue Arrow} \quad \langle A \rangle &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int \psi_m^* \mathbf{A} \psi_n d\mathbf{r} \\ \mathbf{A} \psi_n &= a_n \psi_n \end{aligned} \right\} \langle A \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int a_n \psi_m^* \psi_n d\mathbf{r}$$

Axioma's van de kwantummechanica

We geven nu een toelichting op de axioma's

$$\left. \begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int a_n \psi_m^* \psi_n d\mathbf{r} \\ \psi_m^* \psi_n &= \delta_{mn} \end{aligned} \right\} \langle A \rangle &= \sum_n |c_n|^2 a_n$$

Voor een systeem in toestand ψ levert een meting van de grootheid A de waarde a_n met een waarschijnlijkheid $P(a_n) = |c_n|^2 = \left| \int \psi_n^* \psi d\mathbf{r} \right|^2$

Uit de normering van de toestandsfunctie volgt dat $\int \psi^* \psi d\mathbf{r} = 1$

Gebruik expansiethorema en orthogonaliteitsrelaties levert dan $\sum_n |c_n|^2 = 1$

Hier vinden we $\sum_n P(a_n) = 1$

De *enige mogelijke* waarden die verkregen kunnen worden bij een meting van de observabele A , zijn de eigenwaarden $a_1, a_2, \dots$

In welke toestand ψ het systeem ook is, als resultaat van een meting kunnen enkel eigenwaarden zoals a_1 en a_2 gevonden worden en niet bijvoorbeeld een waarde tussen a_1 en a_2 . Dit is anders dan we op basis van de klassieke fysica zouden verwachten

Operatoren van plaats en impuls

De operatoren kunnen niet afgeleid worden

De juiste operator is die, waarvoor men in het grensgeval met de klassieke mechanica de bekende klassieke resultaten verkrijgt

De operator van de positie x overeenkomt met het vermenigvuldigen met x , $\mathbf{x}\psi = x\psi$

De operator van de impulscomponent p_x correspondeert met de partiële afgeleide naar x , $\mathbf{p}_x\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi$

Hoe de toestanden er uitzien, waarvoor de deeltjes een scherpe waarde van de impulscomponent p_x hebben?

$$\mathbf{p}_x\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi = p_x\psi \quad \longrightarrow \quad \psi = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}$$

Het reële deel hiervan is een harmonische golf $\psi_0 \cos \frac{p_x}{\hbar} x = \psi_0 \cos \frac{2\pi}{\lambda} x$

De golflengte is gelijk aan $\lambda = h/p$ zoals vereist door De Broglie

Met golfgetal $k = 2\pi/\lambda$ kunnen we de impuls eigenfunctie schrijven als $\psi = \psi_0 e^{ikx}$

Eigenfunctie van de plaatsoperator

We hebben nu de delta-functie van Dirac nodig

Welke toestanden corresponderen met een deeltje dat zich op een scherp bepaalde positie bevindt, bijvoorbeeld op positie $x = a$

$$\mathbf{x}\psi = x\psi = a\psi$$

De functie ψ dient overal gelijk aan nul te zijn, behalve bij $x = a$

Deze functie heet de δ functie van Dirac

Stel u deze functie voor als bijvoorbeeld een Gaussverdeling waarvan de breedte steeds kleiner wordt, maar waarvan het maximum tegelijkertijd steeds hoger wordt

Als de functie ψ geen δ functie is, dan heeft x geen scherpe waarde en kan het deeltje zich overal bevinden. De meest waarschijnlijke positie is dan

$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi^2(x) dx$$

Dit is de gemiddelde waarde van een grootheid x , waarvan we enkel de waarschijnlijkheidsverdeling $P(x)$ kennen

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x) dx$$

SV als eigenwaardenvergelijking

De eigenwaarden van de SV zijn de energieën van een systeem

Er zijn drie operatoren voor de componenten van impuls, en we vatten dit samen in de vector operator

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

Hieruit volgt de operator voor kinetische energie

$$\mathbf{E}_{\text{kin}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

We gebruiken de Laplace operator $\Delta \equiv \nabla \cdot \nabla$

De plaatsoperator $\mathbf{r}$ verricht vermenigvuldigen met plaatsvector $\mathbf{r}$

De potentiële energie U is een functie van $\mathbf{r}$

We beschouwen de wet van behoud van energie nu als operatorvergelijking

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{kin}} + \mathbf{E}_{\text{pot}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r})$$

Energie-operator en eigenfuncties

De eigenwaarden van de energie-operator zijn de energieën van een systeem

We kunnen plausibel maken dat de energie-operator geschreven kan worden als

$$\mathbf{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Hoe zien de eigenfuncties eruit?

$$\mathbf{E}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi \quad \longrightarrow \quad \psi = \psi_0 e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$$

We hebben harmonische oscillaties met (hoek)frequentie $\omega = \frac{E}{\hbar} \longrightarrow \nu = \frac{E}{h}$

Een toestandsfunctie met een scherpe waarde voor de energie correspondeert dus met een harmonische trilling op ieder punt in de ruimte. Het is een staande golf

Hoe vinden we het ruimtelijk deel van deze amplitude? $\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\omega t}$

We gebruiken behoud van energie in operatorvorm

$$\mathbf{E}_{\text{kin}} + \mathbf{E}_{\text{pot}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) = \mathbf{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$\longrightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t)$$

Energie-operator en eigenfuncties

De eigenwaarden van de energie-operator zijn de energieën van een systeem

De tijdafhankelijke Schrödingervergelijking

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t)$$

Scherp bepaalde energie levert *stationaire toestanden* $E\psi(\mathbf{r}, t) = E\phi(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$

Invullen levert de tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$$

De operator aan de linkerkant noemen we de hamilton-operator of hamiltoniaan

Stationaire functies zijn eigenfuncties van de hamiltoniaan $H\phi = E\phi$

Afgezien van de factor $e^{-i\omega t}$ veranderen stationaire functies niet in de tijd

Toestanden van atomen en molekulen, als ze geen straling emitteren of absorberen, en dus niet in de tijd veranderen, zijn van dit type en worden beschreven door de tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking

Onzekerheid in de kwantumfysica

De eigenwaarden van de energie-operator zijn de energieën van een systeem

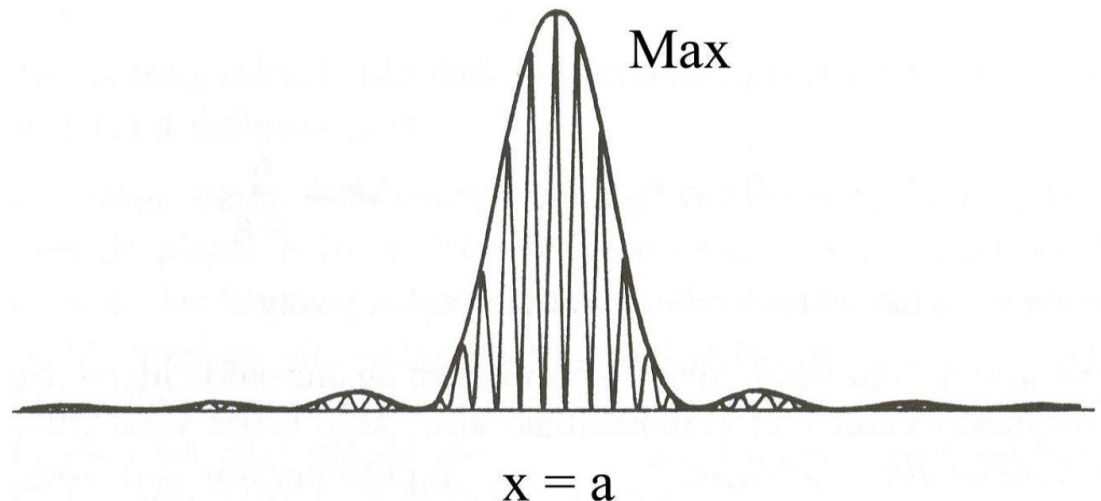
Een eigenfunctie van impuls (een harmonische golf) niet tegelijkertijd een eigenfunctie van de plaats (δ -functie) zijn

Er bestaat dus geen toestand, waarin een deeltje tegelijkertijd een scherp bepaalde impuls p_x en een scherp bepaalde positie x heeft

Men kan zelfs zeggen dat voor een toestand met scherp bepaalde impuls de positie volledig onbepaald is en omgekeerd

Een voorwaarde voor het bestaan van een verwachtingswaarde van de plaats is dat de golffunctie van het deeltje ergens (of op meerdere plaatsen) geconcentreerd is. Voor het bestaan van de verwachtingswaarde van de impuls, dient deze op zijn minst een golfkarakter te hebben

We beschouwen een compromis



Onzekerheid in de kwantumfysica

De eigenwaarden van de energie-operator zijn de energieën van een systeem

Superpositie van golven die gekozen zijn uit een nauw golflengtegebied levert een golf functie met een niet al te grote spreiding in positie

We gebruiken een groot aantal vlakke golven, met verschillende waarden voor p , dus met verschillende golflengten (allemaal even waarschijnlijk)

$$\begin{aligned}\psi(x) &\propto \int_{p_x - \frac{\Delta p}{2}}^{p_x + \frac{\Delta p}{2}} e^{\frac{ixp}{\hbar}} dp = \frac{\hbar}{ix} e^{\frac{ixp_x}{\hbar}} \left(e^{\frac{ix\Delta p}{2\hbar}} - e^{-\frac{ix\Delta p}{2\hbar}} \right) \\ &= \frac{2\hbar}{x} \sin \frac{x\Delta p}{2\hbar} e^{\frac{ixp_x}{\hbar}}\end{aligned}$$

Dit is een vlakke golf, waarvan de amplitude met $\frac{\sin z}{z}$ gemoduleerd is ($z = \frac{\Delta p}{2\hbar} x$)

Het hoofdmaximum ligt tussen $z = -\frac{\pi}{2}$ en $z = +\frac{\pi}{2}$ en heeft breedte

$$\Delta z = \pi \quad \longrightarrow \quad \Delta x = \frac{h}{\Delta p} \quad \longrightarrow \quad \boxed{\Delta x \Delta p > h}$$

Onzekerheid in de kwantumfysica

Onzekerheidsrelaties houden verband met niet commuteren van operatoren

De onzekerheidsrelatie volgt uit het feit dat de plaats- en impulsoperator niet verwisselbaar zijn. Het resultaat hangt van de volgorde af

Bijvoorbeeld $\mathbf{p_x x} f = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x f) = \frac{\hbar}{i} \left(f + x \frac{\partial f}{\partial x} \right)$

$$\mathbf{x p_x} f = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial f}{\partial x}$$

Het verschil bedraagt $(\mathbf{p_x x} - \mathbf{x p_x}) f = \frac{\hbar}{i} f$

Iedere functie is eigenfunctie van de operator $\mathbf{p_x x} - \mathbf{x p_x}$ met eigenwaarde $\frac{\hbar}{i}$

We gebruiken de notatie $[\mathbf{p_x}, \mathbf{x}] = \mathbf{p_x x} - \mathbf{x p_x}$ en noemen $[\mathbf{p_x}, \mathbf{x}]$ de *commutator*

Er zijn drie van deze *verwisselingsrelaties* voor impuls en positie, en een voor energie en tijd

We zeggen dat een paar *geconjugeerde grootheden* niet tegelijkertijd scherp te bepalen zijn. Dat is *principeel* zo