

3 QUANTUMMECHANICA

3.1 Inleiding en wiskundig intermezzo

Er zijn vele manieren om quantummechanica te leren: historisch, empirisch, Hamiltonisch, axiomatisch enz. We kiezen hier de axiomatische wijze omdat die het snelst tot een niveau leidt waarbij we de belangrijkste elementaire problemen te lijf kunnen gaan. De grootste hindernis is het overwinnen van de abstracte en ongewone taal. We zullen hier beginnen met de benodigde wiskundige achtergrond (zie appendix A voor een inleiding tot lineaire algebra).

3.1.1 Operatoren en complexe functies

David Hilbert heeft ingezien dat *functies* zich formeel net zo gedragen als *vectoren*. Dit kan men logisch aannemelijk maken door te bewijzen dat functies voldoen aan dezelfde axiomas als vectoren, waaruit dan alle eigenschappen van de vectorruimte volgen. De functies bouwen ook een dergelijke ruimte op, die de hilbertruimte genoemd wordt.

- 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 $\mathbf{f}$ wordt gedefinieerd door aan elke waarde van het argument x (meestal met $-\infty < x < \infty$) 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 $\mathbf{f}$ en $\mathbf{g}$ kunnen worden opgeteld tot een nieuwe functie $\mathbf{h}$, indien men voor elk argument x de functiewaarde $f(x)$ 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,

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n a_i^* \cdot b_i. \quad (148)$$

Het inproduct $\langle f | g \rangle$ van twee complexe functies $\mathbf{f}$ en $\mathbf{g}$ wordt verkregen door voor elk argument x de functiewaarden te vermenigvuldigen. De integraal van al deze producten wordt het inproduct⁴⁵ genoemd,

$$\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \cdot g(x) dx. \quad (149)$$

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

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle}, \quad |\mathbf{f}| = \sqrt{\langle f | f \rangle}. \quad (150)$$

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

$$\cos \phi = \sqrt{\frac{\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle \langle \mathbf{b} | \mathbf{a} \rangle}{\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle \langle \mathbf{b} | \mathbf{b} \rangle}}, \quad \cos \phi = \sqrt{\frac{\langle f | g \rangle \langle g | f \rangle}{\langle f | f \rangle \langle g | g \rangle}}. \quad (151)$$

⁴⁵Merk op dat geldt $\langle f | g \rangle = \langle g | f \rangle^*$. Verder dienen de functie kwadratisch integreerbaar te zijn, $\int |f(x)|^2 dx < \infty$, anders bestaat het inproduct van $\mathbf{f}$ met zichzelf al niet.

- Twee vectoren of functies zijn *orthogonaal* als hun scalair product gelijk is aan nul,

$$\mathbf{a} \perp \mathbf{b} \leftrightarrow \langle a|b \rangle = 0, \quad \mathbf{f} \perp \mathbf{g} \leftrightarrow \langle f|g \rangle = 0. \quad (152)$$

- Twee vectoren of functies zijn *parallel* als de een uit de andere verkregen kan worden door te vermenigvuldigen met een scalar,

$$\mathbf{a} \parallel \mathbf{b} \leftrightarrow \mathbf{a} = c\mathbf{b}, \quad \mathbf{f} \parallel \mathbf{g} \leftrightarrow \mathbf{f} = c\mathbf{g}. \quad (153)$$

Na al deze overeenstemmingen willen we op het wezenlijke verschil tussen een vector en een functie wijzen: een functie is een vector met oneindig veel dimensies. Hierdoor hebben twee functies veel meer mogelijkheden om niet parallel te zijn in vergelijking met twee vectoren. Functies hebben bijvoorbeeld meer mogelijkheden orthogonaal te zijn.

3.1.2 Bases in de hilbertruimte

Een hilbertruimte is een abstracte vectorruimte waarin een inproduct gedefinieerd is, zodat we lengte en hoeken kunnen meten. De hilbertruimte kan een eindig of oneindig aantal dimensies hebben, maar het is belangrijk dat de ruimte *compleet* is. Om dit beter te begrijpen, beschouwen we twee voorbeelden. Het eerste voorbeeld betreft de verzameling $P(N)$ van alle polynomen van de graad $< N$,

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{N-1}x^{N-1}, \quad (154)$$

op het interval $-1 \leq x \leq 1$. De functies zijn op dit domein zeker kwadratisch integreerbaar en we hebben dus een bona fide inproduct ruimte. Een voor de hand liggende basis is de verzameling

$$|e_1 \rangle = 1, |e_2 \rangle = x, |e_3 \rangle = x^2, \dots, |e_N \rangle = x^{N-1}. \quad (155)$$

We hebben duidelijk te maken met een N -dimensionale vectorruimte. De basis is echter niet orthonormaal, want we zien bijvoorbeeld direct dat

$$\langle e_1|e_1 \rangle = \int_{-1}^1 1dx = 2, \quad \langle e_1|e_3 \rangle = \int_{-1}^1 x^2dx = \frac{2}{3}. \quad (156)$$

We kunnen nu de Gram-Schmidt procedure toepassen, teneinde de basis te orthonormaliseren. Als we dat doen vinden we de *legendrepolynomen* $P_n(x)$, behalve dan dat Legendre niet zo op de normering gelet heeft,

$$|e'_n \rangle = \sqrt{n - \frac{1}{2}} P_{n-1}(x), \quad (n = 1, 2, N). \quad (157)$$

De eerste paar legendrepolynomen worden in tabel 5 getoond.

Tabel 5: Enkele van de eerste legendrepolynomen $P_n(x)$.

$ \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} $

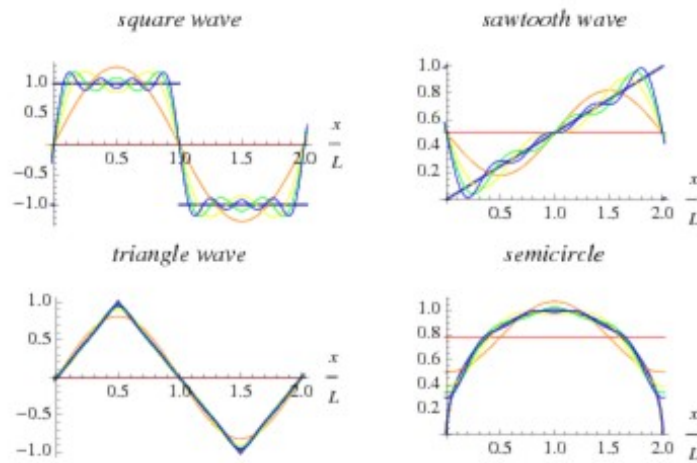
Als tweede voorbeeld beschouwen we de verzameling $T(N)$ van alle goniometrische functies van de vorm

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N-1} [a_n \sin(n\pi x) + b_n \cos(n\pi x)], \quad (158)$$

op het interval $-1 \leq x \leq 1$. Ook kunnen we laten zien dat

$$|e_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{in\pi x}, \quad (n = 0, \pm 1, \dots, \pm(N-1)) \quad (159)$$

een orthonormale basis vertegenwoordigt. Hierdoor kunnen we een willekeurige functie schrijven als een lineaire combinatie van deze basisfuncties. Hierop berust de fourieranalyse.



Figuur 21: De zaagtandfunctie $f(x)$ wordt rechtsboven getoond en is periodiek met periode 2. De functie wordt gegeven door $f(x) = x/2$. Ook andere functies worden getoond. Het is mogelijk deze functies op te bouwen met harmonische golven. De successievelijke benadering voor de eerste vier termen wordt getoond.

De functie $f(x)$ getoond in Fig. 111 is periodiek met periode 2 en wordt gegeven door $f(x) = x/2$ als $0 < x \leq 2$. We zien dat de orthogonale functies $\sin(n\pi x)$ en $\cos(n\pi x)$ gesuperponeerd kunnen worden op een zodanige wijze dat een goede beschrijving van $f(x)$ verkregen wordt.

3.1.3 Matrices en operatoren

Een kwadratische matrix kan voorgesteld worden door een kwadratisch getallenschema. Bijvoorbeeld voor $n = 3$,

$$\mathbf{M} = m_{ik} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}. \quad (160)$$

De belangrijkste matrixoperatie is de vermenigvuldiging met een vector $\mathbf{a}$. Het resultaat van deze operatie is een andere vector: $\mathbf{b} = \mathbf{M}\mathbf{a} = m_{ik}a_k$, waarbij deze vector $\mathbf{b}$ als componenten $b_i = \sum_{k=1}^n m_{ik}a_k$ heeft. De component i is het inproduct van rij i van de matrix met vector $\mathbf{a}$.

Men kan ook stellen dat de matrix $\mathbf{M}$ uit de vector $\mathbf{a}$ een andere vector $\mathbf{b}$ genereert. Preciezer geformuleerd is de matrix een lineaire vectorfunctie. Hiermee wordt bedoeld dat net zoals een functie $\mathbf{f}$ aan elk getal x een ander getal $f(x)$ toevoegt, voegt een matrix aan elke vector $\mathbf{a}$ een andere vector $\mathbf{b} = \mathbf{M}\mathbf{a}$ toe. Lineair betekent in dit verband dat in het algemeen geldt dat

$$\mathbf{M}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \mathbf{M}\mathbf{a} + \mathbf{M}\mathbf{b}. \quad (161)$$

Een *operator* is voor functies hetzelfde als een matrix is voor vectoren. Een operator $\mathbf{A}$ genereert uit elke functie $\mathbf{f}$ een andere functie $\mathbf{g} = \mathbf{A}\mathbf{f}$. Preciezer geformuleerd voegt een lineaire operator aan elke functie $\mathbf{f}$ een andere functie $\mathbf{g} = \mathbf{A}\mathbf{f}$ toe, waarbij

$$\mathbf{A}(\mathbf{f}_1 + \mathbf{f}_2) = \mathbf{A}\mathbf{f}_1 + \mathbf{A}\mathbf{f}_2. \quad (162)$$

Andere voorbeelden van operatoren worden gegeven in tabel 6.

Tabel 6: *Enkele voorbeelden van operatoren die werken op een functie en hieruit een nieuwe functie genereren.*

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' $K(x, x')$	$\mathbf{A}\mathbf{f} = \int K(x, x')f(x')dx' = g(x)$

3.1.4 Eigenfuncties en eigenwaarden

Een operator $\mathbf{A}$ heeft op een functie, net zoals een matrix dat heeft op een vector, in het algemeen twee acties: hij strekt de functie (verandert de lengte) en hij roteert de functie (verandert de richting). Voor deze rotatie zijn er bij oneindig veel dimensies buitengewoon veel mogelijkheden. Van belang zijn vooral die gevallen waarbij een rotatie achterwege blijft, waarbij de functie $\mathbf{A}\mathbf{f}$ parallel is aan de functie $\mathbf{f}$,

$$\mathbf{A}\mathbf{f} = a\mathbf{f}. \quad (163)$$

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 de quantummechanica is een speciale klasse van operatoren van bijzonder belang: de *hermitische* operatoren. Een hermitische operator $\mathbf{A}$ voldoet aan de definitie

$$\langle f | \mathbf{A}g \rangle = \langle \mathbf{A}f | g \rangle, \quad (164)$$

voor alle functie $\mathbf{f}$ en $\mathbf{g}$. De eigenfuncties en eigenwaarden van hermitische operatoren hebben een aantal belangrijke eigenschappen. De eigenwaarden van een hermitische operator zijn reëel en de eigenvectoren die horen bij verschillende eigenwaarden zijn orthogonaal. De derde eigenschap, compleetheit van de eigenvectoren, is in het algemeen slechts geldig in een eindig-dimensionale ruimte. In oneindig dimensionale ruimten hebben sommige hermitische operatoren een complete verzameling eigenvectoren, sommige hebben een niet-complete verzameling, en sommige hebben helemaal geen eigenvectoren in die ruimte. In de quantumfysica is de eigenschap van compleetheit absoluut essentieel en de eigenfuncties van de meest voorkomende hermitische operatoren hebben behalve hun orthogonaliteit deze belangrijke eigenschap van *volledigheid*: men kan elke willekeurige functie ontwikkelen in deze eigenfuncties, net zoals men functies kan fourierontwikkelen naar de eveneens orthogonale functies $\sin nx$ en $\cos nx$. Op deze generalisatie van de fourierontwikkeling berusten de meeste benaderingsmethoden die gebruikt worden in de quantummechanica. We zullen later zien hoe we hier mee omgaan.

3.2 Grondslagen van de quantummechanica

3.2.1 Axioma's

De axioma's waarop de quantummechanica gebaseerd is, zijn minder evident dan bijvoorbeeld die van de mechanica van Newton en drukken het wezenlijk nieuwe idee uit dat niet alle fysische grootheden onder alle omstandigheden een nauwkeurig bepaalde waarde hebben.

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 in deze toestand 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

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \mathbf{A} \psi \rangle = \int \psi^*(x, t) \mathbf{A} \psi(x, t) dx. \quad (165)$$

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 $\langle A \rangle$.

We zullen nu trachten deze axioma's toe te lichten. We houden hierbij dezelfde volgorde aan.

Ad. 1: De toestandsfunctie is een genormeerde vector⁴⁶ in de hilbertruimte. De toestandsfunctie ψ geeft *alle* informatie over een systeem. De functie ψ zelf is echter niet observabel.

Ad. 2: De verwachtingswaarde van de observabele A voor een systeem beschreven door toestand ψ wordt gegeven door

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \mathbf{A} \psi \rangle = \int \psi^* \mathbf{A} \psi d\mathbf{r}. \quad (166)$$

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

$$\langle \psi | \mathbf{A} \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{A} \psi \rangle^* = \langle \mathbf{A} \psi | \psi \rangle. \quad (167)$$

Dit is equivalent met

$$\int \psi^* \mathbf{A} \psi d\mathbf{r} = \int \psi (\mathbf{A} \psi)^* d\mathbf{r} = \int (\mathbf{A} \psi)^* \psi d\mathbf{r}. \quad (168)$$

Een operator die voldoet aan bovenstaande condities wordt een hermitische operator genoemd en we concluderen dat observabelen dienen overeen te komen met hermitische operatoren.

Het is mogelijk om de eis tot hermiticiteit algemener op te schrijven, waarbij de conditie gegeven door vergelijking (168) voor de hermiticiteit van een operator equivalent is met de conditie dat voor twee willekeurige toestanden ψ_1 en ψ_2 geldt dat

$$\langle \mathbf{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \mathbf{A} \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \mathbf{A} | \psi_2 \rangle. \quad (169)$$

⁴⁶In het vervolg schrijven we dit soort vectoren niet meer vetgedrukt (zoals in de vorige paragrafen).

Bovenstaande uitdrukking is equivalent met

$$\int \psi_1^* \mathbf{A} \psi_2 d\mathbf{r} = \int (\mathbf{A} \psi_1)^* \psi_2 d\mathbf{r}. \quad (170)$$

Bewijs: Teneinde het bovenstaande te bewijzen beschouwen we de toestand

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad (171)$$

waarbij c_1 en c_2 willekeurige complexe getallen zijn. Als we deze toestand invullen in vergelijking (168), dan vinden we

$$\sum_{m,n=1}^2 c_m^* c_n \left[\int \psi_m^* \mathbf{A} \psi_n d\mathbf{r} - \int (\mathbf{A} \psi_m)^* \psi_n d\mathbf{r} \right] = 0 \quad (172)$$

en dit geldt voor willekeurige c_1 en c_2 . Hieruit volgt vergelijking (170) als we aannemen dat

$$\mathbf{A}(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) = c_1 \mathbf{A} \psi_1 + c_2 \mathbf{A} \psi_2. \quad (173)$$

We noemen een operator met deze eigenschap een *lineaire operator*.

Ad. 3: We vragen ons af of er toestanden ψ bestaan 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 $\Delta \mathbf{A}$ rond de meest waarschijnlijke waarde $\langle A \rangle$. Als een maat voor de spreiding nemen we de standaarddeviatie $\Delta \mathbf{A}$, gedefinieerd door

$$\begin{aligned} (\Delta \mathbf{A})^2 &= \int \psi^* (\mathbf{A} - \langle A \rangle) (\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi d\mathbf{r} \\ &= \int [(\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi]^* [(\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi] d\mathbf{r} \\ &= \int |(\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi|^2 d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (174)$$

Hieruit volgt dat $\Delta \mathbf{A} = 0$ als

$$\mathbf{A} \psi = a \psi, \quad (175)$$

waarbij a een getal is waarvoor geldt dat

$$\langle A \rangle = a. \quad (176)$$

Vergelijking (175) vertegenwoordigt een uitermate belangrijk resultaat. Het stelt dat een meting aan een systeem in een eigentoestand van de hermitische operator, als resultaat met zekerheid de bijbehorende eigenwaarde geeft.

Een fysische observable van een systeem correspondeert met een hermitische operator in de theorie. Deze operator heeft een spectrum van eigenwaarden en eigenfuncties. We hebben

$$\mathbf{A} \psi_n = a_n \psi_n. \quad (177)$$

Resultaten van metingen van de observable A zullen corresponderen met eigenwaarden a_n van deze operator. Na een meting wordt de toestand van het systeem beschreven door de bijbehorende eigenfunctie ψ_n van deze operator.

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

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \int \psi_m^* \psi_n d\mathbf{r} = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n. \end{cases} \quad (178)$$

Een andere belangrijke eigenschap van hermitische operatoren is dat de verzameling eigenfuncties, $\psi_1, \psi_2, \dots$, een *complete set* vormen. Dit betekent dat een willekeurige toestandsfunctie ψ van het systeem geëxpandeerd kan worden in termen van de eigenfuncties van een willekeurige hermitische operator als

$$\psi = \sum c_n \psi_n. \quad (179)$$

Indien we bovenstaande vergelijking vermenigvuldigen met ψ_m^* en vervolgens integreren, waarbij we gebruik maken van de orthonormaliteitsrelaties, dan verkrijgen we voor de expansiecoëfficiënten

$$c_m = \int \psi_m^* \psi d\mathbf{r} = \langle \psi_m | \psi \rangle. \quad (180)$$

Met behulp van het expansietheorema (vergelijking (179)), kunnen we de waarschijnlijkheidsverdeling afleiden voor de resultaten van metingen van A . De verwachtingswaarde van de observabele A voor een systeem beschreven door toestand ψ wordt gegeven door

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^* \mathbf{A} \psi d\mathbf{r}. \quad (181)$$

Indien we gebruik maken van het expansietheorema, $\psi^* = \sum_m c_m^* \psi_m^*$ en $\psi = \sum_n c_n \psi_n$, dan vinden we

$$\langle A \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int \psi_m^* \mathbf{A} \psi_n d\mathbf{r}. \quad (182)$$

Vervolgens maken we gebruik van de eigenwaardenvergelijking $\mathbf{A} \psi_n = a_n \psi_n$ en vinden

$$\langle A \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int a_n \psi_m^* \psi_n d\mathbf{r}. \quad (183)$$

Tenslotte gebruiken we de orthonormaliteitsrelaties $\int \psi_m^* \psi_n d\mathbf{r} = \delta_{mn}$ en verkrijgen

$$\langle A \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n. \quad (184)$$

Hieruit concluderen we dat voor een systeem in toestand $|\psi\rangle$ een meting van de grootte A de waarde a_n levert met een waarschijnlijkheid

$$P(a_n) = |c_n|^2 = \left| \int \psi_n^* \psi d\mathbf{r} \right|^2. \quad (185)$$

Uit de normering van de toestandsfunctie volgt dat

$$\int \psi^* \psi d\mathbf{r} = 1, \quad (186)$$

en als we nu gebruik maken van het expansietheorema en de orthonormaliteitsrelaties, dan vinden we

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \quad (187)$$

In dat geval geldt dus ook

$$\sum_n P(a_n) = 1, \quad (188)$$

waaruit we concluderen dat de *enige mogelijke* waarden die verkregen kunnen worden bij een meting van de observabele A , de eigenwaarden $a_1, a_2, \dots$ zijn.

We komen dus tot de opmerkelijke conclusie dat in welke toestand $|\psi\rangle$ 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 volledig anders dan we op basis van de klassieke fysica zouden verwachten. Dit gedrag is volledig in overeenstemming met experimentele resultaten.

3.2.2 Operatoren voor plaats en impuls

We dienen nu enkel nog te weten wat de operatoren zijn die corresponderen met de desbetreffende fysische grootheden. Helaas kunnen deze niet algemeen afgeleid worden en dient men analogiën te gebruiken. De juiste operator is die, waarvoor men in het grensgeval met de klassieke mechanica de bekende klassieke resultaten verkrijgt. Dergelijke analogiën worden bijzonder duidelijk indien men de klassieke mechanica uitdrukt in het formalisme ontwikkeld door Hamilton en Lagrange (hetgeen we hier niet zullen doen). Op deze wijze vindt men dat de operator $\mathbf{x}$ van de positie x overeenkomt met het vermenigvuldigen met de variabele x ,

$$\mathbf{x}\psi = x\psi. \quad (189)$$

De operator $\mathbf{p}_x$ van de impulscomponent p_x correspondeert met de partiële afgeleide naar x ,

$$\mathbf{p}_x\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi. \quad (190)$$

We vragen ons af hoe de toestanden er uitzien, waarvoor de deeltjes een scherpe waarde van de impulscomponent p_x hebben. In dat geval dient hun toestandsfunctie ψ een eigenfunctie van de impulsoperator te zijn,

$$\mathbf{p}_x\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi = p_x\psi. \quad (191)$$

Enkel een exponentiële functie is evenredig met zijn eigen afgeleide en daarom wordt een toestand met scherp gedefinieerde impuls geschreven als

$$\psi = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (192)$$

Het reële deel hiervan is een harmonische golf die geschreven kan worden als

$$\psi_0 \cos \frac{p_x}{\hbar} x = \psi_0 \cos \frac{2\pi}{\lambda} x, \quad (193)$$

waarbij de golflengte gelijk is aan $\lambda = \frac{h}{p}$ zoals vereist door de Broglie. Enkel harmonische ψ golven hebben een scherp bepaalde impuls. Nuttig is de afkorting $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, met k het *golfgetal*, waarmee de impuls eigenfunctie geschreven kan worden als

$$\psi = \psi_0 e^{ikx}. \quad (194)$$

Het is iets gecompliceerder om de vraag te beantwoorden welke toestanden corresponderen met een deeltje dat zich op een scherp bepaalde *positie* bevindt, bijvoorbeeld op positie $x = a$. In dat geval dient ψ een eigenfunctie van de plaatsoperator te zijn,

$$\mathbf{x}\psi = x\psi = a\psi. \quad (195)$$

Hierbij dient vermenigvuldigen met de variabele x overeen te komen met vermenigvuldigen met de constante a . Als we dat proberen, dan vinden we dat hiervoor de functie ψ overal gelijk aan nul dient te zijn, behalve bij $x = a$! Deze functie, die overal nul is behalve op de positie $x = a$, waar ze oneindig is, heet de δ -functie. Men kan zich deze functie voorstellen als bijvoorbeeld een gaussverdeling waarvan de breedte steeds kleiner wordt, maar waarvan het maximum tegelijkertijd steeds hoger wordt. Indien $\psi(x)$ geen δ -functie is, dan heeft x geen scherpe waarde en kan het deeltje zich overal bevinden. Volgens de axiomas van de quantummechanica wordt de meest waarschijnlijke positie dan gegeven door

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \mathbf{x} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi^2(x) dx. \quad (196)$$

Deze vergelijking ziet er hetzelfde uit die voor de gemiddelde waarde van een grootheid x , waarvan we enkel de waarschijnlijkheidsverdeling $P(x)$ kennen,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x) dx, \quad (197)$$

indien we ervan uitgaan dat $P(x)$ op de juiste wijze genormeerd is. Dan geldt namelijk dat $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x) dx = 1$. Men kan $\psi^2(x) dx$ dus interpreteren als de waarschijnlijkheid⁴⁷ dat bij een meting het deeltje in het interval tussen x en $x + dx$ zou worden aangetroffen.

3.2.3 De onzekerheidsrelaties van Heisenberg

Het is duidelijk dat een eigenfunctie van impuls (een harmonische golf) niet tegelijkertijd een eigenfunctie van de plaats (δ -functie) kan 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 ψ 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. Een redelijk compromis wordt bijvoorbeeld gegeven door de functie in Fig. 22.

Een dergelijk *golfpakket* kan volgens de fourieranalyse worden opgebouwd uit een groot aantal vlakke golven van de vorm (192), echter met verschillende waarden voor p_x , dus met verschillende golflengten. Deze impulsen dienen in een bepaald gebied Δp_x te liggen en men dient er dan verder nog voor te zorgen dat de fasen zó gekozen zijn dat men een maximum creëert op de positie $x = a$. Op alle andere plaatsen kloppen de fasen dan niet meer, indien men oneindig veel waarden voor p_x gebruikt (in geval van een eindig aantal p_x -waarden krijgen we periodieke herhalingen). Een dergelijke superpositie heeft een breedte Δx , die met de breedte van het gebruikte golflengtegebied samenhangt volgens

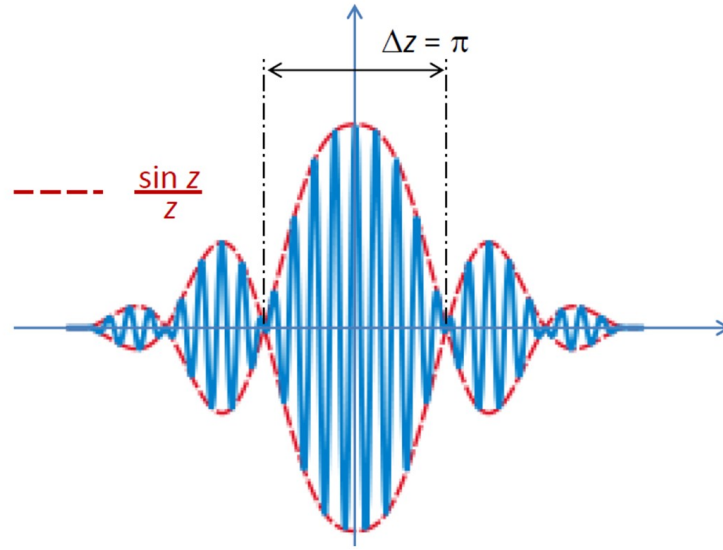
$$\Delta x \approx \frac{\lambda^2}{\Delta \lambda}. \quad (198)$$

Volgens de relatie van de Broglie is dat identiek aan

$$\Delta x \approx \frac{h}{\Delta p_x}. \quad (199)$$

Dit is de onzekerheidsrelatie van Heisenberg.

⁴⁷Merk op dat in het geval van een complexe toestandsfunctie deze waarschijnlijkheid gegeven wordt door $\psi^* \psi dx$.



Figuur 22: Superpositie van golven die gekozen zijn uit een nauw golflengtegebied levert een golf functie met een niet al te grote spreiding in positie.

We zullen nu bovenstaande relatie afleiden voor het geval dat de gewenste positie van het deeltje $x = 0$, de gemiddelde impuls p_x , en het voor de superpositie gebruikte impulsgebied gelijk is aan $(p_x - \frac{\Delta p_x}{2}, p_x + \frac{\Delta p_x}{2})$. Al deze partiële golven zijn vertegenwoordigd met gelijke amplitude. Dus met andere woorden: we weten niet welke impuls waarde uit dit gebied een voorkeur heeft, maar enkel dat de impuls in dit gebied ligt. Alle waarden in dit gebied zijn even waarschijnlijk! We vinden de toestandsfunctie door superpositie en integreren dus over alle partiële golven,

$$\psi(x) \propto \int_{p_x - \frac{\Delta p_x}{2}}^{p_x + \frac{\Delta p_x}{2}} e^{\frac{ixp}{\hbar}} dp = \frac{\hbar}{ix} e^{\frac{ixp_x}{\hbar}} \left(e^{\frac{ix\Delta p_x}{2\hbar}} - e^{-\frac{ix\Delta p_x}{2\hbar}} \right) = \frac{2\hbar}{x} \sin \frac{x\Delta p_x}{2\hbar} e^{\frac{ixp_x}{\hbar}}. \quad (200)$$

Dit is een vlakke golf, waarvan de amplitude met de factor $\frac{\sin z}{z}$ gemoduleerd is ($z = \frac{\Delta p_x}{2\hbar} x$). Deze functie heeft precies de vorm zoals getoond in Fig. 22. Het hoofdmaximum ligt tussen de waarden $z = -\frac{\pi}{2}$ en $z = +\frac{\pi}{2}$ en heeft een breedte

$$\Delta z = \pi, \quad \text{en dus} \quad \Delta x = \frac{h}{\Delta p_x}, \quad (201)$$

waaruit de onzekerheidsrelatie van Heisenberg volgt.

Als we de operatoren beschouwen, dan uit de onzekerheidsrelatie zich in het feit dat de plaats- en impulsoperator niet verwisselbaar zijn. Men krijgt verschillende resultaten als men op een functie $f = f(x)$ eerst de plaats- en dan de impulsoperator laat werken of omgekeerd,

$$\mathbf{p_x x} f = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (xf) = \frac{\hbar}{i} \left(f + x \frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (202)$$

en

$$\mathbf{x p_x} f = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} f = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial f}{\partial x}. \quad (203)$$

Het verschil van beide uitdrukkingen bedraagt

$$(\mathbf{p_x x} - \mathbf{x p_x}) f = \frac{\hbar}{i} f \quad (204)$$

en toont dat *iedere* functie een eigenfunctie is van de operator $\mathbf{p}_x \mathbf{x} - \mathbf{x} \mathbf{p}_x$ met een eigenwaarde gelijk aan $\frac{\hbar}{i}$. We gebruiken voor het operatorverschil de notatie $[\mathbf{p}_x, \mathbf{x}] = \mathbf{p}_x \mathbf{x} - \mathbf{x} \mathbf{p}_x$ en noemen $[\mathbf{p}_x, \mathbf{x}]$ de *commutator* van $\mathbf{p}_x$ en $\mathbf{x}$. Onafhankelijk van de keuze van f kan men dus de zuivere *operatorvergelijking*

$$[\mathbf{p}_x, \mathbf{x}] = \mathbf{p}_x \mathbf{x} - \mathbf{x} \mathbf{p}_x = \frac{\hbar}{i} \quad (205)$$

opschrijven. Dit is een van de *verwisselingsrelaties*. Wat de impuls betreft zijn er natuurlijk drie, voor elke coördinaat één. Ook bestaat er een dergelijke relatie tussen energie en tijd. Ze geven de abstracte voorstelling van de onzekerheidsrelaties, die gewoonlijk als volgt geformuleerd wordt: ‘Het is onmogelijk de plaats en impuls van een deeltje of het tijdstip en energie van een gebeurtenis, in het algemeen een paar *geconjugeerde grootheden* tegelijkertijd scherp te bepalen. Bij een dergelijke meting resteren er altijd onzekerheden Δx en Δp_x , respectievelijk Δt en ΔE , waarvan het product *principeel* niet kleiner gemaakt kan worden dan $\hbar$.’

3.2.4 Schrödingervergelijking als eigenwaardenvergelijking

We hebben tot nu toe steeds over slechts één impulscomponent gesproken, terwijl er toch drie componenten bestaan. De hiermee corresponderende operatoren $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$ en $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ kunnen in één vector worden samengevat,

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i} \nabla. \quad (206)$$

De operator $\mathbf{p}$ die correspondeert met de volledige impulsvector van een deeltje is dus de gradiënt operator, vermenigvuldigd met $\frac{\hbar}{i}$. De operator voor de kinetische energie van een deeltje kan men analoog aan de klassieke uitdrukking $T = E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m}$ uit de impulsoperator opbouwen,

$$\mathbf{T} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (207)$$

De operator die correspondeert met de kinetische energie is dus op de factor $-\frac{\hbar^2}{2m}$ na de laplace-operator (met definitie $\Delta \equiv \nabla \cdot \nabla$).

De plaatsoperator werkt door een eenvoudige vermenigvuldiging met de coördinaat of algemener met de plaatsvector $\mathbf{r}$. Elke fysische grootheid die enkel een functie van de plaatscoördinaten is, heeft eveneens een corresponderende operator, waarvan de werking bestaat uit een eenvoudige vermenigvuldiging met deze functie. Dit is bijvoorbeeld het geval voor de operator $\mathbf{V}$ van de potentiële energie $U(\mathbf{r})$ van een conservatief krachtveld. De wet van behoud van energie, waarbij de zogenaamde *hamiltoniaan* $\mathbf{H}$ de som van de kinetische en potentiële energie voorstelt, kan als de volgende operatorvergelijking geschreven worden,

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}). \quad (208)$$

Uit zowel het hamiltonformalisme als de relativiteitstheorie is het plausibel te maken dat de operator $\mathbf{E}$ voor de totale energie van een systeem met een tijdafhankelijke potentiaal, op dezelfde manier met de tijd in verband staat als de impulsoperator met de plaats,

$$\mathbf{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (209)$$

De operator die de tijd bepaalt, analoog aan de plaatsoperator, bestaat uit een eenvoudige vermenigvuldiging met t . Hieruit volgt direct een verwisselingsrelatie tussen energie en tijd die overeenkomt met een corresponderende onzekerheidsrelatie, analoog aan die tussen plaats en impuls,

$$[\mathbf{E}, \mathbf{t}] = \mathbf{E} \mathbf{t} - \mathbf{t} \mathbf{E} = i\hbar \quad (210)$$

en dus

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar. \quad (211)$$

We vragen ons nu af hoe de eigenfuncties van de energieoperator $\mathbf{E}$ eruit zien. Wat zijn de toestanden met een scherp bepaalde waarde voor de energie? Geheel analoog aan de discussie van de impuls-eigenfuncties zoeken we nu de oplossingen van de eigenwaardevergelijking

$$\mathbf{E}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E\psi \quad (212)$$

van de vorm

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (213)$$

die harmonische oscillaties $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ voorstellen met hoekfrequentie $\omega = \frac{E}{\hbar}$, dus met frequentie

$$\nu = \frac{E}{h}. \quad (214)$$

Dit noemen we de tweede vergelijking van de Broglie en hij herinnert aan de quantisatie die Planck oplegde aan licht. We zien dat zowel materie- als lichtgolven met frequentie ν een energie $E = h\nu$ hebben.

Een toestandsfunctie die overeenkomt met een scherpe waarde voor de energie correspondeert dus met een harmonische trilling op ieder punt in de ruimte. Het is een staande golf! Teneinde deze golf volledig te kenmerken moeten we nog de ruimtelijke verdeling van haar amplitude aangeven,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\omega t}. \quad (215)$$

De energieoperator gegeven in vergelijking (209) geeft hierover geen informatie, maar wel de wet van behoud van energie.

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) = \mathbf{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (216)$$

Als men een dergelijke operatorvergelijking opschrijft, dan bedoelt men dat de operatoren die aan beide kanten van een $=$ -teken staan, als ze werken op elke mogelijke functie, steeds hetzelfde resultaat leveren. Dit betekent dat iedere toestandsfunctie $\psi(\mathbf{r}, t)$ een oplossing moet zijn van de vergelijking

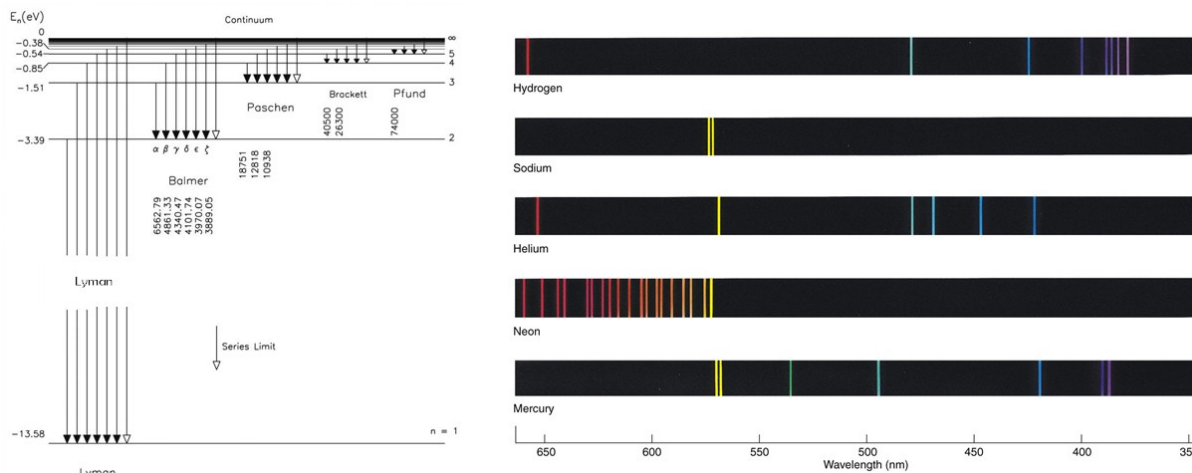
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t). \quad (217)$$

Dit is de *tijdafhankelijke schrödingervergelijking*.

In het speciale geval van toestanden met een scherp bepaalde energie, zogenaamde *stationaire toestanden*, weten we reeds dat de rechterkant van bovenstaande vergelijking eenvoudig $E\psi(\mathbf{r}, t) = E\phi(\mathbf{r})e^{i\omega t}$ levert. Het tijdafhankelijke deel $e^{i\omega t}$ kan dan aan beide kanten van de vergelijking weggestreept worden. Het amplitudedeel $\phi(\mathbf{r})$ van een stationaire toestand is dan een oplossing van de *tijdsonafhankelijke schrödingervergelijking*,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}). \quad (218)$$

Stationaire toestanden zijn eigenfuncties van de hamiltoniaan, $\mathbf{H}\phi = E\phi$, en in deze vergelijking komt de tijd niet meer voor. Dientengevolge veranderen de golf functies ψ voor de stationaire toestanden niet in de tijd, afgezien van de verplichte factor $e^{-i\omega t}$. Dit is de reden dat men deze toestanden stationair noemt. Enkel een toestand die niet verandert in de tijd heeft een scherp bepaalde energie. Toestanden van atomen en molekulen, als ze geen straling emitteren



Figuur 23: Links: het elektron in een waterstofatoom kan verschillende eigentoestanden hebben, die gekenmerkt worden door een discrete energie. Rechts: overgangen tussen deze toestanden leiden tot emissie/absorptie van fotonen met specifieke frequenties.

of absorberen en dus niet in de tijd veranderen, zijn van dit type en worden beschreven door de tijdonafhankelijke schrödingervergelijking.

In figuur 23 geven we de energieën van het elektron in een waterstofatoom. We zien dat het elektron slechts kan voorkomen in specifieke energietoestanden, waarvan de waarden gegeven worden door de eigenwaarden van de hamiltoniaan. In het geval van het waterstofatoom gebruiken we de coulombpotentiaal⁴⁸ en kunnen we de hamiltoniaan schrijven als

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (219)$$

Deze vergelijking is exact op te lossen⁴⁹ en we vinden dan voor de eigenwaarden van de hamiltoniaan

$$E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = -13,6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (221)$$

Overgangen tussen deze toestanden leiden tot emissie/absorptie van fotonen met specifieke frequenties. Deze fotonen kunnen waargenomen worden in gasontladingen.

3.2.5 Diracnotatie

In de notatie die is ingevoerd door Dirac schrijven we in plaats van de golffuncties $\psi_a, \psi_b, \dots$ de toestanden $|\psi_a\rangle, |\psi_b\rangle, \dots$ of zelfs $|a\rangle, |b\rangle, \dots$ waarbij $a, b, \dots$ de toestanden labelen waarvan de golffuncties $\psi_a, \psi_b, \dots$ zijn. We hebben de diracnotatie al in vorige paragrafen gebruikt, maar geven hier wat meer achtergrondinformatie. Het symbool $|\rangle$ werd door Dirac een *ket* genoemd, terwijl de *bra* $\langle|$ de complex geconjugeerde toestand voorstelt. De ket is een vector, maar wat

⁴⁸Hierdoor verwaarlozen we spineffecten, zoals spin-baan koppeling en koppeling tussen de spin van het elektron en de spin van het proton.

⁴⁹Dat dient te gebeuren in sferische coördinaten r, θ, ϕ . De laplace-operator wordt dan geschreven als

$$\Delta\psi = \nabla^2\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}. \quad (220)$$

is een bra? Het is duidelijk geen operator, want als een operator op een vector werkt, dan dient het resultaat een vector te zijn. Echter als een bra op een vector (een ket) werkt, dan is het resultaat een complex getal, dat we als inproduct kennen. De bra is dus een functionaal. In deze notatie kan het scalaire product van twee toestanden $|a\rangle$ en $|b\rangle$ geschreven worden als

$$\langle b|a\rangle = \langle \psi_b|\psi_a\rangle = \int \psi_b^*(\mathbf{r})\psi_a(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (222)$$

De verzameling van alle bra's vormen weer een lineaire vectorruimte, die we de *duale ruimte* noemen.

Het blijkt dat we met de diracnotatie ook meer inzicht in de compleetheid (volledigheid) van een operator kunnen krijgen. Beschouw hiertoe het volgende: als $\psi_1(\mathbf{r}), \psi_1(\mathbf{r}), \dots, \psi_n(\mathbf{r})$, een complete set orthonormale golffuncties is, dan geldt

$$\langle \psi_m|\psi_n\rangle = \langle m|n\rangle = \delta_{mn} \quad (223)$$

en de expansie van een willekeurige golffunctie $\psi_a(\mathbf{r})$ in termen van de complete set $\psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r}), \dots$ heeft in diracnotatie de vorm

$$|\psi_a\rangle = |a\rangle = \sum_n c_a(n)|\psi_n\rangle. \quad (224)$$

Als we het inproduct hiervan nemen met $|\psi_m\rangle$, dan verkrijgen we de expansiecoëfficiënt

$$c_a(m) = \langle \psi_m|a\rangle. \quad (225)$$

Stel dat $|\psi_n\rangle$ een genormeerde vector is, dan kunnen we de operator $\mathbf{P}_n$ definiëren als

$$P_n \equiv |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \quad (226)$$

en deze operator selecteert de component van elke vector die langs $|\psi_n\rangle$ ligt. Zo vinden we voor de component $|a\rangle_n$ langs $|\psi_n\rangle$ de vector

$$|a\rangle_n = P_n|a\rangle = |\psi_n\rangle\langle\psi_n|a\rangle = \langle\psi_n|a\rangle|\psi_n\rangle. \quad (227)$$

We kunnen hiermee vergelijking (224) schrijven als

$$|a\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|a\rangle. \quad (228)$$

Stel dat $\mathbf{Q}$ een operator is met een complete verzameling orthonormale eigenvectoren,

$$Q|e_j\rangle = \lambda_j|e_j\rangle \quad (j = 1, 2, 3, \dots, n), \quad (229)$$

dan noemen we

$$Q = \sum_{j=1}^n \lambda_j|e_j\rangle\langle e_j| \quad (230)$$

de *spectrale decompositie* van $\mathbf{Q}$.

In een meer eenvoudige notatie vinden we voor vergelijking (228)

$$|a\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|a\rangle. \quad (231)$$

We zien dat de operator $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}$ voor een complete set.

3.2.6 Onzekerheid in de quantumfysica

We zijn de onzekerheidsrelaties van Heisenberg al tegengekomen. Ook hebben we gezien dat bepaalde, zogenaamde *geconjugeerde* operatoren niet commuteren. In het volgende willen we hier een verband tussen leggen en een bewijs leveren van het algemene onzekerheidsprincipe in de quantumfysica.

Voor iedere observabele A geldt

$$\sigma_A^2 = \langle (\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi | (\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi \rangle = \langle f | f \rangle, \quad (232)$$

met $|f\rangle \equiv (\mathbf{A} - \langle A \rangle) |\psi\rangle$. Evenzo geldt voor iedere andere observabele B ,

$$\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle, \quad \text{met} \quad |g\rangle \equiv (\mathbf{B} - \langle B \rangle) |\psi\rangle. \quad (233)$$

Voor inproducten geldt altijd,

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2. \quad (234)$$

Ook geldt voor elk complex getal z ,

$$|z|^2 = (\text{Re}(z))^2 + (\text{Im}(z))^2 \geq (\text{Im}(z))^2 = \left[\frac{1}{2i} (z - z^*) \right]^2. \quad (235)$$

Dus als we stellen dat $z = \langle f | g \rangle$, dan

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} [\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle] \right)^2. \quad (236)$$

Echter

$$\begin{aligned} \langle f | g \rangle &= \langle (\mathbf{A} - \langle A \rangle) \psi | (\mathbf{B} - \langle B \rangle) \psi \rangle = \langle \psi | (\mathbf{A} - \langle A \rangle) (\mathbf{B} - \langle B \rangle) \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (\mathbf{AB} - \mathbf{A} \langle B \rangle - \mathbf{B} \langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle) \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \mathbf{AB} \psi \rangle - \langle B \rangle \langle \psi | \mathbf{A} \psi \rangle - \langle A \rangle \langle \psi | \mathbf{B} \psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \langle \psi | \psi \rangle \\ &= \langle \mathbf{AB} \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &= \langle \mathbf{AB} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle. \end{aligned} \quad (237)$$

Evenzo geldt

$$\langle g | f \rangle = \langle \mathbf{BA} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle, \quad (238)$$

dus

$$\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle = \langle \mathbf{AB} \rangle - \langle \mathbf{BA} \rangle = \langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle, \quad (239)$$

met

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \equiv \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \quad (240)$$

de commutator van de twee operatoren. We kunnen hiermee de conclusie trekken, dat

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle \right)^2. \quad (241)$$

Dit is de onzekerheidsrelatie in zijn meest algemene vorm.

Stel dat we als eerste observabele de positie nemen, $\mathbf{A} = \mathbf{x}$ en voor de tweede de impuls $\mathbf{B} = \mathbf{p}_x = (\hbar/i)d/dx$. Voor de commutator geldt dan $[\mathbf{x}, \mathbf{p}_x] = i\hbar$ en we vinden

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i} i\hbar \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2, \quad (242)$$

en omdat standaarddeviaties altijd positief zijn,

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (243)$$

We zien dus dat onzekerheid heel algemeen ingebouwd zit in de quantumtheorie en we vinden een onzekerheidsrelatie voor elk paar observabelen waarvan de corresponderende operatoren niet commuteren. We noemen deze *incompatibele observabelen*.

3.2.7 Tijdevolutie van een systeem

In de schrödingerrepresentatie is de golffunctie van een systeem tijdafhankelijk, terwijl de observabelen geen expliciete tijdafhankelijkheid hebben. De hamiltoniaan wordt gegeven door $\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V}$, waarbij $\mathbf{T}$ en $\mathbf{V}$ de operatoren zijn die corresponderen met de kinetische en potentiële energie van het systeem. De tijdevolutie van het systeem wordt gegeven door de *tijdafhankelijke schrödingervergelijking*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi. \quad (244)$$

De schrödingervergelijking is de quantummechanische bewegingsvergelijking van het systeem. Indien we aannemen dat $\mathbf{H}$ niet van de tijd afhankelijk is, dan is het zinvol om oplossingen te zoeken van de vorm

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}. \quad (245)$$

Invullen in de schrödingervergelijking levert de eigenwaardenvergelijking

$$\mathbf{H}\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}). \quad (246)$$

Bovenstaande vergelijking wordt de *tijdonafhankelijke schrödingervergelijking* genoemd en het oplossen ervan levert de energie eigenwaarden $E_1, E_2, \dots$ en de corresponderende eigenfuncties $\phi_1(\mathbf{r}), \phi_2(\mathbf{r}), \dots$, die weer een complete orthonormale set vormen.

Voor een systeem in de toestand $\psi_n(\mathbf{r}, t) = \phi_n(\mathbf{r})e^{-iE_n t/\hbar}$ vinden we voor de verwachtingswaarde van de observabele A op tijdstip t

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= \int \psi_n^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{A} \psi_n(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \\ &= \int \phi_n^*(\mathbf{r}) e^{iE_n t/\hbar} \mathbf{A} \phi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} d\mathbf{r} \\ &= \int \phi_n^*(\mathbf{r}) \mathbf{A} \phi_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (247)$$

We zien dus dat wanneer de operator $\mathbf{A}$ geen expliciete tijdafhankelijkheid heeft, ook $\langle A \rangle_t$ constant is in de tijd.

De energie-eigenfuncties vormen een complete orthonormale set en hiermee kan een willekeurige toestand $\phi(\mathbf{r})$ geschreven worden als

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \phi_n(\mathbf{r}), \quad (248)$$

waarbij

$$c_n = \int \phi_n^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (249)$$

We kunnen dit resultaat gebruiken om de schrödingervergelijking (244) te integreren voor een willekeurige begintoestand $\psi(\mathbf{r}, t_0) = \phi(\mathbf{r})$ en vinden

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \phi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}. \quad (250)$$

3.3 Impulsmoment

De operatoren $\mathbf{J}$ voor het impulsmoment zijn gedefinieerd als de drie hermitische operatoren $\mathbf{J}_x$, $\mathbf{J}_y$ en $\mathbf{J}_z$ die aan de commutatieregels

$$[\mathbf{J}_x, \mathbf{J}_y] = i\hbar\mathbf{J}_z, \quad \text{etc.} \quad (251)$$

voldoen. Alle eigenschappen van het impulsmoment van een systeem volgen direct uit deze commutatierelaties.

Als $\mathbf{J}^2$ gedefinieerd is door

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_x^2 + \mathbf{J}_y^2 + \mathbf{J}_z^2, \quad (252)$$

dan kan met behulp van relatie (251) bewezen worden dat geldt

$$[\mathbf{J}_i, \mathbf{J}^2] = 0, \quad i = x, y, z. \quad (253)$$

Omdat de componenten van $\mathbf{J}$ niet met elkaar commuteren, kan slechts één ervan simultaan met $\mathbf{J}^2$ worden gespecificeerd. Hiervoor kiezen we conventioneel $\mathbf{J}_z$. Teneinde de simultane eigentoestanden van $\mathbf{J}^2$ en $\mathbf{J}_z$ te bepalen, dienen we de eigenwaardenvergelijkingen,

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2|j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle \\ \mathbf{J}_z|j, m\rangle &= \hbar m|j, m\rangle, \end{aligned} \quad (254)$$

op te lossen, waarbij $|j, m\rangle$ de gezamenlijke eigentoestand van $\mathbf{J}^2$ en $\mathbf{J}_z$ is met eigenwaarden $\hbar^2 j(j+1)$ en $\hbar m$. Men noemt j en m het impulsmoment en magnetisch quantumgetal, respectievelijk.

Men vindt de volgende belangrijke resultaten

- De eigenwaarden van $\mathbf{J}^2$ zijn van de vorm $\hbar^2 j(j+1)$, waarbij j de waarden

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (255)$$

aanneemt.

- Met elke eigenwaarde van $\mathbf{J}^2$, dus met een van de waarden voor j , correspondeert voor $\mathbf{J}_z$ de eigenwaarde $\hbar m$, waarbij m één van $2j+1$ waarden

$$m = j, j-1, \dots, -j \quad (256)$$

aanneemt.

Eigentoestanden die behoren bij verschillende eigenwaarden van een observabele zijn orthogonaal. We zullen ook aannemen dat deze toestanden genormeerd zijn, waarbij geldt dat

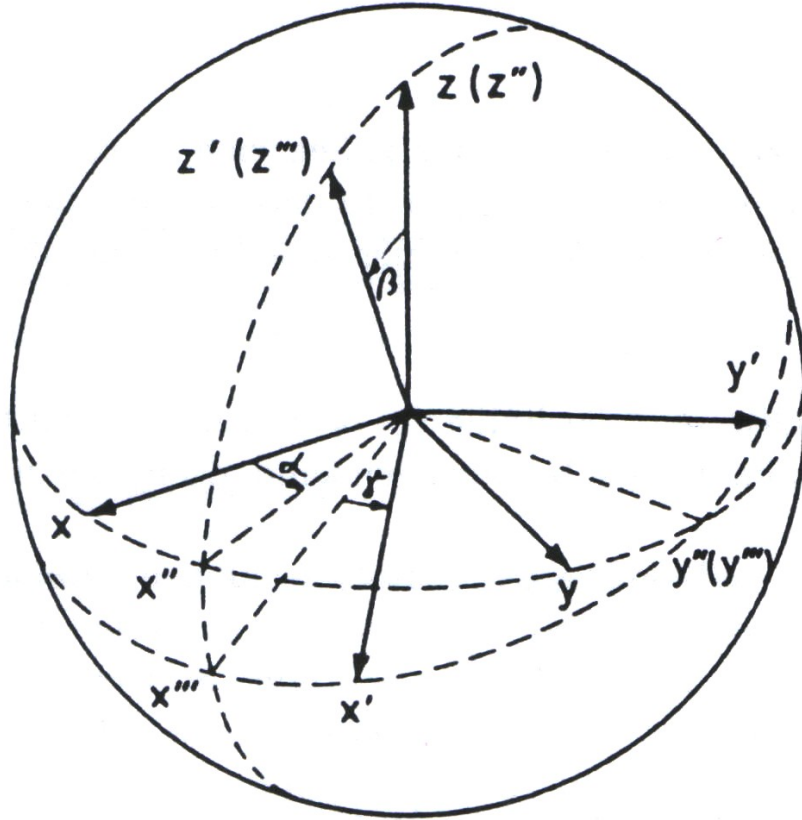
$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (257)$$

Merk op dat het quantumgetal l van baanimpulsmoment L , enkel integerwaarden kan aannemen, $l = 0, 1, 2, \dots$, terwijl J ook halftallige waarden kan aannemen.

3.3.1 Veranderen van coördinatenstelsel: Wigner-rotatiematrices

Figuur 24 toont dat we van een coördinatenstelsel, $\Sigma(x, y, z)$, kunnen overgaan naar een nieuw coördinatenstelsel, $\Sigma'(x', y', z')$ door achtereenvolgens

- een rotatie over de hoek α uit te voeren rond de z -as,
- een rotatie over de hoek β uit te voeren rond de nieuwe y'' -as,
- en tenslotte een rotatie over de hoek γ uit te voeren rond de nieuwe z''' -as.



Figuur 24: De Eulerhoeken die gebruikt worden om de rotatie van een impulsmoment te beschrijven.

Op deze manier krijgen we

$$|JM' \rangle_{\Sigma'} = \sum_M D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) |JM \rangle_{\Sigma} . \quad (258)$$

De Wigner-rotatiematrices zijn unitair en er geldt

$$D_{MM'}^J(\phi, \theta, \psi) = e^{-i(\gamma M' + \alpha M)} d_{MM'}^J(\beta) . \quad (259)$$

Figuur 25 geeft enkele van deze d -functies.

3.4 Combineren van impulsmomenten

Vaak dienen we twee impulsmomenten te koppelen tot een totaal impulsmoment. Er geldt

$$|J_1 J_2 JM \rangle = \sum_{M_1 M_2} \langle J_1 J_2 M_1 M_2 | J_1 J_2 JM \rangle |J_1 M_1 \rangle |J_2 M_2 \rangle . \quad (260)$$

De belangrijkste Clebsch-Gordan coëfficiënten zijn eveneens in figuur 25 gegeven.

**CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS,
AND d FUNCTIONS**

Note: A square-root sign is to be understood over every coefficient, e.g., for $-8/15$ read $-\sqrt{8/15}$.

Notation: $\begin{matrix} j & j & \dots \\ M & M & \dots \end{matrix}$

$\begin{matrix} m_1 & m_2 \\ m_1 & m_2 \end{matrix}$ Coefficients

$Y_l^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
 $Y_l^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$
 $Y_l^2 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$
 $Y_l^3 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$
 $Y_l^4 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$

$Y_\ell^m = (-1)^m Y_\ell^{m*}$
 $d_{m,0}^\ell = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^m e^{-im\phi}$

$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle = (-1)^{J-j_1-j_2} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 JM \rangle$

$d_{m',m}^j = (-1)^{m-m'} d_{m,m'}^j = d_{-m,-m'}^j$

$d_{0,0}^1 = \cos \theta$
 $d_{1/2,1/2}^1 = \cos \frac{\theta}{2}$
 $d_{1,1}^1 = \frac{1 + \cos \theta}{2}$
 $d_{1/2,-1/2}^1 = -\sin \frac{\theta}{2}$
 $d_{1,0}^1 = \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}$
 $d_{1,-1}^1 = \frac{1 - \cos \theta}{2}$

$d_{3/2,3/2}^2 = \frac{1 + \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$
 $d_{3/2,1/2}^2 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$
 $d_{3/2,-1/2}^2 = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1 - \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$
 $d_{3/2,-3/2}^2 = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$
 $d_{1/2,1/2}^2 = \frac{3 \cos \theta - 1}{2} \cos \frac{\theta}{2}$
 $d_{1/2,-1/2}^2 = -\frac{3 \cos \theta + 1}{2} \sin \frac{\theta}{2}$

$d_{2,2}^2 = \left(\frac{1 + \cos \theta}{2} \right)^2$
 $d_{2,1}^2 = -\frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \theta$
 $d_{2,0}^2 = \frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \theta$
 $d_{2,-1}^2 = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \theta$
 $d_{2,-2}^2 = \left(\frac{1 - \cos \theta}{2} \right)^2$

$d_{1,1}^2 = \frac{1 + \cos \theta}{2} (2 \cos \theta - 1)$
 $d_{1,0}^2 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta$
 $d_{1,-1}^2 = \frac{1 - \cos \theta}{2} (2 \cos \theta + 1)$
 $d_{0,0}^2 = \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$

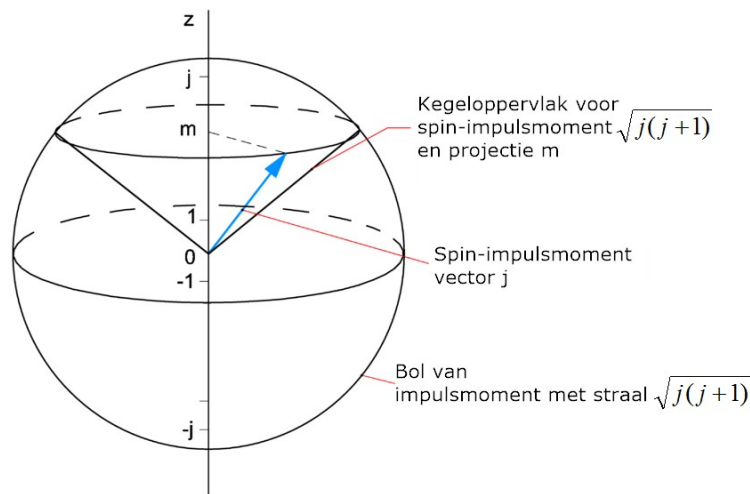
Figuur 25: Tabel van de belangrijkste Clebsch-Gordan coëfficiënten, sferisch harmonischen, en d functies.

3.4.1 Spin

In de klassieke mechanica kan een lichaam twee soorten impulsmoment hebben. Zo kan de aarde in een baan rond de zon draaien en we spreken hier van baanimpulsmoment, een vector die zijn oorsprong vindt in het uitproduct $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Verder draait de aarde ook rond haar as en ook

hier is er een vector impulsmoment $\mathbf{S} = I\omega$, waarbij I het traagheidsmoment wordt genoemd en ω een vector die de hoeksnelheid voorstelt. Het impulsmoment $\mathbf{S}$ is echter terug te voeren tot het baanimpulsmoment van de materie op aarde ten opzichte van de draaias.

In de quantummechanica treffen we een vergelijkbare situatie aan. Tijdens de beschrijving van het waterstofatoom maken we kennis met de operator $\mathbf{L}$ voor baanimpulsmoment. Deze operator beschrijft de beweging van het elektron rond het proton en kan enkel integerwaarden aannemen. Het is echter zo dat het elektron (en trouwens ook het proton) nog een andere vorm van impulsmoment met zich meedraagt en dit wordt *spin* genoemd. Spin heeft niets te maken met enige ruimtelijke beweging (voor zover we weten is het elektron puntvormig), maar is het een intrinsieke eigenschap van het deeltje. We zien nu dat de hierboven gevonden halftallige waarden van impulsmoment gerelateerd zijn aan de spin van deeltjes. Verder is het zo dat niet alle waarden van J optreden voor een bepaald systeem. Terwijl in de beschrijving van bijvoorbeeld het waterstofatoom het baanimpulsmoment L van het elektron ten opzichte van het proton, diverse waarden ($l = 0, 1, 2, \dots$) kan aannemen, ligt de waarde van de spin voor elk deeltje vast. Voor ieder deeltje is er maar één waarde. Zo hebben het elektron, proton, neutron, quarks, enz. allemaal een spin van $\frac{1}{2}$ (in eenheden van $\hbar$), terwijl pionen bijvoorbeeld spin 0 hebben.



Figuur 26: De lengte van het impulsmoment J is gelijk aan $\sqrt{j(j+1)}$. Als we een richting in de ruimte kiezen (de z -as in ons geval), dan is de richting die de vector van impulsmoment kan aannemen, gequantiseerd. Voor elke waarde van het impulsmoment J zijn er $2j + 1$ waarden voor J_z .

Figuur 26 toont dat er voor elke waarde van J die optreedt, altijd $2j + 1$ waarden zijn voor J_z . Als er geen voorkeursrichting in de ruimte is, omdat er bijvoorbeeld geen magnetisch veld aanstaat, dan zijn deze $2j + 1$ waarden ontaard (ze hebben dezelfde energie).

3.4.2 Matrixrepresentatie van spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes

De natuur realiseert de half-integer waarden voor impulsmoment in de vorm van het intrinsieke impulsmoment in het ruststelsel van deeltjes, zoals elektronen, protonen, neutronen en quarks. Alle materie waaruit ons universum opgebouwd is, bestaat uit deze deeltjes. Omdat de spin van deze deeltjes vastligt, hebben we hier feitelijk te maken met wiskundig gezien de meest eenvoudige niet-triviale quantumsystemen. Conventioneel gebruikt men het symbool $\mathbf{s}$ voor de operator van dit zogenaamde spin-impulsmoment, terwijl s en m_s de geassocieerde spin en

magnetische quantumgetallen zijn. Er zijn slechts twee mogelijke toestanden, $m_s = \pm \frac{1}{2}$ en we werken in een twee-dimensionale vectorruimte. De operatoren zijn eenvoudige 2×2 matrices en de toestanden zijn vectoren met maar twee componenten.

Uit vergelijking (254) volgt dat $\mathbf{s}^2$ de waarde $\hbar^2 s(s+1) = \frac{3}{4}\hbar^2$ heeft. Voor de lengte van $\mathbf{s}$ geldt dus $\|\mathbf{s}\| = \frac{1}{2}\sqrt{3}\hbar$. De projectie s_z heeft slechts twee eigenwaarden $\hbar m_s$ met $m_s = \pm \frac{1}{2}$, die corresponderen met de spin parallel (spin up: $\uparrow$) en spin antiparallel (spin down: $\downarrow$) aan de z -as. De corresponderende eigentoestanden van s_z kunnen geschreven worden als

$$|\alpha\rangle = |m_s = +\frac{1}{2}\rangle \quad |\beta\rangle = |m_s = -\frac{1}{2}\rangle \quad (261)$$

en dus

$$s_z|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle \quad s_z|\beta\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle. \quad (262)$$

Omdat de toestanden $|\alpha\rangle$ en $|\beta\rangle$ behoren bij verschillende eigenwaarden van s_z , zijn ze orthogonaal. We nemen verder aan dat ze genormeerd zijn. Er geldt

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \quad \langle\beta|\beta\rangle = 1 \quad \langle\alpha|\beta\rangle = 0. \quad (263)$$

3.4.3 Operatoren voor spin- $\frac{1}{2}$

In de beschrijving van spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes hebben we te maken met de spinoperatoren $\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y$ en $\mathbf{s}_z$, welke gezien kunnen worden als componenten van de spinoperator $\mathbf{s} = (\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y, \mathbf{s}_z)$. Verder is er nog de operator $\mathbf{s}^2$. Spin- $\frac{1}{2}$ impulsmoment kan eenvoudig worden behandeld door de spinoperatoren voor te stellen als 2×2 matrices en de spintoestanden door twee-component kolomvectoren. We schrijven $|\alpha\rangle$ en $|\beta\rangle$ als

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (264)$$

en de spinimpulsmoment operatoren door

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}, \quad (265)$$

waarbij $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ de *Pauli spinmatrices* zijn, gedefinieerd door

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (266)$$

Met behulp van bovenstaande relaties kunnen we direct een aantal resultaten afleiden. Er geldt

$$s_z\alpha = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\alpha, \quad (267)$$

hetgeen de matrixvorm is van de eerste uitdrukking in vergelijking (262). De spinmatrices voldoen aan de commutatierregels voor impulsmoment, $[s_x, s_y] = i\hbar s_z$, enz., waarbij men gebruik dient te maken van de regels voor matrixvermenigvuldiging⁵⁰.

⁵⁰Voor het product van twee 2×2 matrices A en B , geldt

$$(AB)_{mn} = \sum_{p=1}^2 A_{mp}B_{pn}, \quad m, n = 1, 2. \quad (268)$$

3.4.4 Spinoren

De algemene toestand van een spin- $\frac{1}{2}$ deeltje kan worden uitgedrukt als een twee-component kolommatrix $|\chi\rangle$, die een *spinor* wordt genoemd. Deze kan geschreven worden als

$$\chi = a_1\alpha + a_2\beta = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (269)$$

Verder definiëren we het scalaire product. Stel dat

$$|\eta\rangle = |\alpha\rangle\langle\alpha|\eta\rangle + |\beta\rangle\langle\beta|\eta\rangle = |\alpha\rangle b_1 + |\beta\rangle b_2, \quad (270)$$

dan is het scalaire product hiervan met de toestand $|\chi\rangle$, gegeven door vergelijking (269), gelijk aan

$$\begin{aligned} \langle\eta|\chi\rangle &= \langle\eta|\alpha\rangle\langle\alpha|\chi\rangle + \langle\eta|\beta\rangle\langle\beta|\chi\rangle \\ &= b_1^*a_1 + b_2^*a_2 = (b_1^*, b_2^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (271)$$

Het laatste deel van deze uitdrukking is de matrixvorm van het scalaire product. Hierbij wordt de ket $|\chi\rangle$ voorgesteld als een kolomvector, terwijl de bra $\langle\eta|$ wordt voorgesteld als een rijvector. Het scalaire product volgt uit de regels van matrixvermenigvuldiging.

3.4.5 Verwachtingswaarden

We gaan het matrixformalisme voor spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes nu toepassen. Allereerst berekenen we de verwachtingswaarde van s_x voor de spintoestand $|\chi\rangle$. We vinden

$$\begin{aligned} \langle\chi|s_x|\chi\rangle &= \frac{1}{2}\hbar(a_1^*, a_2^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\hbar(a_1^*, a_2^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar(a_1a_2^* + a_2^*a_1). \end{aligned} \quad (272)$$

Evenzo berekenen we $\langle\chi|s_z|\chi\rangle$. Er geldt

$$|\chi\rangle = |\alpha\rangle\langle\alpha|\chi\rangle + |\beta\rangle\langle\beta|\chi\rangle \quad (273)$$

en dus

$$s_z|\chi\rangle = s_z|\alpha\rangle\langle\alpha|\chi\rangle + s_z|\beta\rangle\langle\beta|\chi\rangle = \frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle\langle\alpha|\chi\rangle + \frac{\hbar}{2}|\beta\rangle\langle\beta|\chi\rangle, \quad (274)$$

waarmee we vinden

$$\langle\chi|s_z|\chi\rangle = \frac{\hbar}{2} [|\langle\alpha|\chi\rangle|^2 - |\langle\beta|\chi\rangle|^2] = \frac{\hbar}{2} [|a_1|^2 - |a_2|^2]. \quad (275)$$

We zien dat respectievelijk de eerste en tweede term de waarschijnlijkheid geven dat het deeltje in de spintoestand $|\chi\rangle$ spin up of spin down heeft.

Voorbeeld: Stel voor dat een spin- $\frac{1}{2}$ deeltje zich in de toestand

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1+i \\ 2 \end{pmatrix} \quad (276)$$

bevindt. Als we $\mathbf{s}_z$ meten, dan is de waarschijnlijkheid om $+\hbar/2$ te vinden gelijk aan $|(1+i)/\sqrt{6}|^2 = 1/3$ en de waarschijnlijkheid om $-\hbar/2$ te vinden $|2/\sqrt{6}|^2 = 2/3$. Als we $\mathbf{s}_x$ meten,

dan is de waarschijnlijkheid om $+\hbar/2$ te meten $(1/2)|(3+i)/\sqrt{6}|^2 = 5/6$, terwijl de waarschijnlijkheid om $-\hbar/2$ te vinden gelijk is aan $(1/2)|(-1+i)/\sqrt{6}|^2 = 1/6$. Klaarblijkelijk is de verwachtingswaarde van $\mathbf{s}_x$ gelijk aan

$$\frac{5}{6} \left(+\frac{\hbar}{2} \right) + \frac{1}{6} \left(-\frac{\hbar}{2} \right) = \frac{\hbar}{3}, \quad (277)$$

hetgeen we ook meer rechttoe rechtaan hadden kunnen vinden,

$$\langle s_x \rangle = \chi^\dagger s_x \chi = \begin{pmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+i)/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{3}. \quad (278)$$

3.4.6 Het meetprobleem in de quantummechanica

In het volgende lopen we in gedachten het meetproces door aan een quantummechanisch systeem met een spin- $\frac{1}{2}$ deeltje. Het idee is om in concrete termen kennis te maken met enkele van de abstracte concepten in de theorie. We beginnen met een deeltje in de toestand α . Het deeltje bevindt zich dus in een ‘spin-up’ toestand. Als iemand ons zou vragen: "Wat is de z -component van het spinimpulsmoment van het deeltje?", dan kunnen we zonder te aarzelen antwoorden: $+\hbar/2$. We weten zeker dat een meting van s_z met zekerheid deze waarde zal opleveren. Maar stel nu dat onze classicus in plaats daarvan vraagt, "Wat is de x -component van het spinimpulsmoment van dat deeltje?" We zijn verplicht te antwoorden: als je s_x meet, heb je een kans van 50-50 procent om of $\hbar/2$, om of $-\hbar/2$ te vinden. Als onze ondervrager een klassiek fysicus of een zogenaamde ‘realist’ is, dan zal hij dit niet als een bevredigend antwoord beschouwen. Je kunt dan een reactie krijgen als, "Probeer je me nu te vertellen dat je *niet* weet wat de echte toestand van het deeltje is?". In tegendeel, ik weet *precies* wat de toestand van het deeltje is, namelijk α . "Maar hoe kan het dan, dat je me niet kunt vertellen wat de x -component van de spin is?" Omdat het eenvoudig nog geen bepaalde x -component heeft. Dat kan ook niet zo zijn, want als zowel s_x als s_z precies bekend zijn, dan zou de onzekerheidsrelatie (251) geschonden zijn.

Op dit punt aangeland is onze uitdager het beu en grijpt de apparatuur en *meet* de x -component van de spin. Stel je nu voor dat hij de waarde $+\hbar/2$ meet. "Ha!", roept hij triomfantelijk uit, "Je hebt gelogen!". Dit deeltje heeft een precies bepaalde waarde voor s_x , het is $+\hbar/2$. Jazeker, dat heeft het *nu*, maar dat bewijst nog niet dat het deze waarde *had*, voordat jij je meting uitvoerde. "Je begint nu duidelijk te zeuren. Wat is er trouwens met je onzekerheidsrelatie gebeurd? Ik weet nu zowel s_x als s_z ." Het spijt me, maar dat weet je *niet*: gedurende je meting, heb je de toestand van het deeltje veranderd. Het is nu in de toestand $\alpha^{(x)}$. Je weet nu wel de waarde van s_x , maar je weet de waarde van s_z niet meer. "Nee hoor, ik was uitermate voorzichtig om het deeltje niet te verstoren toen ik s_x aan het meten was." Goed dan, je gelooft me niet. Waarom controleer je het niet: meet s_z en zie wat je krijgt. (hij kan nu natuurlijk $+\hbar/2$ vinden en dan staan we echt voor schut - maar als we dit hele scenario blijven herhalen, dan zal hij in de helft van de gevallen $-\hbar/2$ vinden).

Voor een gewone man, een filosoof, of een klassiek fysicus, zal een uitspraak als "dit deeltje heeft geen precies gedefinieerde positie" (of impuls, of x -component van het spinimpulsmoment, of wat dan ook) vaag klinken, incompetent zelfs. Maar het is geen van alle. Het is een direct gevolg van de axioma's van de quantumtheorie.

3.4.7 Meting van spin in een willekeurige richting

Tenslotte beschouwen we de eigenwaarden en eigenfuncties van een component van de spin-operator $\mathbf{s}$ in de richting van een eenheidsvector $\hat{\mathbf{n}}$. Dit komt neer op het oplossen van de

eigenwaardenvergelijking

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s} |\chi\rangle = \frac{1}{2} \hbar \lambda |\chi\rangle. \quad (279)$$

Ter vereenvoudiging nemen we aan dat $\hat{\mathbf{n}}$ in het (x, z) -vlak ligt en de componenten $\hat{\mathbf{n}} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$ heeft, met $0 \leq \theta \leq \pi$ en

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s} = s_x \sin \theta + s_z \cos \theta. \quad (280)$$

Gebruikmaken van de Pauli matrices levert

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (281)$$

Bovenstaande vergelijking kan eenvoudig worden opgelost. We vinden de equivalente vergelijkingen

$$\begin{aligned} a_1 \cos \theta + a_2 \sin \theta &= \lambda a_1 \\ a_1 \sin \theta - a_2 \cos \theta &= \lambda a_2. \end{aligned} \quad (282)$$

Elk van deze vergelijkingen geeft een uitdrukking voor de verhouding a_1/a_2 en het is eenvoudig na te gaan dat de vergelijkingen enkel consistent zijn als geldt dat $\lambda = \pm 1$. De eigenwaarden van $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}$ zijn dus $\pm \frac{1}{2} \hbar$ en hiermee zijn ze hetzelfde⁵¹ als die van s_z . We vinden de relaties

$$\begin{aligned} a_1 \sin \frac{\theta}{2} &= a_2 \cos \frac{\theta}{2} & \text{voor } \lambda = +1 \\ a_1 \cos \frac{\theta}{2} &= -a_2 \sin \frac{\theta}{2} & \text{voor } \lambda = -1. \end{aligned} \quad (283)$$

De normalisatieconditie $|a_1|^2 + |a_2|^2$ leidt tot de genormeerde eigenvectoren

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (284)$$

voor $\lambda = +1$ en $\lambda = -1$ respectievelijk. De willekeurige fasefactor in elk van deze eigenvectoren is zodanig gekozen dat voor $\theta = 0$ (corresponderend met $\hat{\mathbf{n}}$ in de richting van de z -as) de vectoren samenvallen met de eigenvectoren α en β .

We duiden de eigenkets van $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}$ met eigenwaarden $\pm \frac{1}{2} \hbar$ aan met $|\hat{\mathbf{n}}\pm\rangle$, dan vinden we

$$\begin{aligned} |\hat{\mathbf{n}}+\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |\alpha\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\beta\rangle \\ |\hat{\mathbf{n}}-\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} |\alpha\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |\beta\rangle. \end{aligned} \quad (285)$$

Uit bovenstaande vergelijking kan men eenvoudig de waarschijnlijkheid $P(\hat{\mathbf{z}}, \hat{\mathbf{n}}+)$ afleiden dat een meting van de spincomponent $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}$ van een deeltje in de toestand α (dus met spin parallel aan de eenheidsvector $\hat{\mathbf{z}}$ in de richting van de positieve z -as) het resultaat $+\frac{1}{2} \hbar$ oplevert. Deze waarschijnlijkheid kan verkregen worden door de expansie van $|\alpha\rangle$ te beschouwen in termen van de orthonormale spin eigentoestanden $|\hat{\mathbf{n}}\pm\rangle$ en wordt gegeven door $|\langle \hat{\mathbf{n}}+ | \alpha \rangle|^2$. We vinden

$$P(\hat{\mathbf{z}}, \hat{\mathbf{n}}+) = \cos^2 \frac{\theta}{2}. \quad (286)$$

Dit belangrijke resultaat speelt een grote rol in de discussie van niet-lokaliteit van de quantummechanica en de ongelijkheid van Bell. We gaan hier later op in.

⁵¹Dat hadden we ook meteen kunnen bedenken als we hadden ingezien dat er tussen verschillende richtingen niets te kiezen valt. Daarom heeft de component van $\mathbf{s}$ in elke willekeurige richting de eigenwaarden $\pm \frac{1}{2} \hbar$.

3.5 Storingsrekening

3.5.1 Inleiding tot tijdafhankelijke storingsrekening

Als we aannemen dat de potentiële energie niet van de tijd afhangt, $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$, dan kunnen we de tijdafhankelijk schrödingervergelijking $\mathbf{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$, oplossen door scheiding van variabelen, $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$, waarbij $\psi(\mathbf{r})$ dan voldoet aan de tijdonafhankelijke schrödingervergelijking $\mathbf{H}\psi = E\psi$. Omdat de tijdafhankelijkheid van Ψ volledig verzorgd wordt door de exponentiële factor $e^{-iEt/\hbar}$, die wegvalt als we de fysisch relevante grootte $|\Psi|^2$ construeren, zijn alle waarschijnlijkheden en verwachtingswaarden constant in de tijd. We kunnen natuurlijk lineaire combinaties van deze stationaire toestanden vormen, maar ook dan zijn de mogelijke waarden voor de energie en de bijbehorende waarschijnlijkheden constant.

Als we overgangen van één energieniveau naar een ander willen accommoderen, dan dienen we een tijdafhankelijke potentiaal te introduceren. We schrijven de hamiltoniaan als $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'(t)$. Als het tijdafhankelijke deel van de hamiltoniaan $\mathbf{H}'(t)$, klein is ten opzichte van het tijdonafhankelijke deel $\mathbf{H}_0$, dan kunnen we tijdafhankelijke storingsrekening toepassen. Hierdoor krijgen we meer inzicht in het proces van *quantumsprongen*.

3.5.2 Twee-niveaus systemen

Stel dat er slechts twee toestanden zijn voor een niet-verstoord systeem, ψ_a en ψ_b . Beide zijn eigentoestanden van de niet-verstoorde hamiltoniaan $\mathbf{H}_0$,

$$\mathbf{H}_0\psi_a = E_a\psi_a \quad \text{en} \quad \mathbf{H}_0\psi_b = E_b\psi_b, \quad (287)$$

en ze zijn orthonormaal,

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \delta_{ab}. \quad (288)$$

Als er geen verstoring optreedt, dan is de totale golffunctie een superpositie en men vindt

$$\Psi(t) = c_a\psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + c_b\psi_b e^{-iE_b t/\hbar}. \quad (289)$$

Hierbij is $|c_a|^2$ de waarschijnlijkheid dat het deeltje zich in toestand ψ_a bevindt. Uit de normering van $\Psi(t)$ volgt dat

$$|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1. \quad (290)$$

3.5.3 Het verstoorde systeem

Als we de storingsterm $\mathbf{H}'(t)$, aanzetten, zal $\Psi(t)$ veranderen. Deze golffunctie kan echter nog steeds worden geschreven als een lineaire combinatie van de complete verzameling ψ_a en ψ_b . Het verschil is echter dat de coëfficiënten een functie van de tijd worden. We vinden

$$\Psi(t) = c_a(t)\psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + c_b(t)\psi_b e^{-iE_b t/\hbar}. \quad (291)$$

We dienen nu $c_a(t)$ en $c_b(t)$ te bepalen. Stel dat we beginnen met $c_a(0) = 1$ en $c_b(0) = 0$ en enige tijd later vinden we $c_a(t_1) = 0$ en $c_b(t_1) = 1$, dan heeft het systeem een overgang van ψ_a naar ψ_b gemaakt.

We kunnen $c_a(t)$ en $c_b(t)$ bepalen door van $\Psi(t)$ te eisen dat het voldoet aan de tijdafhankelijke schrödingervergelijking,

$$\mathbf{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad \text{met} \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}'(t). \quad (292)$$

Invullen van vergelijking (291) in (292) levert⁵²

$$\begin{aligned} & c_a [\mathbf{H}_0 \psi_a] e^{-iE_a t/\hbar} + c_b [\mathbf{H}_0 \psi_b] e^{-iE_b t/\hbar} + c_a [\mathbf{H}' \psi_a] e^{-iE_a t/\hbar} + c_b [\mathbf{H}' \psi_b] e^{-iE_b t/\hbar} \\ &= i\hbar \left[\dot{c}_a \psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + \dot{c}_b \psi_b e^{-iE_b t/\hbar} + c_a \psi_a \left(-\frac{iE_a}{\hbar} \right) e^{-iE_a t/\hbar} + c_b \psi_b \left(-\frac{iE_b}{\hbar} \right) e^{-iE_b t/\hbar} \right]. \end{aligned} \quad (293)$$

Tengevolge van vergelijking (287) vallen de eerste twee termen links weg tegen de laatste twee termen rechts en vinden we

$$c_a [\mathbf{H}' \psi_a] e^{-iE_a t/\hbar} + c_b [\mathbf{H}' \psi_b] e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar \left[\dot{c}_a \psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + \dot{c}_b \psi_b e^{-iE_b t/\hbar} \right]. \quad (294)$$

We kunnen $\dot{c}_a$ weer op de standaard manier isoleren: neem het inproduct met ψ_a en maak gebruik van de orthogonaliteit van ψ_a en ψ_b . We vinden dan

$$c_a < \psi_a | \mathbf{H}' | \psi_a > e^{-iE_a t/\hbar} + c_b < \psi_a | \mathbf{H}' | \psi_b > e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar \dot{c}_a e^{-iE_a t/\hbar}. \quad (295)$$

Ter afkorting definiëren we

$$H'_{ij} \equiv < \psi_i | \mathbf{H}' | \psi_j >. \quad (296)$$

Merk op dat de hermiticiteit van $\mathbf{H}'$ ervoor zorgt dat $H'_{ji} = (H'_{ij})^*$. We vermenigvuldigen vervolgens met $-(i/\hbar)e^{iE_a t/\hbar}$ en concluderen dat

$$\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar} \left[c_a H'_{aa} + c_b H'_{ab} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar} \right]. \quad (297)$$

Op dezelfde manier kunnen we met het inproduct met ψ_b de term $\dot{c}_b$ eruit distilleren,

$$c_a < \psi_b | \mathbf{H}' | \psi_a > e^{-iE_a t/\hbar} + c_b < \psi_b | \mathbf{H}' | \psi_b > e^{-iE_b t/\hbar} = i\hbar \dot{c}_b e^{-iE_b t/\hbar} \quad (298)$$

en dus

$$\dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar} \left[c_b H'_{bb} + c_a H'_{ba} e^{i(E_b - E_a)t/\hbar} \right]. \quad (299)$$

Vergelijkingen (297) en (299) bepalen $c_a(t)$ en $c_b(t)$. Samen zijn ze volledig equivalent aan de tijdafhankelijke schrödingervergelijking van het twee-niveaus systeem. In het algemeen zijn de diagonale elementen van $\mathbf{H}'$ gelijk aan nul, $H'_{aa} = H'_{bb} = 0$. In dat geval vinden we als oplossingen

$$\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t/\hbar} c_b \quad \text{en} \quad \dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{-i\omega_0 t/\hbar} c_a, \quad (300)$$

met

$$\omega_0 \equiv \frac{E_b - E_a}{\hbar}. \quad (301)$$

We nemen aan dat $E_b \geq E_a$ en dat $\omega_0 \geq 0$.

3.5.4 Tijdafhankelijke storingsrekening

Het resultaat gegeven in vergelijking (300) is exact en er is geen aanname gemaakt over de grootte van de verstoring. Echter, als $\mathbf{H}'$ klein is, dan kunnen we vergelijking (300) oplossen met een stapsgewijze benaderingsmethode. Stel dat het deeltje begint in de laagste toestand, met $c_a(0) = 1$ en $c_b(0) = 0$. Als er helemaal geen verstoring zou zijn, dan zou dit voor altijd de toestand blijven.

⁵²Merk op dat we met de notatie bedoelen $\dot{c} = dc/dt$.

Nulde-orde:

$$c_a^{(0)}(t) = 1, \quad c_b^{(0)}(t) = 0. \quad (302)$$

Teneinde de eerste-orde benadering te berekenen vullen we deze waarden in in het rechterlid van vergelijking (300).

Eerste-orde:

$$\begin{aligned} \frac{dc_a}{dt} &= 0 \Rightarrow c_a^{(1)}(t) = 1; \\ \frac{dc_b}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} \Rightarrow c_b^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt'. \end{aligned} \quad (303)$$

Vervolgens vullen we deze vergelijkingen weer in in het rechterlid en vinden de tweede-orde benadering:

Tweede-orde:

$$\begin{aligned} \frac{dc_a}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt' \\ c_a^{(2)}(t) &= 1 - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t H'_{ab}(t') e^{-i\omega_0 t'} \left[\int_0^{t'} H'_{ba}(t'') e^{i\omega_0 t''} dt'' \right] dt', \end{aligned} \quad (304)$$

terwijl c_b onveranderd blijft, $c_b^{(2)}(t) = c_b^{(1)}(t)$. Merk op dat met deze notatie $c_a^{(2)}(t)$ de nulde-orde term bevat.

In principe kunnen we deze procedure oneindig vaak herhalen om de precisie te vergroten.

3.5.5 Sinusvormige verstoringen

Stel dat de verstoring een sinusvormige tijdafhankelijkheid heeft, $H'(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}) \cos \omega t$, zodat $H'_{ab} = V_{ab} \cos \omega t$ met $V_{ab} \equiv \langle \psi_a | V | \psi_b \rangle$. We nemen aan dat de diagonale matrixelementen weer nul zijn. In eerste-orde storingsrekening gaat vergelijking (303) nu over in

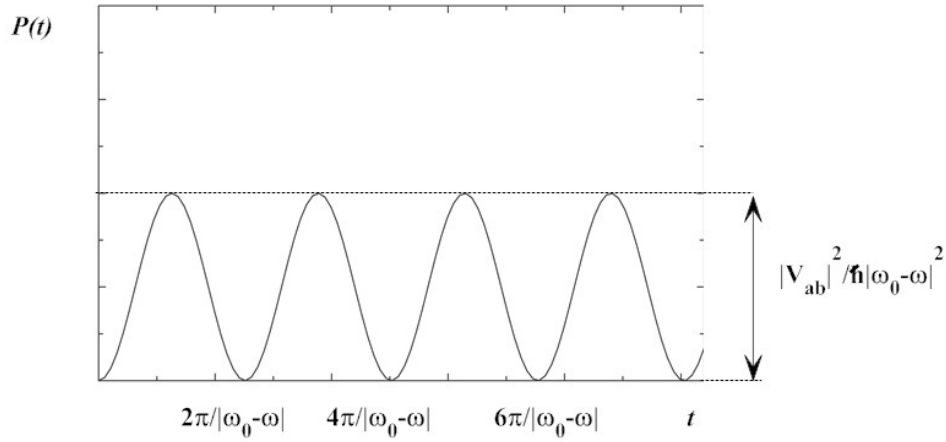
$$c_b(t) \approx -\frac{i}{\hbar} V_{ba} \int_0^t \cos(\omega t') e^{i\omega_0 t'} dt' = -\frac{iV_{ba}}{2\hbar} \int_0^t \left[e^{i(\omega_0 + \omega)t'} + e^{i(\omega_0 - \omega)t'} \right] dt' \quad (305)$$

en er geldt als eindresultaat

$$c_b(t) \approx -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_0 + \omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right]. \quad (306)$$

We kunnen deze uitdrukking vereenvoudigen als we enkel naar storingsfrequenties, ω , kijken die dicht bij de overgangsfrequentie, ω_0 , liggen. In dat geval domineert de tweede term in vergelijking (306). Specifiek nemen we aan dat $\omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega|$. Dit vormt geen ernstige beperking, omdat verstoringen bij deze andere frequenties een verwaarloosbare waarschijnlijkheid hebben om een overgang te induceren. We vinden dan

$$c_b(t) \approx -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)t/2}}{\omega_0 - \omega} \left[e^{i(\omega_0 - \omega)t/2} - e^{-i(\omega_0 - \omega)t/2} \right] = -i \frac{V_{ba}}{\hbar} \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\omega_0 - \omega} e^{i(\omega_0 - \omega)t/2}. \quad (307)$$



Figuur 27: Overgangswaarschijnlijkheid als functie van de tijd voor een sinusvormige verstoring.

De overgangswaarschijnlijkheid - de waarschijnlijkheid dat een deeltje dat zich initieel in toestand ψ_a bevindt, een tijd t later wordt aangetroffen in toestand ψ_b - is

$$P_{a \rightarrow b}(t) = |c_b(t)|^2 \approx \frac{|V_{ba}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}. \quad (308)$$

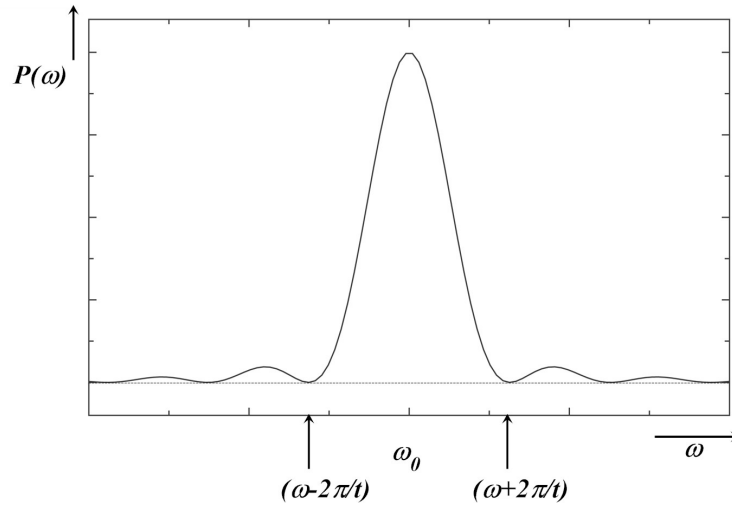
Het is opmerkelijk dat als functie van de tijd, de overgangswaarschijnlijkheid sinusvormig oscilleert. Dit is aangegeven in Fig. 27. Eerst gaat de waarschijnlijkheid naar een maximum, $|V_{ab}|^2/\hbar^2(\omega_0 - \omega)^2$, dat trouwens noodzakelijkerwijs behoorlijk kleiner is dan 1, anders zou immers de verstoring niet klein zijn, om daarna weer naar nul te gaan. Als je je kansen om een overgang te induceren wilt maximaliseren, dan moet je de verstoring niet continue aan laten staan. Je kunt hem beter uitschakelen na een tijd $\pi/|\omega_0 - \omega|$. Dit flip-flop gedrag is geen artifact van storingsrekening - het gebeurt ook in een exacte beschrijving!

De waarschijnlijkheid om een overgang te induceren is het grootst als de aangelegde frequentie dicht bij de 'natuurlijke' frequentie ω_0 is. Dit wordt getoond in Fig. 60, waar $P_{a \rightarrow b}$ geplot is als functie van de frequentie ω . De piek heeft een hoogte $(|V_{ab}|t/2\hbar)^2$ en een breedte $4\pi/t$. De piek wordt dus hoger en smaller naarmate de tijd voortschrijdt (merk op dat dit resultaat slechts geldig is voor relatief kleine tijden t , vanwege de toepasbaarheid van storingsrekening).

3.5.6 Emissie en absorptie van elektromagnetische straling

Een elektromagnetische golf bestaat uit transversaal, dus loodrecht gericht op de bewegingsrichting, onderling loodrecht oscillerende elektrische en magnetische velden. Een atoom in de buurt van een dergelijke passerende lichtgolf reageert primair op de elektrische component. Als de golflengte groot is ten opzichte van de grootte van het atoom, dan kunnen we de ruimtelijke uitgebreidheid van het veld verwaarlozen. Dit is voor zichtbaar licht met een typische golflengte van $5000 \text{ \AA}$ het geval, want een atoom heeft een grootte in de orde van $1 \text{ \AA}$. Het atoom staat in dat geval bloot aan een sinusvormig oscillerend elektrisch veld, $\mathbf{E} = E_0 \cos(\omega t)\mathbf{k}$, als de golf gepolariseerd is in de z -richting. De Hamiltoniaan die de storing beschrijft is dan $H' = -qE_0 z \cos(\omega t)$, met q de lading van het elektron. Er geldt dan

$$H'_{ba} = -\mathcal{P}E_0 \cos(\omega t), \quad \text{met} \quad \mathcal{P} \equiv q \langle \psi_b | z | \psi_a \rangle. \quad (309)$$



Figuur 28: Overgangswaarschijnlijkheid als functie van de frequentie van de sinusvormige verstoring.

Typisch is ψ een even of oneven functie van z en in beide gevallen is $z|\psi|^2$ oneven, en zal de integraal nul opleveren. Dit bevestigt onze gebruikelijke aanname dat de diagonale matrixelementen van H' gelijk aan nul zullen zijn. De interactie van licht met materie wordt dus beheerst door precies de soort storingsrekening die we in de vorige paragraaf bestudeerd hebben, met $V_{ba} = -\mathcal{P}E_0$.

3.5.7 Absorptie, gestimuleerde emissie, en spontane emissie

Stel een atoom bevindt zich in de laagste toestand ψ_a en we schijnen nu gepolariseerd, monochromatisch licht op dit atoom. De waarschijnlijkheid dat het atoom een overgang maakt naar de hoogste toestand ψ_b wordt gegeven door vergelijking (308). Vanwege $V_{ba} = -\mathcal{P}E_0$ vinden we de uitdrukking

$$P_{a \rightarrow b}(t) = \left(\frac{|\mathcal{P}|E_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}. \quad (310)$$

In dit proces absorbeert het atoom energie $E_b - E_a = \hbar\omega_0$ van het elektromagnetische veld en we zeggen dat het atoom een foton geabsorbeerd heeft.

We kunnen de afleiding herhalen voor een atoom dat begint in de hoogste toestand en dat vervolgens vervalt naar de laagste toestand. De waarschijnlijkheid voor die overgang is dan

$$P_{b \rightarrow a}(t) = \left(\frac{|\mathcal{P}|E_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}. \quad (311)$$

Het resultaat is precies hetzelfde en dat is opmerkelijk: als een atoom in een aangeslagen toestand is en we schijnen er licht op, dan is de overgangswaarschijnlijkheid even groot als die voor een overgang van de grondtoestand naar de aangeslagen toestand. Dit proces heet *gestimuleerde emissie* en werd voor het eerst door Einstein ontdekt.

In het geval van gestimuleerde emissie verkrijgt het elektromagnetische veld een energie $\hbar\omega_0$ van het atoom. Er komt één foton in, maar er komen twee fotonen uit: het originele foton dat de overgang induceerde en een ander foton van de overgang zelf. We zien dus dat we hier een principe voor het versterken van licht hebben, want als ik een vat atomen heb, die zich allemaal in de aangeslagen toestand bevinden, en ik schijn daar één foton op, dan veroorzaakt

dit een kettingreactie van uitgaande fotonen, allemaal met dezelfde frequentie en allemaal op hetzelfde moment. Op dit principe berust de werking van een *laser*. Hierbij is het essentieel om de meerderheid van de atomen in een aangeslagen toestand te krijgen. Dit wordt *populatie inversie* genoemd.

Naast absorptie en gestimuleerde emissie is er een derde mechanisme voor de interactie van licht met materie: *spontane emissie*. Hierbij gaat een atoom van een aangeslagen toestand over naar de grondtoestand en zendt in het proces een foton uit. Er is geen noodzaak voor een extern elektromagnetisch veld om de overgang te initiëren. Dit mechanisme vormt de grondslag voor de normale deëxcitatie van aangeslagen atomen. Op het eerste gezicht is het verre van duidelijk waarom spontane emissie op zou treden. Als het atoom zich in een stationaire toestand bevindt, ook al is dit een aangeslagen toestand, en er is geen externe verstoring, dan zou het voor altijd in die aangeslagen toestand moeten blijven. En dat is ook zo, als er echt geen externe verstoringen zouden zijn. Echter in quantumelektrodynamica zijn de velden nooit gelijk aan nul, zelfs niet in de grondtoestand. Er is altijd een nulpuntsenergie en de hiermee corresponderende elektromagnetische straling is voldoende om spontane emissie te initiëren.

3.5.8 Integraalvorm van de schrödingervergelijking

De tijdonafhankelijke schrödingervergelijking

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi, \quad (312)$$

kunnen we beknopt schrijven als

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = Q, \quad (313)$$

met

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{en} \quad Q \equiv \frac{2m}{\hbar^2}V\psi. \quad (314)$$

De *lijkt* op de zogenaamde helmholtzvergelijking, maar merk op dat de "inhomogene" term (Q) zelf weer afhangt van ψ . Stel dat we een functie $G(\mathbf{r})$ kunnen vinden die deze helmholtzvergelijking oplost voor een "bron" die gegeven wordt door een *delta functie*,

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}). \quad (315)$$

We kunnen de golffunctie nu schrijven in de vorm van een integraal,

$$\psi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)Q(\mathbf{r}_0)d^3\mathbf{r}_0. \quad (316)$$

Het is niet zo moeilijk om te laten zien dat dit inderdaad voldoet aan de schrödingervergelijking. Invullen levert

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \int [(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)]Q(\mathbf{r}_0)d^3\mathbf{r}_0 = Q(\mathbf{r}). \quad (317)$$

We noemen $G(\mathbf{r})$ de zogenaamde *greense* functie voor de helmholtzvergelijking⁵³.

Als we vergelijking (315) oplossen, dan vinden we

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}, \quad (318)$$

⁵³In het algemeen stelt de greense functie van een bepaalde differentiaalvergelijking de response voor van een delta-functie als bronterm.

waarbij r de lengte van $\mathbf{r}$ is. Dat dit inderdaad de oplossing is, is eenvoudig na te gaan door uitdrukking (318) eerst te differentiëren en dan in te vullen in vergelijking (315). Overigens mogen we bij deze functie $G(\mathbf{r})$ elke functie $G_0(\mathbf{r})$ optellen die voldoet aan de *homogene* helmholtzvergelijking

$$(\nabla^2 + k^2) G_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (319)$$

omdat $G(\mathbf{r}) + G_0(\mathbf{r})$ ook voldoet aan vergelijking (315). Hiermee vinden we voor de algemene oplossing van de schrödingervergelijking de uitdrukking

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} V(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0, \quad (320)$$

waarbij ψ_0 voldoet aan de schrödingervergelijking voor een *vrij* deeltje,

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_0 = 0. \quad (321)$$

Bovenstaande integraalvorm van de schrödingervergelijking is volkomen equivalent aan de vertrouwde differentiaalvorm⁵⁴.

3.5.9 De Born benadering

We beschouwen de verstrooiing van een deeltje met energie E aan een potentiaal en kunnen hierbij denken aan de verstrooiing van een elektron aan een atoomkern. We nemen aan dat de interactie relatief zwak is. De integraaluitdrukking voor de schrödingervergelijking is

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) V(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0, \quad (322)$$

waarbij ψ_0 de invallende golf voorstelt,

$$g(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (323)$$

de greense functie en V de verstrooiingspotentiaal. We kunnen dit schematisch schrijven als

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi. \quad (324)$$

Stel nu dat we deze uitdrukking voor ψ weer invullen binnen het integraalteken,

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \int gV \int gV\psi. \quad (325)$$

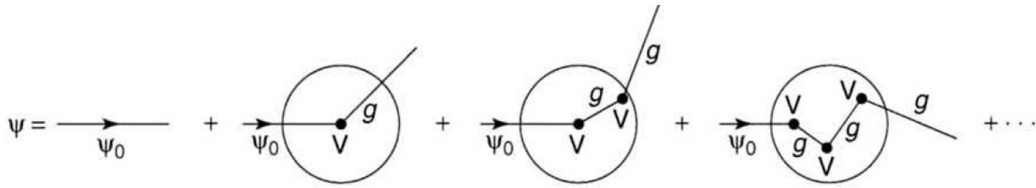
Als we dit herhalen, vinden we voor ψ de reeks

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \int gV \int gV\psi_0 + \int gV \int gV \int gV\psi_0 + \dots + \int (gV)^n \psi_0 + \dots \quad (326)$$

Elke term bevat alleen de inkomende golf functie ψ_0 en een toenemend aantal machten van gV . In de *eerste* Born benadering trunkenen we de reeks na de tweede term, maar het is duidelijk hoe we hogere orde correcties kunnen aanbrengen.

De Born benadering wordt diagrammatisch voorgesteld in figuur 29. In nulde orde is ψ vrij van de potentiaal; in eerste orde is er één enkele interactie met de potentiaal en daarna "propageert" het deeltje in een nieuwe richting; in tweede orde ondergaat het deeltje een "stoot", propageert het naar een nieuwe lokatie, waar het weer een "stoot" krijgt en naar de eindtoestand propageert; enz. In deze context wordt de greense functie de *propagator* genoemd - hij vertelt je hoe de verstoring propageert tussen interacties. De Born benadering was de inspiratie voor Feynmans formulering van relativistische quantummechanica, die geheel wordt uitgedrukt in termen van *vertex factoren* (V) en propagatoren (g) door middel van zogenaamde Feynmandiagrammen.

⁵⁴Het lijkt op een expliciete oplossing van de schrödingervergelijking, maar dat is niet zo. Er staat nog een ψ onder het integraalteken.



Figuur 29: Diagrammatische interpretatie van de Born benadering gegeven in vergelijking (445).

3.6 Einstein, Podolsky en Rosen Paradox

In 1935 publiceerden Einstein, Podolsky en Rosen (EPR) een artikel⁵⁵ met de titel ‘*Can Quantum-Mechanical Description of Reality Be Considered Complete*’. We zullen de implicaties hiervan bespreken.

EPR stellen dat teneinde het succes van een theorie te kunnen beoordelen men twee vragen dient te beantwoorden: (1) ‘*Is de theorie correct?*’ en (2) ‘*Is de beschrijving die door de theorie gegeven wordt compleet?*’. De eerste vraag is eenvoudig te beantwoorden door te bestuderen of de voorspellingen van de theorie in overeenstemming zijn met de resultaten van metingen. Quantummechanica is zonder twijfel een correcte theorie en EPR beschouwden de tweede vraag in relatie tot de quantummechanica. Allereerst werd een nadere definitie gegeven van wat bedoeld is met *compleet*. Volgens EPR is een complete theorie er een waarbij elk element van de fysische realiteit een tegenhanger heeft in de fysische theorie. Dit wordt de *conditie van compleetheit* genoemd. Met betrekking tot de *elementen van de fysische realiteit* worden door EPR de volgende twee veronderstellingen gemaakt:

- Als men de waarde van een grootheid van een systeem met zekerheid kan voorspellen zonder het systeem te verstoren, dan komt die grootheid overeen met een element in de werkelijkheid.
- Als twee systemen dynamisch geïsoleerd zijn, dan kan een meting van een grootheid van één systeem niet van invloed zijn op die van het andere systeem. Dit is de *conditie van lokaliteit*.

Vervolgens geven EPR een eenvoudige verhandeling van de quantummechanica, hetgeen er op neer komt dat *wanneer de impuls van een deeltje bekend is, haar coördinaat geen fysische realiteit heeft*. Elke poging om de coördinaat te meten zal de toestand van het systeem zodanig verstoren dat elke kennis die we hadden van de impuls verloren gaat. EPR concluderen dat of (1) *de quantummechanische beschrijving van de werkelijkheid gegeven door de golf functie niet compleet is* of dat (2) *wanneer de operatoren die corresponderen met twee fysische grootheden niet commuteren, deze grootheden niet simultaan deel van de werkelijkheid kunnen uitmaken*. In de quantummechanica wordt aangenomen dat de golf functie *alle* informatie bevat voor een complete beschrijving van de fysische werkelijkheid. EPR laten zien dat deze aanname in conflict is met bovengenoemde definitie van fysische werkelijkheid. In het volgende bespreken we de argumentatie.

Twee systemen, I en II, worden bijeengebracht voor een tijd $0 < t < T$, waarna er geen interactie meer is tussen beide systemen. Stel dat x_1 en x_2 de coördinaten en p_1 en p_2 de impulsen zijn van systeem I en II, respectievelijk. Het is dan mogelijk om zowel $X_{\text{verschil}} \equiv x_1 - x_2$ als

⁵⁵A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, Physical Review **47**, 777 (1935).

$P_{\text{totaal}} \equiv p_1 + p_2$ tegelijkertijd exact te kennen, want

$$\begin{aligned}
 [X_{\text{verschil}}, P_{\text{totaal}}] &= [x_1 - x_2, p_1 + p_2] \\
 &= [x_1, p_1] + [x_1, p_2] - [x_2, p_1] - [x_2, p_2] \\
 &= [x_1, p_1] - [x_2, p_2] \\
 &= i\hbar - i\hbar \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{327}$$

Oplossen van de schrödingervergelijking geeft de golffunctie Ψ voor het complete systeem voor $t > T$. We kennen echter niet de afzonderlijke toestanden van systemen I en II na de interactie. Daarvoor zijn metingen vereist.

Stel dat $a_1, a_2, \dots$ de eigenwaarden van een fysische grootheid A zijn met betrekking tot systeem I en $u_1(x_1), u_2(x_2), \dots$ de corresponderende eigenfuncties. Volgens het expansietheorema kunnen we dan schrijven

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x_2) u_n(x_1), \tag{328}$$

waarbij $\psi_n(x_2)$ beschouwd kunnen worden als de coëfficiënten van de expansie van Ψ in een orthonormale set eigenfuncties $u_n(x_1)$ van de Hermitische operator A . Stel dat na een meting het eerste systeem in toestand $u_k(x_1)$ is, dan is het tweede systeem in toestand $\psi_k(x_2)$. Dit is het proces van de zogenaamde reductie van de golffunctie. Het golfpakket gegeven door de oneindige reeks in vergelijking (328) is gereduceerd tot een enkele term

$$\psi_k(x_2) u_k(x_1). \tag{329}$$

We hadden ook een andere grootheid, B , met eigenwaarden $b_1, b_2, \dots$ en eigenfuncties $v_1(x_1), v_2(x_2), \dots$ kunnen kiezen en hadden dan als expansie

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{s=1}^{\infty} \phi_s(x_2) v_s(x_1), \tag{330}$$

verkregen, waarde de ϕ 's de nieuwe coëfficiënten zijn. Indien we voor B de waarde b_r hadden gemeten, dan zou systeem I zich in toestand $v_r(x_1)$ en systeem II zich in toestand $\phi_r(x_2)$ bevinden.

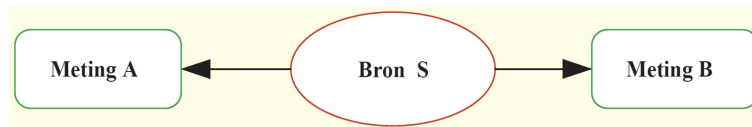
EPR concluderen dat als resultaat van twee verschillende metingen aan systeem I, systeem II zich zal bevinden in toestanden beschreven door verschillende golffuncties. Omdat de systemen niet meer wisselwerken, kan er in systeem II niet iets gebeurd zijn als consequentie van de gebeurtenissen in systeem I. Het is dus mogelijk twee verschillende golffuncties (ψ_k en ϕ_r) toe te kennen aan dezelfde werkelijkheid (systeem II na interactie met systeem I). Vervolgens beschouwen EPR het geval dat ψ_k en ϕ_r eigenfuncties zijn van twee niet-commuterende operatoren $\mathbf{P}$ en $\mathbf{Q}$. Door aan systeem I een meting van P of Q uit te voeren, zijn we in een positie om met absolute zekerheid, en zonder systeem II op enigerlei wijze te verstoren, de waarde van de grootheid P of de waarde van Q te voorspellen. In overeenstemming met de gegeven definitie van werkelijkheid moeten we in het eerste geval P als element van de werkelijkheid beschouwen, terwijl in het tweede geval Q een element van de werkelijkheid is. We hebben echter gezien dat ψ_k en ϕ_r behoren tot dezelfde werkelijkheid. Deze laatste conclusie is in strijd met de quantummechanica en EPR concluderen dat quantummechanica niet compleet is.

Samenvattend kunnen we stellen dat uit bijvoorbeeld de meting van de impuls van deeltje 1 (systeem I) we vanwege onze kennis van P_{totaal} met zekerheid kunnen voorspellen wat het resultaat zal zijn van een meting van de impuls van deeltje 2 (systeem II). Als we echter de impuls van

deeltje 2 met zekerheid kunnen voorspellen zonder dat we met dit deeltje wisselwerken, dan moet deeltje 2 deze impuls al hebben vóór de meting, en zelfs al voor de meting aan deeltje 1 (er is immers geen verstoring van deeltje 2). Quantummechanisch wordt de toestand beschreven door Ψ , maar hieruit kunnen we de waarde van de impuls van deeltje 2 niet bepalen. EPR komen tot de conclusie dat de quantummechanica onvolledig is.

3.6.1 Formulering van de EPR Paradox door Bohm

Bohm heeft een experiment bedacht dat analoog is aan het door EPR beschreven experiment, maar waarbij experimentele toetsing mogelijk is. Stel dat in een bepaald proces een paar spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes, zeg twee neutronen, worden geproduceerd in een bron S , waarbij de totale spin van de neutron gelijk is aan nul (een zogenaamde singlet spintoestand). De neutronen vliegen weg in tegenovergestelde richtingen en hun individuele spins kunnen worden geanalyseerd met behulp van twee Stern-Gerlach magneten op positie A en B.



Figuur 30: Schematische weergave van Bohms experiment dat een meting van spincorrelaties van twee spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes betreft. Bohm beschouwde de reactie $\pi^0 \rightarrow e^+ + e^-$. In de praktijk is het experiment met spin-gecorrleerde neutronen uitgevoerd.

De oriëntatie van de magneten kan veranderd worden, zodat de spincomponent in een willekeurige richting kan worden bepaald. Stel dat beide magneten zo worden georiënteerd dat de spincomponenten worden gemeten in de richting gedefinieerd door de eenheidsvector $\hat{n}$. Voor de spin singlet toestand zullen de spins van de twee neutronen altijd tegenovergesteld gecorreleerd zijn. Daarom zal een meting van de spin component in de $\hat{n}$ -richting van het neutron op positie A, met als resultaat $+\frac{1}{2}\hbar$, altijd leiden tot het resultaat $-\frac{1}{2}\hbar$ in een vergelijkbare meting aan het andere neutron op positie B. Ter vereenvoudiging noemen we dit de $+$ en $-$ spintoestanden in de richting $\hat{n}$. Deze conclusie geldt voor elke richting $\hat{n}$: als een meting bij A de waarde $+$ geeft, dan vinden we bij B de waarde $-$, en omgekeerd. Als we de spincomponent in de richting van $\hat{n}$ van het neutron bij A gemeten hebben, dan *weten* we de spincomponent in dezelfde richting van het andere neutron bij B. Die is dan volledig bepaald vanwege de correlatie door de spin singlet toestand. Heeft deze bepaaldheid enkel plaats gevonden als resultaat van een meting op positie A? Als dat zo is, hoe is het resultaat van deze meting gecommuniceerd naar het neutron op positie B? Als de metingen op positie A en B simultaan worden gedaan, dan dient deze communicatie instantaan plaats te vinden. Vergelijkbare conclusies kunnen worden getrokken als de magneten op A en B langs andere richtingen worden georiënteerd.

3.6.2 De ongelijkheid van Bell

Realistisch lokale theorieën gaan er van uit dat de wereld bestaat uit systemen (deeltjes en velden) die objectieve eigenschappen bezitten die bestaan onafhankelijk van elk experiment uitgevoerd door waarnemers. Een verdere eigenschap is dat het resultaat van een meting van een eigenschap op een punt B kan niet afhangen van een gebeurtenis op punt A, voldoende verwijderd van punt B, zodat informatie over de gebeurtenis, die zich voortplant met de lichtsnelheid, punt B niet kan bereiken voor dat de meting plaatsvindt. Dit laatste wordt einstein-lokaliteit genoemd.

Bell heeft in 1964 laten zien dat elke lokaal realistische theorie voldoet aan een criterium, de zogenaamde Bell-ongelijkheid. Experimenten tonen aan dat quantummechanica niet aan dit

criterium voldoet en dat de gevonden afwijkingen van de Bell-ongelijkheid in volledige overeenstemming zijn met de voorspellingen van de quantummechanica. Er zijn diverse formuleringen van de Bell ongelijkheid, maar wij volgen hier de afleiding van Wigner (1970) die betrekking heeft op het experiment van Bohm.

We nemen aan dat in het spincorrelatie experiment van Bohm de Stern-Gerlach magneten op A en B zodanig kunnen worden georiënteerd, dat de spincomponenten in drie richtingen, gespecificeerd door de eenheidsvectoren $\hat{\mathbf{n}}_1$, $\hat{\mathbf{n}}_2$ en $\hat{\mathbf{n}}_3$, gemeten kunnen worden. In een realistische theorie heeft elk individueel neutron bepaalde waarden (+ of -) voor de spincomponenten in de drie richtingen $\hat{\mathbf{n}}_1$, $\hat{\mathbf{n}}_2$ en $\hat{\mathbf{n}}_3$. We nemen niet aan dat we al deze componenten van een neutron tegelijkertijd kunnen meten, maar enkel dat als we één ervan meten door de Stern-Gerlach magneet op de juiste oriëntatie te zetten, de uitkomst van deze meting exact voorspelbaar is. Een neutron kan bijvoorbeeld worden voorgesteld door $(+, -, +)$, hetgeen betekent dat voor dit neutron in een meting van de spincomponent in de $\hat{\mathbf{n}}_1$ richting met zekerheid + zal worden gevonden, in de $\hat{\mathbf{n}}_2$ richting met zekerheid - en in de $\hat{\mathbf{n}}_3$ richting met zekerheid +. De neutronparen kunnen dus in groepen worden opgedeeld, die worden gespecificeerd door $(\sigma_1\sigma_2\sigma_3; \tau_1\tau_2\tau_3)$, waarbij σ_i en τ_i (die enkel de waarden + en - kunnen aannemen) de spincomponenten in de richting $\hat{\mathbf{n}}_i$ voorstellen van de neutronen die respectievelijk door de magneten op positie A en B gaan. Stel dat $f(\sigma_1\sigma_2\sigma_3; \tau_1\tau_2\tau_3)$ de fractie van neutronparen is, geproduceerd in de bron S, die behoort bij de groep $(\sigma_1\sigma_2\sigma_3; \tau_1\tau_2\tau_3)$. De waarden van deze fracties f hangt van het proces af waarin de neutronparen gemaakt worden. In het experiment van Bohm worden de neutronparen in een singlet-spintoestand gemaakt en dienen dus tegenovergestelde waarden te hebben voor spins langs dezelfde richting. Als bijvoorbeeld $\sigma_3 = +$, dan geldt dat $\tau_3 = -$, maar ook dat $f(+++; ---) = 0$. Er geldt

$$f(\sigma_1\sigma_2\sigma_3; \tau_1\tau_2\tau_3) = 0, \quad \text{behalve } \sigma_i = -\tau_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (331)$$

Merk op dat deze beschrijving voldoet aan de lokaliteitseis: het resultaat van een meting op positie A hangt enkel van de waarden σ_1 , σ_2 en σ_3 af en van de orientatie van de magneet op positie A, maar is onafhankelijk van de orientatie van de magneet op positie B. Op dezelfde wijze is een meting van de spin op positie B onafhankelijk van de instelling van de magneet op positie A.

We kunnen nu eenvoudig de $(++)$ spincorrelaties verkrijgen. Dat zijn de waarschijnlijkheden $\langle \hat{\mathbf{n}}_i+; \hat{\mathbf{n}}_j+ \rangle$ dat, voor een neutronpaar, metingen van de spincomponenten bij A langs $\hat{\mathbf{n}}_i$ en bij B langs $\hat{\mathbf{n}}_j$ beide als resultaat + geven. We hebben

$$\langle \hat{\mathbf{n}}_1+; \hat{\mathbf{n}}_2+ \rangle = \sum_{\sigma_2\sigma_3} \sum_{\tau_1\tau_3} f(+\sigma_2\sigma_3; \tau_1 + \tau_3). \quad (332)$$

Met behulp van vergelijking (331) vinden we dat de enige termen die niet-nul zijn in de sommatie corresponderen met $\sigma_2 = -$, $\tau_1 = -$ en $\sigma_3 = -\tau_3 = \pm$. Bovenstaande vergelijking kan hiermee geschreven worden als

$$\langle \hat{\mathbf{n}}_1+; \hat{\mathbf{n}}_2+ \rangle = f(+ - +; - + -) + f(+ - -; - + +). \quad (333)$$

Op dezelfde manier vinden we

$$\langle \hat{\mathbf{n}}_3+; \hat{\mathbf{n}}_2+ \rangle = f(+ - +; - + -) + f(- - +; + + -) \quad (334)$$

en

$$\langle \hat{\mathbf{n}}_1+; \hat{\mathbf{n}}_3+ \rangle = f(+ + -; - - +) + f(+ - -; - + +). \quad (335)$$

De twee termen aan de rechterkant van vergelijking (333) komen voor in vergelijkingen (334) en (335). Omdat de fracties $f(\sigma_1\sigma_2\sigma_3; \tau_1\tau_2\tau_3)$ niet-negatief zijn, volgt hieruit dat

$$\langle \hat{\mathbf{n}}_1+; \hat{\mathbf{n}}_2+ \rangle \leq \langle \hat{\mathbf{n}}_3+; \hat{\mathbf{n}}_2+ \rangle + \langle \hat{\mathbf{n}}_1+; \hat{\mathbf{n}}_3+ \rangle. \quad (336)$$

Het bovenstaande wordt de ongelijkheid van Bell genoemd.

We kunnen ook de quantummechanische waarden van de correlaties $\langle \hat{\mathbf{n}}_i+; \hat{\mathbf{n}}_j+ \rangle$ uitrekenen. In een singlet-spintoestand is de waarschijnlijkheid $\frac{1}{2}$ dat een meting van de spincomponent in de richting $\hat{\mathbf{n}}_i$ als resultaat $+$ geeft. Als dat resultaat verkregen wordt, dan zal een meting van de spincomponent $\hat{\mathbf{n}}_i$ van het corresponderende neutron op positie B als resultaat $-$ geven. In vergelijking (286) hebben we de waarschijnlijkheid afgeleid dat, voor een neutron in de $+$ toestand in de $\hat{\mathbf{z}}$ -richting, een meting van de spincomponent in de $\hat{\mathbf{n}}$ -richting als resultaat $+$ geeft. We nemen nu $\hat{\mathbf{z}} = -\hat{\mathbf{n}}_i$ en $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}_j$ en schrijven vergelijking (286) als

$$P(-\hat{\mathbf{n}}_i, \hat{\mathbf{n}}_j+) = \cos^2 \frac{\theta}{2} = \sin^2 \frac{\theta_{ij}}{2}, \quad (337)$$

waarbij θ de hoek is tussen $-\hat{\mathbf{n}}_i$ en $\hat{\mathbf{n}}_j$, en $\theta_{ij} = \pi - \theta$ de hoek tussen $\hat{\mathbf{n}}_i$ en $\hat{\mathbf{n}}_j$. Er geldt

$$\langle \hat{\mathbf{n}}_i+; \hat{\mathbf{n}}_j+ \rangle = \frac{1}{2} P(-\hat{\mathbf{n}}_i, \hat{\mathbf{n}}_j+) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{ij}}{2}. \quad (338)$$

Als de voorspellingen van de quantummechanica in overeenstemming moeten zijn met die van realistisch lokale theorieën, dan moeten de waarschijnlijkheden (338) voldoen aan de ongelijkheid van Bell (336). Er geldt

$$\sin^2 \frac{\theta_{12}}{2} \leq \sin^2 \frac{\theta_{23}}{2} + \sin^2 \frac{\theta_{13}}{2}. \quad (339)$$

Men kan eenvoudig laten zien dat er geometrieën zijn waarvoor bovenstaande ongelijkheid geschonden is. Stel bijvoorbeeld dat de eenheidsvectoren $\hat{\mathbf{n}}_1$, $\hat{\mathbf{n}}_2$ en $\hat{\mathbf{n}}_3$ coplanair zijn en dat $\hat{\mathbf{n}}_3$ de deelhoek is van $\hat{\mathbf{n}}_1$ en $\hat{\mathbf{n}}_2$,

$$\theta_{13} = \theta_{23} = \frac{1}{2} \theta_{12}. \quad (340)$$

We vinden dan voor de ongelijkheid

$$\sin^2 \theta_{13} \leq 2 \sin^2 \frac{\theta_{13}}{2}, \quad (341)$$

hetgeen vereenvoudigt tot

$$\cos^2 \frac{\theta_{13}}{2} \leq \frac{1}{2}. \quad (342)$$

We weten echter dat $\cos \frac{\theta_{13}}{2}$ groter is dan $1/\sqrt{2}$ voor de hoeken $0 < \frac{\theta_{13}}{2} < \frac{\pi}{4}$ en voor deze hoeken wordt de ongelijkheid van Bell geschonden en zijn de voorspellingen van de quantummechanica gegeven door vergelijking 286, niet in overeenstemming met die van lokaal realistische theorieën. De orthodoxe school beschouwt quantummechanica als een niet-lokale theorie.

3.7 Uitgewerkte opgaven

3.7.1 Toepassing van een machtreeks

Wat is de maximum snelheid dat een deeltje kan hebben, zodat zijn kinetische energie geschreven kan worden als $\frac{1}{2}mv^2$ met een fout die niet groter is dan 0.5%?

Oplossing: In de klassieke mechanica is de relatie tussen kinetische energie en impuls gelijk aan

$$T_{\text{klassiek}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}. \quad (343)$$

De relativistisch correcte relatie tussen totale energie en impuls is

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4, \quad (344)$$

waarbij E behalve kinetische energie, de rustenergie mc^2 bevat. Voor de kinetische energie vinden we in dit geval

$$T = E - mc^2 = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^2}} - mc^2 = mc^2 \left[\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^2}} - 1 \right]. \quad (345)$$

Wiskundig Intermezzo: Stel dat $f(x)$ geschreven kan worden als een machtreeks,

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k. \quad (346)$$

We kunnen de coëfficiënten vinden door afgeleiden te nemen en vervolgens de waarde ervan te bepalen voor $x = 0$. Dus

$$\begin{aligned} f(x) &= a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots & f^{(0)}(0) &= a_0 \\ f^{(1)}(x) &= a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + \dots & f^{(1)}(0) &= a_1 \\ f^{(2)}(x) &= 2a_2 + 2 \cdot 3a_3x + \dots & f^{(2)}(0) &= 2a_2 \\ f^{(3)}(x) &= 2 \cdot 3a_3 + \dots & f^{(3)}(0) &= 2 \cdot 3a_3 \\ \dots & & \dots & \end{aligned} \quad (347)$$

Hiermee zien we dat voor de coëfficiënten van de machtreeks geldt

$$a_k = \frac{f^{(k)}(0)}{k!}. \quad (348)$$

We kunnen de machtreeks dan ook schrijven als

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} x^k. \quad (349)$$

Indien x niet al te groot is, kunnen we $\sqrt{1+x}$ (zie vergelijking (345)) in een reeks ontwikkelen en vinden

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \dots. \quad (350)$$

Het is illustratief om te zien wat er gebeurt als we enkel de eerste twee termen invullen in vergelijking (345).

$$T = mc^2 \left[\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^2}} - 1 \right] \approx mc^2 \left[1 + \frac{p^2}{2m^2c^2} - 1 \right] = \frac{p^2}{2m}. \quad (351)$$

We zien dat de eerste twee termen overeenkomen met de niet-relativistische uitdrukking, gegeven in vergelijking (343). De termen met $k \geq 2$ vormen een relativistische correctie. De derde term geeft een correctie ter grootte

$$\Delta T = mc^2 \cdot \frac{1}{8} \left(\frac{p^2}{m^2 c^2} \right)^2 = \frac{p^4}{8m^3 c^2}. \quad (352)$$

De relatieve correctie bedraagt

$$\frac{\Delta T}{T} \approx \frac{p^4}{8m^3 c^2} / \frac{p^2}{2m} = \frac{p^2}{4m^2 c^2}. \quad (353)$$

De relativistische uitdrukking voor de impuls is gelijk aan

$$\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v} \quad \text{met} \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (354)$$

Indien de afwijking minder dan 0.5 % moet zijn, dient te gelden

$$\frac{p^2}{4m^2 c^2} \leq 0.005 \Rightarrow \frac{m^2 v^2}{1 - \frac{v^2}{c^2}} = 0.005 \cdot 4m^2 c^2 \Rightarrow \frac{1}{\frac{c^2}{v^2} - 1} = 0.02. \quad (355)$$

Uitschrijven levert de conditie $v \leq \frac{1}{10} \sqrt{2} c \approx 0.14c$, met c de lichtsnelheid.

3.7.2 Impuls van een foton

Bereken de impuls van een 12.0 MeV foton.

Oplossing: Tussen energie en impuls geldt de relatie

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (356)$$

Deze relatie is relativistisch correct, waarbij E de rustenergie mc^2 bevat. Fotonen zijn massaloos, $m = 0$, en er geldt dus $E = pc$. We vinden hiermee

$$p = 12.0 \frac{\text{MeV}}{c} = \frac{(12.0 \times 10^6 \text{ eV}) \cdot (1.6 \times 10^{-19} \text{ C})}{3 \times 10^8 \text{ m/s}} = 6.4 \times 10^{-21} \text{ kg m/s}. \quad (357)$$

3.7.3 Bremsstrahlung

Bereken de frequentie van een foton dat geproduceerd wordt als een elektron met 20 keV tot stilstand wordt gebracht in een botsing met een zware kern.

Oplossing: In dit geval wordt de volledige kinetische energie van het elektron omgezet in foton energie, $E_{\text{foton}} = h\nu = T_{\text{elektron}}$. Gegeven is dat $T_{\text{elektron}} = 20 \text{ keV} = (20 \times 10^3 \text{ eV}) \cdot (1.6 \times 10^{-19} \text{ C}) = 3.2 \times 10^{-15} \text{ J}$. We vinden voor de frequentie van het foton

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{3.2 \times 10^{-15} \text{ J}}{6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}} = 4.8 \times 10^{18} \text{ Hz}. \quad (358)$$

Merk op dat de bijbehorende golflengte gelijk is aan

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{4.8 \times 10^{18} \text{ Hz}} = 0.062 \text{ nm}. \quad (359)$$

Dit proces heet in de natuurkunde Bremstrahlung en wordt bijvoorbeeld gebruikt voor het opwekken van Röntgenstraling in ziekenhuizen. Meer informatie is te vinden op de volgende website, <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/xrayc.html>.

3.7.4 Separatie van een molecuul

Bepaal de maximum golflengte van een foton dat een molecuul kan separeren waarvan de bindingsenergie 15 eV is.

Oplossing: Moleculen zijn opgebouwd uit atomen. Als we extern voldoende energie toevoegen, meer dan de bindingsenergie van het molecuul, dan kunnen we moleculen weer opbreken. Deze energie kan bijvoorbeeld worden overgebracht met fotonen. In het voorbeeld geldt $E_{\text{foton}} \geq E_{\text{binding}} = 15 \text{ eV} = h\nu$. Hiermee vinden we voor de frequentie

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{(15 \text{ eV}) \cdot (1.6 \times 10^{-19} \text{ C})}{6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}} = 3.6 \times 10^{15} \text{ Hz.} \quad (360)$$

De bijbehorende golflengte gelijk is aan

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{3.6 \times 10^{15} \text{ Hz}} = 8.3 \times 10^{-8} \text{ m.} \quad (361)$$

3.7.5 Elektromagnetisch vermogen

Een radiostation werkt bij een frequentie van 103.7 MHz met een vermogen van 200 kW. Bepaal het aantal fotonen dat door dit station wordt uitgezonden.

Oplossing: De frequentie bedraagt $\nu = 1.037 \times 10^8 \text{ Hz}$. De energie van een dergelijk foton is $E = h\nu = (6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}) \cdot (1.037 \times 10^8 \text{ Hz}) = 6.9 \times 10^{-26} \text{ J}$. Het vermogen bedraagt $P = 2.0 \times 10^5 \text{ J/s}$. Door dit station wordt per seconde

$$\dot{N} = \frac{P}{E} = \frac{2.0 \times 10^5 \text{ J/s}}{6.9 \times 10^{-26} \text{ J}} = 2.9 \times 10^{30} \text{ s}^{-1} \quad (362)$$

fotonen uitgezonden.

3.7.6 Fotoelektrisch effect

Beschouw een kalium oppervlak dat 75 cm verwijderd is van een 100 W lamp. Neem aan dat de energie die door de lamp als licht wordt uitgezonden 5 % van het vermogen is. Behandel elk kaliumatoom als een cirkelvormige schijf met een diameter van 1 Å en bepaal de tijd die nodig voor elk atoom om een hoeveelheid licht te absorberen die gelijk is aan zijn werkfunctie van 2.0 eV, in overeenstemming met de golfinterpretatie van licht.

Oplossing: Elk kaliumatoom heeft een effectief oppervlak van $A_{\text{atoom}} = \frac{\pi}{4}d^2 = (\frac{\pi}{4}) \cdot (10^{-10} \text{ m}^2) = 7.85 \times 10^{-21} \text{ m}^2$. De lamp zendt per seconde een lichtenergie uit van $P = \epsilon P_{\text{lamp}} = 0.05 \cdot 100 \text{ W} = 5 \text{ J/s} = (5 \text{ J/s}) / (1.6 \times 10^{-19} \text{ C}) = 3.1 \times 10^{19} \text{ eV/s}$. Dit licht wordt in alle richtingen uitgezonden en slechts een fractie ervan bereikt het kaliumatoom,

$$P_{\text{kaliumatoom}} = P \frac{A_{\text{atoom}}}{A_{\text{bol met straal 0.75 m}}} = \frac{(3.1 \times 10^{19} \text{ eV/s})(7.85 \times 10^{-21} \text{ m}^2)}{4\pi(0.75 \text{ m})^2} = 0.034 \text{ eV/s.} \quad (363)$$

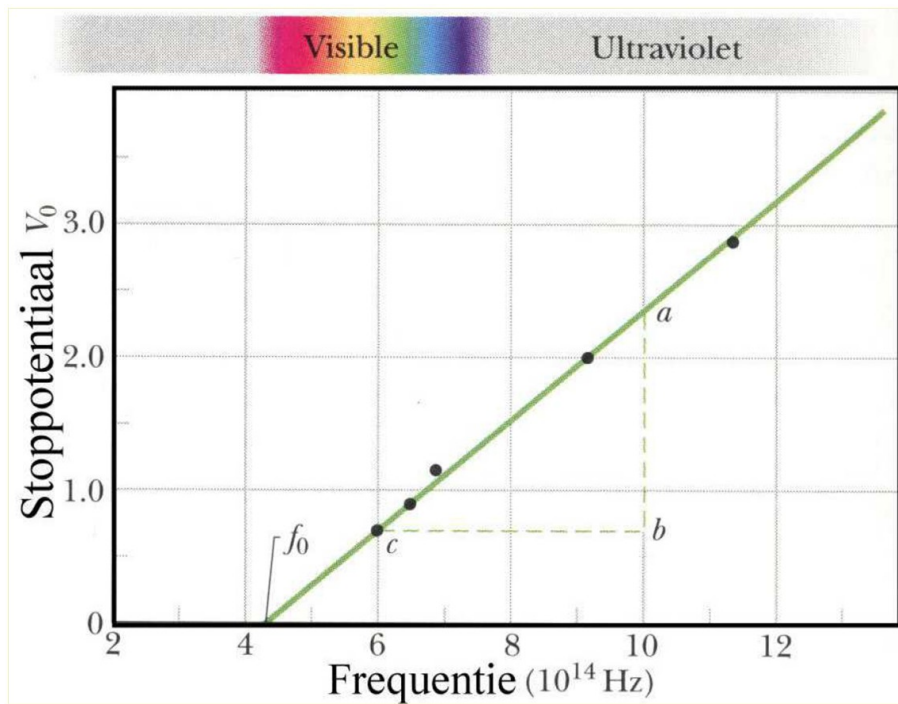
Bij een werkfunctie van 2.0 eV duurt het dus gemiddeld $t = \frac{2.0 \text{ eV}}{0.034 \text{ eV/s}} = 58 \text{ s}$ voordat voldoende licht geabsorbeerd is om een elektron uit te zenden, INDIEN WE DE KLASSIEKE FYSICA HANTEREN. Een dergelijke vertraging is nooit waargenomen!

3.7.7 Constante van Planck uit fotoelektrisch effect

Als een fotoelektrisch experiment wordt uitgevoerd met calcium als emitter, dan worden de volgende stoppotentialen gevonden: 1.95 V bij een golflengte van 2535 Å, 0.98 V bij 3122 Å, 0.50 V bij 3650 Å en 0.14 V bij 4047 Å. Bereken uit deze data de constante van Planck.

Oplossing: Voor het fotoelektrisch effect geldt de relatie $h\nu = \phi + K_{\max}$, waarbij $K_{\max}$ de maximum mogelijke energie van de vrijgemaakte elektronen is. Verder is ν de frequentie van het invallende licht en ϕ de werkfunctie. Deze laatste is materiaal afhankelijk en stelt de energie voor die nodig is om het elektron uit het materiaal vrij te maken. Door een stoppotentiala V_0 aan te brengen, kunnen we $eV_0 = K_{\max}$ bepalen.

Als eerste verzamelen we nu de meetgegevens in een grafiek, gegeven in Fig. 31. De grafiek geeft



Figuur 31: Fotoelektrisch effect: de stoppotentiala is uitgezet als functie van de frequentie van het invallende licht.

een weergave van de relatie

$$eV_0 = h\nu - \phi = h\frac{c}{\lambda} - \phi. \quad (364)$$

Vergelijken met het lineair verband $y = ax + b$ leert dat we de constante van Planck kunnen bepalen uit de helling van de data. Deze helling kan bijvoorbeeld gevonden worden met de kleinste-kwadraten methode en het resultaat is weergegeven door de lijn in Fig. 31. We bepalen de helling en vinden $a = 4.11 \times 10^{-15}$ eV/Hz. We dienen dit te vermenigvuldigen met de lading van het elektron, $q = e = 1.6 \times 10^{-19}$ C en vinden 6.57×10^{-34} Js, hetgeen in redelijke overeenstemming is met de standaardwaarde $h = 6.626 \times 10^{-34}$ Js.

3.7.8 Fotoelektrische stoppotentiala

De emitter van een foto-elektrische buis heeft een drempelgolflengte van 6000 Å. Bepaal de golflengte van het invallende licht als de stoppotentiala voor dit licht 2.5 V is.

Oplossing: De drempelgolflengte correspondeert met die golflengte van straling waarbij er elektronen worden vrijgemaakt. De energie van die straling correspondeert dan met de werkfunctie. De frequentie volgt uit $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{6000 \times 10^{-10} \text{ m}} = 5.0 \times 10^{14} \text{ Hz}$. De werkfunctie van het materiaal is dan $\phi = h\nu = (6.626 \times 10^{-34} \text{ Js})(5.0 \times 10^{14} \text{ Hz}) = 3.31 \times 10^{-19} \text{ J}$. Met $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ vinden we dan $\phi = 3.31 \times 10^{-19} \text{ J} / 1.6 \times 10^{-19} = 2.07 \text{ eV}$. Vervolgens valt er licht op de fotobuis, waarbij er een stoppotential van $V_0 = 2.5 \text{ V}$ nodig is. De frequentie van die straling is dan

$$h\nu = \phi + eV_0 \rightarrow \nu = \frac{\phi + eV_0}{h} = \frac{(2.07 + 2.5) \cdot (1.6 \times 10^{-19} \text{ C})}{6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}} = 1.1 \times 10^{15} \text{ Hz}. \quad (365)$$

De bijbehorende golflengte is $\lambda = c/\nu = 3 \times 10^8 \text{ m/s} / 1.1 \times 10^{15} \text{ Hz} = 272 \text{ nm}$.

3.7.9 Fotoelektrisch effect: maximum kinetische elektronenergie

Kalium wordt beschenen met ultraviolet licht met een golflengte van $2500 \text{ \AA}$. Als de werkfunctie van kalium 2.21 eV is, wat is dan de maximum kinetische energie van de uitgezonden elektronen?

Oplossing: Er geldt $h\nu = \phi + eV_0$, waarbij $\phi = 2.21 \text{ eV}$ is. De frequentie volgt uit $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8 \text{ m/s}}{2500 \times 10^{-10} \text{ m}} = 1.2 \times 10^{15} \text{ Hz}$. Voor de maximum kinetische energie vinden we dan

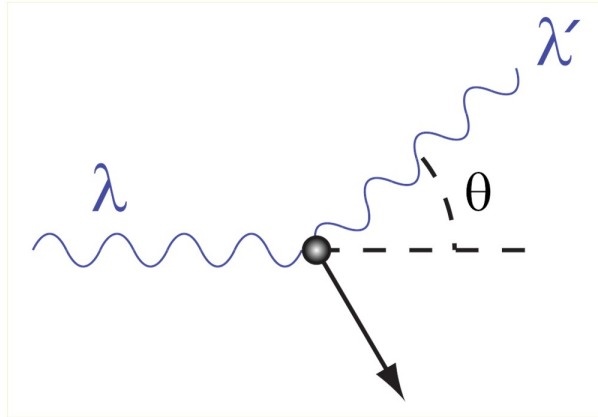
$$eV_0 = h\nu - \phi = (6.626 \times 10^{-34} \text{ Js})(1.2 \times 10^{15} \text{ Hz}) - (1.6 \times 10^{-19} \text{ C})(2.21 \text{ eV}) = 4.41 \times 10^{-19} \text{ J}. \quad (366)$$

Dit is gelijk aan $4.4 \times 10^{-19} \text{ J} / 1.6 \times 10^{-19} \text{ C} = 2.75 \text{ eV}$.

3.7.10 Het Comptoneffect

Leidt de Comptonvergelijking $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c}(1 - \cos \theta)$ af.

Oplossing: We kunnen de uitdrukking voor $\Delta\lambda$ afleiden door energie- en impulsbehoud te combineren. We beschouwen comptonverstrooiing als een elastische botsing; zie Fig. 32. Voor



Figuur 32: Comptonverstrooiing van een foton aan een elektron kan worden beschouwd als een elastische botsing.

energiebehoud geldt

$$h\nu = h\nu' + T_e, \quad (367)$$

waarbij T_e de kinetische energie van het over een hoek θ teruggestoten elektron voorstelt. Behoud van impuls geeft

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \phi + p \cos \theta \quad x \text{ component} \quad (368)$$

en

$$\frac{h\nu'}{c} \sin \phi = p \sin \theta \quad y \text{ component} \quad (369)$$

met p de impuls van het verstrooide elektron. Vervolgens kwadrateren we beide vergelijkingen.

$$\left(\frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c} \cos \phi\right)^2 = p^2 \cos^2 \theta \quad \text{en} \quad \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 \sin^2 \phi = p^2 \sin^2 \theta. \quad (370)$$

We tellen nu beide vergelijkingen op en vinden

$$\left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - \left(\frac{2h\nu h\nu'}{c^2}\right) \cos \phi + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 \cos^2 \phi = p^2 \cos^2 \theta \quad (371)$$

en

$$\left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 \sin^2 \phi = p^2 \sin^2 \theta. \quad (372)$$

Omdat $\sin^2 \phi + \cos^2 \phi = 1 = \sin^2 \theta + \cos^2 \theta$ vinden we

$$\left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 - \left(\frac{2h\nu h\nu'}{c^2}\right) \cos \phi + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 = p^2. \quad (373)$$

Voor het elektron hebben we $E^2 = p^2 c^2 + (mc^2)^2$ en als T_e de kinetische energie is, dan geldt

$$(T_e + mc^2)^2 = c^2 p^2 + (mc^2)^2 \rightarrow T_e^2 + 2T_e mc^2 = c^2 p^2 \quad (374)$$

of

$$\frac{T_e^2}{c^2} + 2T_e m = p^2. \quad (375)$$

Voor T_e gebruiken we vergelijking (367) en voor p^2 vergelijking (373) en vinden

$$\left(\frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c}\right)^2 + 2mc \left(\frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c}\right) = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\left(\frac{h\nu}{c}\right) \left(\frac{h\nu'}{c}\right) \cos \phi \quad (376)$$

en

$$mc \left(\frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c}\right) = \frac{h\nu}{c} \frac{h\nu'}{c} (1 - \cos \phi) \quad (377)$$

en dus

$$\frac{1}{h\nu'/c} - \frac{1}{h\nu/c} = \frac{1}{mc} (1 - \cos \phi) \quad (378)$$

Er geldt $\nu = \frac{c}{\lambda}$ en $\frac{c}{h\nu} = \frac{c\lambda}{hc} = \frac{\lambda}{h}$. We vermenigvuldigen met h en vinden

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \phi), \quad (379)$$

waarbij $\frac{h}{mc} = 0.0243 \times 10^{-10}$ m de zogenaamde comptongolflengte is.

3.7.11 Comptonverstrooiing

Een Röntgenstraal met een golflengte van $0.300 \text{ \AA}$ ondergaat een Comptonverstrooiing over 60° . Vind de golflengte van het verstrooide foton en de energie van het elektron dat na de verstrooiing wordt uitgezonden.

Oplossing: De golflengte van het verstrooide foton volgt uit

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \phi), \quad (380)$$

waarbij $\lambda = 0.3 \times 10^{-10} \text{ m}$ en $\frac{h}{mc} = 0.0243 \times 10^{-10} \text{ m}$. Omdat $\phi = 60^\circ$ geldt $(1 - \cos 60^\circ) = 0.5$ en vinden we

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{mc}(1 - \cos \phi) = 0.3 \times 10^{-10} \text{ m} + 0.0243 \times 10^{-10} \text{ m} \cdot 0.5 = 0.312 \times 10^{-10} \text{ m}. \quad (381)$$

De kinetische energie van het elektron, T_e , volgt uit de wet van behoud van energie, $h\nu = h\nu' + T_e \rightarrow T_e = h(\nu - \nu')$. We vinden

$$T_e = h(\nu - \nu') = hc \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right). \quad (382)$$

Invullen levert

$$T_e = (6.626 \times 10^{-34} \text{ Js})(3 \times 10^8 \text{ m/s}) \left(\frac{1}{0.3 \times 10^{-10} \text{ m}} - \frac{1}{0.312 \times 10^{-10} \text{ m}} \right) = 2.6 \times 10^{-16} \text{ J}. \quad (383)$$

Dit komt overeen met $T_e = 1.6 \text{ keV}$.

3.7.12 Golfengte van een thermisch neutron

Bereken de de Broglie-golfengte van een thermisch neutron met een energie van 0,05 eV.

Oplossing: De kinetische energie van een zogenaamd thermisch neutron wordt gegeven door $\frac{3}{2}kT$, met k de constante van Boltzmann en T de temperatuur. We zien dat een energie van 0,05 eV overeen komt met een temperatuur van

$$\begin{aligned} T &= \frac{2E}{3k} \\ &= \frac{2 \cdot (0,05 \text{ eV})}{3k} \\ &= \frac{2 \cdot (0,05 \text{ eV}) \cdot (1,6 \times 10^{-19} \text{ C})}{2 \cdot (1,38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1})} \\ &= 387 \text{ K}. \end{aligned} \quad (384)$$

We berekenen allereerst de energie van dit neutron. Er geldt

$$\frac{p^2}{2m_n} = E_n = 0,05 \text{ eV} = (0,05 \text{ eV}) \cdot (1,6 \times 10^{-19} \text{ C}) = 8,0 \times 10^{-21} \text{ J}. \quad (385)$$

Er geldt voor de impuls

$$p = \sqrt{2m_n E_n} = \sqrt{2 \cdot (1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}) \cdot (8,0 \times 10^{-21} \text{ J})} = 5,2 \times 10^{-24} \text{ kg m/s}. \quad (386)$$

Voor de de Broglie golfengte vinden we

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,6 \times 10^{-34} \text{ Js}}{5,2 \times 10^{-24} \text{ kg m/s}} = 1,28 \times 10^{-10} \text{ m}. \quad (387)$$

3.7.13 Energie en golflengte van een proton

Bereken de energie van een proton met een golflengte van 0,5 fm (1 fm = 10^{-15} m = 10^{-5} Å = 1 fermi).

Oplossing: De impuls van het proton wordt gegeven door

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6,6 \times 10^{-34} \text{ Js}}{0,5 \times 10^{-15} \text{ m}} = 1,32 \times 10^{-18} \text{ kg m/s.} \quad (388)$$

De totale energie (inclusief rustenergie) volgt uit

$$E^2 = p^2 c^2 + m_p^2 c^4 \rightarrow E = \sqrt{p^2 c^2 + m_p^2 c^4} \quad (389)$$

en dus

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{(1,32 \times 10^{-18} \text{ kg m/s})^2 \cdot (3 \times 10^8 \text{ m/s})^2 + (1,67 \times 10^{-27} \text{ kg})^2 \cdot (3 \times 10^8 \text{ m/s})^4} \\ &= 4,23 \times 10^{-10} \text{ J.} \end{aligned} \quad (390)$$

De totale energie is dus $E = ((4,23 \times 10^{-10} \text{ J}) \cdot 10^{-6}) / (1,6 \times 10^{-19} \text{ C}) = 2.642 \text{ MeV}$ en hiervan is $2.642 - 938 = 1.704 \text{ MeV}$ de kinetische energie (938 MeV correspondeert met de rustenergie van het proton - $E_{\text{rust}} = m_p c^2$).

3.7.14 Oplossend vermogen van een optische microscoop

Als je een object wilt observeren dat 2,5 Å groot is, wat is dan de minimum energie van het foton dat gebruikt kan worden?

Oplossing: Het oplossend vermogen volgt uit de onzekerheidsrelatie $\Delta x \Delta p \approx h$. Het verband tussen impuls en golfgetal is $p = \hbar k$ en dus geldt $\Delta p = \hbar \Delta k$.

We hebben nu $\Delta x = 2,5 \times 10^{-10} \text{ m}$. Teneinde dit object te kunnen observeren hebben we deeltjes met een minimum impuls nodig van

$$\Delta p = \frac{h}{\Delta x} = \frac{6,6 \times 10^{-34} \text{ Js}}{2,5 \times 10^{-10} \text{ m}} = 2,65 \times 10^{-24} \text{ kg m/s.} \quad (391)$$

De energie van het foton volgt uit

$$E = pc = (2,65 \times 10^{-24} \text{ kg m/s}) \cdot (3 \times 10^8 \text{ m/s}) = 7,9 \times 10^{-16} \text{ J.} \quad (392)$$

Dit komt overeen met

$$E = \frac{7,9 \times 10^{-16} \text{ J}}{1,6 \times 10^{-19} \text{ C}} = 4,96 \text{ keV.} \quad (393)$$

3.7.15 Oplossend vermogen van een elektronenmicroscoop

Bereken de vorige opgave nogmaals, maar nu voor elektronen in plaats van fotonen.

Oplossing: Voor elektronen geldt ook weer dat

$$\Delta p = \frac{h}{\Delta x} = 2,65 \times 10^{-24} \text{ kg m/s.} \quad (394)$$

De bijbehorende energie volgt uit

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{(2,65 \times 10^{-24} \text{ kg m/s})^2}{2 \cdot (9,1 \times 10^{-31} \text{ kg})} = 3,9 \times 10^{-18} \text{ J.} \quad (395)$$

Dit komt overeen met

$$E = \frac{3,9 \times 10^{-18} \text{ J}}{1,6 \times 10^{-19} \text{ C}} = 24 \text{ eV.} \quad (396)$$

3.7.16 Braggse diffractie met neutronen

Thermische neutronen vallen in op een NaCl (zout) kristal (interatomaire afstand 2,81 Å). De neutronen ondergaan eerste-orde diffractie aan de Braggvlakken onder een hoek van 20°. Wat is de energie van deze neutronen?

Oplossing: Voor Braggse diffractie geldt de relatie

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (397)$$

met d de roosterconstante van het kristal, θ de diffractiehoek en n de orde van diffractie. Voor eerste-orde diffractie geldt dat $n = 1$. Invullen levert voor de golflengte,

$$\lambda = 2d \sin \theta = 2 \cdot (2,81 \times 10^{-10} \text{ m}) \cdot \sin 20^\circ = 1,92 \times 10^{-10} \text{ m}. \quad (398)$$

De impuls van de neutronen is dan

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6,6 \times 10^{-34} \text{ Js}}{1,92 \times 10^{-10} \text{ m}} = 3,45 \times 10^{-24} \text{ kg m/s}. \quad (399)$$

De kinetische energie van deze neutronen bedraagt

$$E_n = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{(3,45 \times 10^{-24} \text{ kg m/s})^2}{2 \cdot (1,67 \times 10^{-27} \text{ kg})} = 3,55 \times 10^{-21} \text{ J}. \quad (400)$$

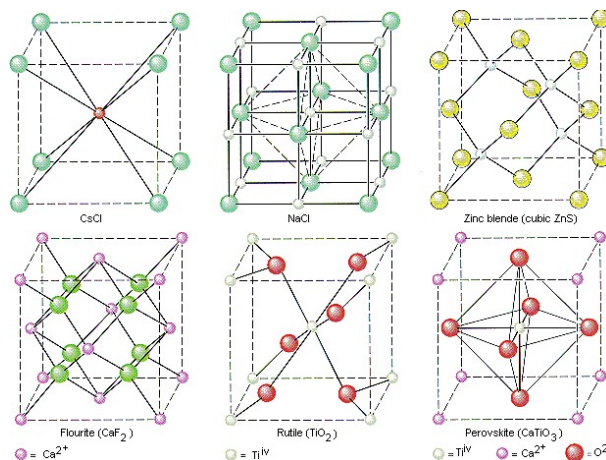
Dit komt overeen met

$$E = \frac{3,55 \times 10^{-21} \text{ J}}{1,6 \times 10^{-19} \text{ C}} = 0,022 \text{ eV}. \quad (401)$$

3.7.17 Kristalstructuur uit Braggse diffractie

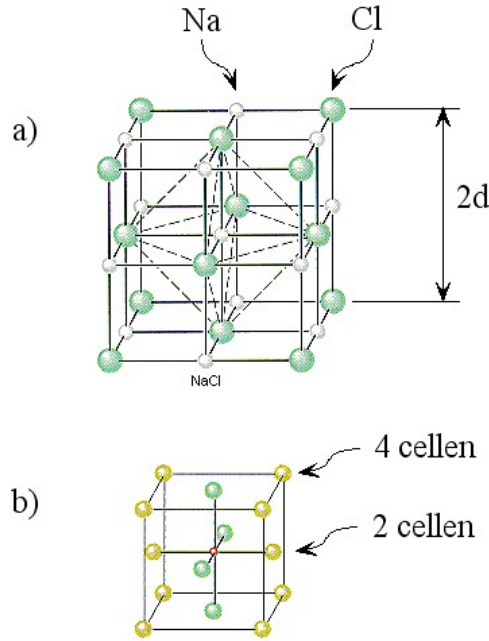
Bepaal de interatomaire afstand voor een NaCl kristal als de dichtheid van NaCl gelijk is aan $2,16 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ en de atoomgewichten voor natrium en chloor gelijk zijn aan 23,00 en 35,46, respectievelijk.

Oplossing: Om deze vraag te kunnen beantwoorden, dienen we het kristalrooster van NaCl te begrijpen. Zoals figuur 33 toont, zijn er diverse kristalroosters. Het rooster van NaCl is kubisch.



Figuur 33: Overzicht van diverse kristalroosters.

Het atoomgewicht van NaCl bedraagt



Figuur 34: Het rooster van NaCl. We zien dat de 8 moleculen die zich op de hoekpunten bevinden, onderdeel zijn van 8 cellen. Verder zijn de 6 moleculen in het midden van de zijvlakken, onderdeel van 6 cellen.

$$M_{\text{NaCl}} = 23,00 + 35,46 = 58,46. \quad (402)$$

Dit betekent dat 58,46 gram van het zout, $N_A = 6,022 \times 10^{23}$ NaCl moleculen bevat. Hierbij is N_A het getal van Avogadro.

Figuur 34 toont dat NaCl een kubisch kristalrooster heeft, waarbij de eenheidscel een ribbe heeft met lengte $2d$, waarbij d de gezochte roosterconstante is. Er bevinden zich 8 moleculen (in feite Cl-ionen) op de hoekpunten van de eenheidscel. Echter, elk van deze moleculen is onderdeel van 8 zulke kubussen. Deze moleculen tellen dus voor $(8 \times \frac{1}{8}) = 1$. Verder heeft de eenheidskubus nog 6 moleculen die zich in het centrum van de zijvlakken bevinden. Elk van deze moleculen wordt door 2 kubussen gedeeld. Deze moleculen tellen dus voor $(6 \times \frac{1}{2}) = 3$. We vinden hiermee dat de eenheidscel een dichtheid heeft van

$$\begin{aligned} \rho_{\text{kubus}} &= \frac{\text{massa van } (8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 1 + 3 =) 4 \text{ NaCl moleculen}}{\text{celvolume} = (2d)^3} \\ &= \frac{58,46 \times 4 \text{ amu}}{8d^3} \\ &= \frac{58,46 \cdot (1,66 \times 10^{-27} \text{ kg})}{2d^3} \\ &= \frac{9,7 \times 10^{-26} \text{ kg}}{2d^3}, \end{aligned} \quad (403)$$

met d de roosterconstante. De dichtheid van de kubus dient gelijk te zijn aan de dichtheid van NaCl en we vinden voor de roosterconstante

$$d = \sqrt[3]{\frac{9,7 \times 10^{-26} \text{ kg}}{2 \cdot (2,16 \times 10^3 \text{ kg/m}^3)}} = 2,82 \times 10^{-10} \text{ m}. \quad (404)$$

3.7.18 Vektoren over de reële ruimte (dus de elementen zijn reële getallen)

Gegeven zijn de vectoren $\mathbf{A} = 7\mathbf{i} - 2\mathbf{j} + 3\mathbf{k}$ en $\mathbf{B} = 2\mathbf{i} + 3\mathbf{j} - \mathbf{k}$. Bereken het inproduct $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$. Bereken ook de cosinus van de hoek tussen de richtingen van $\mathbf{A}$ en $\mathbf{B}$.

Oplossing: Het inproduct is gelijk aan

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = (2 \cdot 7) + (-2 \cdot +3) + (+3 \cdot -1) = 5. \quad (405)$$

De lengte van $\mathbf{A}$ is $|\mathbf{A}| = \sqrt{7^2 + (-2)^2 + 3^2} = \sqrt{62}$, terwijl de lengte van $\mathbf{B}$ gelijk is aan $|\mathbf{B}| = \sqrt{2^2 + 3^2 + (-1)^2} = \sqrt{14}$. Voor het inproduct geldt $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = |\mathbf{A}||\mathbf{B}| \cos \theta$. Hiermee geldt voor de cosinus van de hoek tussen de richtingen van $\mathbf{A}$ en $\mathbf{B}$,

$$\cos \angle \mathbf{A}; \mathbf{B} = \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}}{|\mathbf{A}||\mathbf{B}|} = \frac{5}{\sqrt{62}\sqrt{14}} = 0.170. \quad (406)$$

3.7.19 Lineaire afhankelijkheid van vectoren

Gegeven zijn de vectoren $\mathbf{A} = \mathbf{i} - \mathbf{j} + 2\mathbf{k}$, $\mathbf{B} = 2\mathbf{i} + 3\mathbf{j} - \mathbf{k}$ en $\mathbf{C} = 5\mathbf{i} + 5\mathbf{j}$. Bewijs dat $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ en $\mathbf{C}$ lineair afhankelijk zijn en daarom evenwijdig aan eenzelfde vlak.

Oplossing: Indien de vectoren $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ en $\mathbf{C}$ lineair afhankelijk zijn, dan kunnen we $\mathbf{A}$ uitdrukken in de basis opgespannen door de vectoren $\mathbf{B}$ en $\mathbf{C}$. Er geldt dan

$$\mathbf{A} = c_1\mathbf{B} + c_2\mathbf{C}, \quad (407)$$

met c_1 en c_2 coëfficiënten. Hiermee vinden we het stelsel vergelijkingen

$$\begin{aligned} A_1 &= c_1 B_1 + c_2 C_1 \\ A_2 &= c_1 B_2 + c_2 C_2 \\ A_3 &= c_1 B_3 + c_2 C_3. \end{aligned} \quad (408)$$

Invullen van de componenten levert

$$\begin{aligned} 1 &= 2c_1 + 5c_2 \\ -1 &= 3c_1 + 5c_2 \\ 2 &= -c_1. \end{aligned} \quad (409)$$

Dit heeft als oplossing $c_1 = -2$ en $c_2 = 1$, waarmee de afhankelijkheid bewezen is.

3.7.20 Relatie tussen inproduct en uitproduct

Bewijs dat voor elke vector $\mathbf{A}$ en $\mathbf{B}$ geldt dat $(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = 0$.

Oplossing: Neem aan dat het uitproduct $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ resulteert in de vector $\mathbf{C}$. We vinden dan

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = (\mathbf{A} + \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}. \quad (410)$$

Omdat $\mathbf{C}$ loodrecht staat op zowel $\mathbf{A}$ als $\mathbf{B}$ zijn beide inproducten gelijk aan nul.

3.7.21 Vectoren over de complexe ruimte (dus de elementen zijn complexe getallen)

De ongelijkheid van Schwarz luidt, $|\langle \alpha|\beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha|\alpha \rangle \langle \beta|\beta \rangle$. Bewijs deze ongelijkheid. Hint: neem aan dat $|\gamma \rangle = |\beta \rangle - (\langle \alpha|\beta \rangle / \langle \alpha|\alpha \rangle)|\alpha \rangle$, en gebruik $\langle \gamma|\gamma \rangle \geq 0$.

Oplossing: We definiëren de vector

$$|\gamma \rangle \equiv |\beta \rangle - \frac{\langle \alpha|\beta \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} |\alpha \rangle. \quad (411)$$

Vervolgens berekenen we het inproduct

$$\begin{aligned} \langle \gamma|\gamma \rangle &= \left(\langle \beta| - \frac{\langle \beta|\alpha \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} \langle \alpha| \right) \cdot \left(|\beta \rangle - \frac{\langle \alpha|\beta \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} |\alpha \rangle \right) \\ &= \langle \beta|\beta \rangle - \frac{\langle \alpha|\beta \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} \langle \beta|\alpha \rangle - \frac{\langle \beta|\alpha \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} \langle \alpha|\beta \rangle + \frac{\langle \beta|\alpha \rangle \langle \alpha|\beta \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle \langle \alpha|\alpha \rangle} \langle \alpha|\alpha \rangle \\ &= \langle \beta|\beta \rangle - \frac{\langle \alpha|\beta \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} \langle \beta|\alpha \rangle - \frac{\langle \beta|\alpha \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} \langle \alpha|\beta \rangle + \frac{\langle \beta|\alpha \rangle \langle \alpha|\beta \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} \\ &= \langle \beta|\beta \rangle - \frac{\langle \alpha|\beta \rangle}{\langle \alpha|\alpha \rangle} \langle \beta|\alpha \rangle. \end{aligned} \quad (412)$$

Omdat $\langle \gamma|\gamma \rangle \geq 0$ geldt

$$\langle \beta|\beta \rangle - \frac{|\langle \alpha|\beta \rangle|^2}{\langle \alpha|\alpha \rangle} \geq 0 \Rightarrow \langle \beta|\beta \rangle \langle \alpha|\alpha \rangle - |\langle \alpha|\beta \rangle|^2 \geq 0. \quad (413)$$

Hiermee is de Cauchy-Schwarz relatie bewezen,

$$|\langle \alpha|\beta \rangle|^2 \leq \|\alpha\|^2 \cdot \|\beta\|^2. \quad (414)$$

3.7.22 Hoek tussen complexe vectoren

Bereken de hoek tussen de vectoren $|\alpha \rangle = (1+i)\mathbf{i} + \mathbf{j} + i\mathbf{k}$ en $|\beta \rangle = (4-i)\mathbf{i} + (2-2i)\mathbf{k}$.

Oplossing: Er geldt

$$\begin{aligned} \langle \alpha|\alpha \rangle &= (1-i)(1+i) + 1^2 + i^2 = 4 \\ \langle \beta|\beta \rangle &= (4+i)(4-i) + (2+2i)(2-2i) = 25 \\ \langle \alpha|\beta \rangle &= (1-i)(4-i) + (-i)(2-2i) = 1-7i \\ \langle \alpha|\beta \rangle \langle \alpha|\beta \rangle^* &= (1-7i)(1+7i) = 50. \end{aligned} \quad (415)$$

De hoek volgt uit de relatie

$$\cos \theta \equiv \sqrt{\frac{\langle \alpha|\beta \rangle \langle \alpha|\beta \rangle^*}{\langle \alpha|\alpha \rangle \langle \beta|\beta \rangle}} = \sqrt{\frac{50}{4 \cdot 25}} = \frac{1}{2} \sqrt{2}. \quad (416)$$

3.7.23 Complexe matrices

Gegeven zijn de matrices

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & i \\ 2 & 0 & 3 \\ 2i & -2i & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{pmatrix},$$

en bereken

- a) $\mathbf{A} + \mathbf{B}$,
- b) $\mathbf{AB}$,
- c) $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$,
- d) $\mathbf{A}^T$,
- e) $\mathbf{A}^*$,
- f) $\mathbf{A}^\dagger$,
- g) $\det(\mathbf{B})$,
- h) $\mathbf{B}^{-1}$.

Oplossing: We vinden het volgende:

Ad a) De som $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ is

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \begin{pmatrix} -1+2 & 1+0 & i-i \\ 2+0 & 0+1 & 3+0 \\ 2i+i & -2i+3 & 2+2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 3 \\ 3i & (3-2i) & 4 \end{pmatrix}. \quad (417)$$

Ad b) Het product $\mathbf{AB}$ is

$$\begin{aligned} \mathbf{AB} &= \begin{pmatrix} (-1 \cdot 2 + 1 \cdot 0 + i \cdot i) & (-1 \cdot 0 + 1 \cdot 1 + i \cdot 3) & (-1 \cdot -i + 1 \cdot 0 + i \cdot 2) \\ (2 \cdot 2 + 0 \cdot 0 + 3 \cdot i) & (2 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + 3 \cdot 3) & (2 \cdot -i + 0 \cdot 0 + 3 \cdot 2) \\ (2i \cdot 2 - 2i \cdot 0 + 2 \cdot i) & (2i \cdot 0 - 2i \cdot 1 + 2 \cdot 3) & (2i \cdot -i - 2i \cdot 0 + 2 \cdot 2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -3 & (1+3i) & 3i \\ (4+3i) & 9 & (6-2i) \\ 6i & (6-2i) & 6 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (418)$$

Ad c) Om de commutator $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ te bepalen, berekenen we eerst het product $\mathbf{BA}$.

$$\begin{aligned} \mathbf{BA} &= \begin{pmatrix} (2 \cdot -1 + 0 \cdot 2 - i \cdot 2i) & (2 \cdot 1 + 0 \cdot 0 - i \cdot -2i) & (2 \cdot i + 0 \cdot 3 - i \cdot 2) \\ (0 \cdot -1 + 1 \cdot 2 + 0 \cdot 2i) & (0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 + 0 \cdot -2i) & (0 \cdot i + 1 \cdot 3 + 0 \cdot 2) \\ (i \cdot -1 + 3 \cdot 2 + 2 \cdot 2i) & (i \cdot 1 + 3 \cdot 0 + 2 \cdot -2i) & (i \cdot i + 3 \cdot 3 + 2 \cdot 2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 3 \\ (6+3i) & -3i & 12 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (419)$$

Hiermee vinden we voor de commutator

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}, \mathbf{B}] &= \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \\ &= \begin{pmatrix} -3-0 & (1+3i)-0 & 3i-0 \\ (4+3i)-2 & 9-0 & (6-2i)-3 \\ 6i-(6+3i) & (6-2i)+3i & 6-12 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -3 & (1+3i) & 3i \\ (2+3i) & 9 & (3-2i) \\ (-6+3i) & (6+i) & -6 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (420)$$

Ad d) De getransponeerde matrix $\mathbf{A}^T$ is

$$\mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2i \\ 1 & 0 & -2i \\ i & 3 & 2 \end{pmatrix}. \quad (421)$$

Ad e) De geconjugeerde matrix $\mathbf{A}^*$ is

$$\mathbf{A}^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -i \\ 2 & 0 & 3 \\ -2i & 2i & 2 \end{pmatrix}. \quad (422)$$

Ad f) De hermitisch geconjugeerde matrix $\mathbf{A}^\dagger$ is

$$\mathbf{A}^\dagger = \begin{pmatrix} -1 & 2 & -2i \\ 1 & 0 & +2i \\ -i & 3 & 2 \end{pmatrix}. \quad (423)$$

Ad g) De determinant $\det(\mathbf{B})$ is

$$\det(\mathbf{B}) = \begin{vmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{vmatrix}. \quad (424)$$

Als we dit volgens de eerste rij ontwikkelen, vinden we

$$\det(\mathbf{B}) = 2(1 \cdot 2 - 0 \cdot 3) - 0(0 \cdot 2 - 0 \cdot i) - i(0 \cdot 3 - 1 \cdot i) = 4 - 1 = 3. \quad (425)$$

Eenvoudiger is het ontwikkelen volgens de tweede rij,

$$\det(\mathbf{B}) = -0 + 1(2 \cdot 2 - (-i \cdot i)) - 0 = 3. \quad (426)$$

Ad h) De inverse matrix $\mathbf{B}^{-1}$ heeft naast de determinant, de berekening van de geadjungeerde matrix $\text{adj}(\mathbf{B})$. De matrixelementen hiervan zijn

$$|\mathbf{B}_{11}| = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 2 \end{vmatrix} = 2, \quad |\mathbf{B}_{12}| = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ i & 2 \end{vmatrix} = 0, \quad |\mathbf{B}_{13}| = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ i & 3 \end{vmatrix} = -i, \quad (427)$$

$$|\mathbf{B}_{21}| = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ 3 & 2 \end{vmatrix} = 3i, \quad |\mathbf{B}_{22}| = \begin{vmatrix} 2 & -i \\ i & 2 \end{vmatrix} = 3, \quad |\mathbf{B}_{23}| = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ i & 3 \end{vmatrix} = 6, \quad (428)$$

$$|\mathbf{B}_{31}| = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = i, \quad |\mathbf{B}_{32}| = \begin{vmatrix} 2 & -i \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = 0, \quad |\mathbf{B}_{33}| = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 2, \quad (429)$$

zodat

$$\text{adj } \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & -3i & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & -6 & 2 \end{pmatrix}, \quad \text{dus} \quad \mathbf{B}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -i & \frac{i}{3} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{i}{3} & -2 & \frac{2}{3} \end{pmatrix}. \quad (430)$$

3.7.24 Complexe matrices en vectoren

Gebruik de vierkante matrices uit de vorige opgave en de kolommatrices

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} i \\ 2i \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ (1-i) \\ 0 \end{pmatrix},$$

en bereken

a) $\mathbf{Aa}$.

b) $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{b}$,

c) $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{Bb}$,

d) $\mathbf{ab}^\dagger$.

Oplossing: We vinden het volgende:

Ad a) Het product $\mathbf{Aa}$ wordt gegeven door

$$\mathbf{Aa} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & i \\ 2 & 0 & 3 \\ 2i & -2i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i \\ 2i \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \cdot i + 1 \cdot 2i + i \cdot 2 \\ 2 \cdot i + 0 \cdot 2i + 3 \cdot 2 \\ 2i \cdot i - 2i \cdot 2i + 2 \cdot 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3i \\ 6 + 2i \\ 6 \end{pmatrix}. \quad (431)$$

Ad b) Het inproduct $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{b}$ kan geschreven worden als

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{b} = (-i, -2i, 2) \begin{pmatrix} 2 \\ (1-i) \\ 0 \end{pmatrix} = -i \cdot 2 + (-2i)(1-i) + 2 \cdot 0 = -2 - 4i. \quad (432)$$

Ad c) We schrijven $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{Bb}$ als

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{Bb} &= (i, 2i, 2) \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ (1-i) \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= (i, 2i, 2) \begin{pmatrix} 2 \cdot 2 + 0 \cdot (1-i) - i \cdot 0 \\ 0 \cdot 2 + 1 \cdot (1-i) + 0 \cdot 0 \\ i \cdot 2 + 3 \cdot (1-i) + 2 \cdot 0 \end{pmatrix} \\ &= (i, 2i, 2) \begin{pmatrix} 4 \\ (1-i) \\ (3-i) \end{pmatrix} \\ &= i \cdot 4 + 2i \cdot (1-i) + 2 \cdot (3-i) \\ &= 8 + 4i. \end{aligned} \quad (433)$$

Ad d) De uitdrukking $\mathbf{ab}^\dagger$ wordt geschreven als

$$\mathbf{ab}^\dagger = \begin{pmatrix} i \\ 2i \\ 2 \end{pmatrix} (2, (1+i), 0) = \begin{pmatrix} i \cdot 2 & i \cdot (1+i) & i \cdot 0 \\ 2i \cdot 2 & 2i \cdot (1+i) & 2i \cdot 0 \\ 2 \cdot 2 & 2 \cdot (1+i) & 2 \cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i & -1+i & 0 \\ 4i & -2+2i & 0 \\ 4 & 2+2i & 0 \end{pmatrix}. \quad (434)$$

3.7.25 Lineaire ruimte (de elementen zijn reële getallen)

Is de verzameling van alle functies die differentieerbaar zijn op een gegeven interval een lineaire ruimte?

Oplossing: Ja, de verzameling L van alle functies die differentieerbaar zijn op een gegeven interval vormt een lineaire ruimte. We kunnen dit inzien door te verifiëren dat deze verzameling van deze functies voldoet aan de definitie voor een lineaire ruimte over een getallenlichaam K . Hiervoor geldt

- $\forall_{f(x), g(x) \in L} \exists!_{h(x) \in L} [f(x) + g(x) = h(x)]$
- $\forall_{p \in K, f(x) \in L} \exists!_{h(x) \in L} [pf(x) = h(x)],$

terwijl de volgende acht axioma's gelden

1. $\forall_{f(x), g(x) \in L} [f(x) + g(x) = g(x) + f(x)]$
2. $\forall_{f(x), g(x), h(x) \in L} [(f(x) + g(x)) + h(x) = f(x) + (g(x) + h(x))]$
3. $\exists \mathbf{0} \in L \forall_{f(x) \in L} [f(x) + \mathbf{0} = f(x)]$
4. $\forall_{f(x) \in L} \exists_{-f(x) \in L} [f(x) + (-f(x)) = \mathbf{0}]$
5. $\forall_{p, q \in K, f(x) \in L} [(p + q)f(x) = pf(x) + qf(x)]$
6. $\forall_{f(x), g(x) \in L, p \in K} [p(f(x) + g(x)) = pf(x) + pg(x)]$
7. $\forall_{p, q \in K, f(x) \in L} [p(qf(x)) = (pq)f(x)]$
8. $\forall_{f(x) \in L} [1f(x) = f(x)]$

Indien $f(x)$ en $g(x)$ differentieerbaar zijn, dan is $h(x) = f(x) + g(x)$ in alle gevallen ook differentieerbaar, want $h'(x) = f'(x) + g'(x)$. Tenslotte, als $f(x)$ differentieerbaar is, dan is $h(x) = pf(x)$ ook differentieerbaar, want $h'(x) = pf'(x)$. Dus is $h(x)$ ook een element van de verzameling van alle functies die differentieerbaar zijn op een gegeven interval.

3.7.26 Voorbeeld van een lineaire ruimte

Toon aan dat $\mathbb{R}$ een reële lineaire ruimte is. Is $\{0\}$ een lineaire ruimte? En $\{1\}$?

Oplossing: De verzameling $L = \mathbb{R}$ vormt een reële lineaire ruimte is. We verifiëren expliciet de twee belangrijkste voorwaarden:

- $\forall_{a, b \in L} \exists!_{c \in L} [a + b = c]$. Het resultaat van optellen van twee elementen, a en b uit $\mathbb{R}$ is het getal c , dat ook weer element is van de verzameling $L = \mathbb{R}$.
- $\forall_{p \in K, a \in L} \exists!_{c \in L} [pa = c]$. We kunnen ook de vermenigvuldiging van een element a uit $\mathbb{R}$ met een getal p definiëren. Het resultaat c is dan weer een element van de verzameling $L = \mathbb{R}$. Op deze wijze kunnen ook de andere axioma's expliciet worden.

De verzameling $\{0\}$ is een (triviale) lineaire ruimte. Verder is $\{1\}$ geen lineaire ruimte, omdat de ruimte geen nulelement bevat.

3.7.27 Meer over lineaire ruimten

Is $\{f | f''(x) - 2f'(x) - 3f(x) = 0\}$ een lineaire ruimte?

Oplossing: De set $\{f | f''(x) - 2f'(x) - 3f(x) = 0\}$ vormt een lineaire ruimte. We beschouwen twee elementen van deze ruimte, $f(x)$ en $g(x)$. Er geldt dan

$$\begin{aligned} f''(x) - 2f'(x) - 3f(x) &= 0 \quad \text{en} \\ g''(x) - 2g'(x) - 3g(x) &= 0. \end{aligned} \tag{435}$$

Stel $h(x) = f(x) + g(x)$, dan geldt $h'(x) = f'(x) + g'(x)$ en $h''(x) = f''(x) + g''(x)$. Er geldt dan

$$\begin{aligned} (f''(x) - 2f'(x) - 3f(x)) + (g''(x) - 2g'(x) - 3g(x)) &= 0 \rightarrow \\ (f''(x) + g''(x)) - 2(f'(x) + g'(x)) - 3(f(x) + g(x)) &= 0 \rightarrow \\ h''(x) - 2h'(x) - 3h(x) &= 0. \end{aligned} \tag{436}$$

We zien dat ook $h(x)$ voldoet aan de eisen gesteld aan de lineaire ruimte.

De set $\{f | f''(x) - 2f'(x) - 3f(x) = x^2\}$ vormt geen lineaire ruimte. We verifiëren dit weer op dezelfde wijze. We beschouwen twee elementen van deze ruimte, $f(x)$ en $g(x)$. Er geldt dan

$$\begin{aligned} f''(x) - 2f'(x) - 3f(x) &= x^2 \quad \text{en} \\ g''(x) - 2g'(x) - 3g(x) &= x^2. \end{aligned} \tag{437}$$

Stel $h(x) = f(x) + g(x)$, dan geldt $h'(x) = f'(x) + g'(x)$ en $h''(x) = f''(x) + g''(x)$. Er geldt dan

$$\begin{aligned} (f''(x) - 2f'(x) - 3f(x) - x^2) + (g''(x) - 2g'(x) - 3g(x) - x^2) &= 0 \rightarrow \\ (f''(x) + g''(x)) - 2(f'(x) + g'(x)) - 3(f(x) + g(x)) &= 2x^2 \rightarrow \\ h''(x) - 2h'(x) - 3h(x) &= 2x^2 \neq x^2. \end{aligned} \tag{438}$$

We zien dat $h(x)$ niet voldoet aan de eisen gesteld aan de lineaire ruimte.

3.8 Opgaven

3.8.1 Comptonverstrooiing

Een röntgenfoton van 0.3 MeV ondergaat een frontale botsing met een elektron in rust. Gebruik behoud van energie en impuls om de snelheid van het teruggestoten elektron te vinden.

3.8.2 Waterstofatoom

Bepaal de golflengten van waterstof die in het optische spectrum (3800 Å tot 7700 Å) liggen.

3.8.3 De Broglie-golflengte

Bepaal de versnelling die nodig is om een elektron een de Broglie-golflengte van 1 Å te geven. Dit correspondeert met de grootte van de inter-atoomafstanden van een kristal.

3.8.4 Fotonflux

Licht met golflengte van 3000 Å en intensiteit $15 \times 10^{-2} \text{ W/m}^2$, valt loodrecht op een oppervlak van 4 cm^2 . Bepaal dan het aantal fotonen dat per seconde het oppervlak raakt.

3.8.5 Harmonische oscillator

De golf functie $\Psi(x, t)$ voor de laagste energietoestand van een eenvoudige harmonische oscillator, bestaande uit een deeltje met massa m waarop een lineaire herstelkracht met krachtconstante C werkt, kan worden geschreven als $\Psi(x, t) = Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$, waarbij de reële constante A elke waarde kan aannemen.

1. Verifieer dat deze uitdrukking een oplossing is van de schrödingervergelijking voor de betreffende potentiaal ($V(x, t) = V(x) = Cx^2/2$).
2. Bewijs dat $\Psi(x, t)^*\Psi(x, t)$ reëel is, en enkel positief of nul kan zijn.
3. Bereken de waarschijnlijkheidsdichtheid voor de eenvoudige harmonische oscillator in de laagste energietoestand met behulp van de gegeven golf functie.
4. Evalueer de voorspellingen van de klassieke fysica voor de waarschijnlijkheidsdichtheid van een eenvoudige harmonische oscillator in de opgave en vergelijk het resultaat met dat gevonden in de vorige deelopgave.
5. Normeer de golf functie door de waarde van de willekeurige constante A te bepalen, zodanig dat de totale waarschijnlijkheid het deeltje ergens aan te treffen gelijk wordt aan 1.
6. Bepaal de verwachtingswaarde $\langle x \rangle$ voor een deeltje in de laagste energietoestand van een harmonische oscillator door gebruik te maken van de golf functie en waarschijnlijkheidsdichtheid berekend in de vorige opgaven.
7. Beschouw een deeltje met massa m dat zich vrij kan bewegen langs de x -as tussen posities $x = -a/2$ en $x = +a/2$, maar waarbij het strikt verboden is dat het deeltje zich buiten dit interval bevindt. De golf functie van het deeltje kan geschreven worden als $\Psi(x, t) = A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar}$ binnen het interval en is gelijk aan nul erbuiten. Bepaal de energie van de laagste energietoestand.
8. Maak gebruik van bovenstaande golf functie en bereken de verwachtingswaarden voor x , p , x^2 en p^2 .