

Pijlers vans ons wereldbeeld 2: Quantummechanica

HOVO cursus 'Evolutie', voorjaar 2008

Prof. Dr. R.H.P. Kleiss
IMAPP
Radboud Universiteit , Nijmegen

1 Het falen van de klassieke natuurkunde

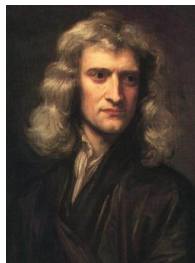
In deze collegereeks zullen we een aantal aspecten behandelen van een van de mooiste en vreemdste bouwwerken van de menselijke geest, de quantummechanica. Naar de aard van de natuurwetenschappen is zij niet een vrijelijk tot stand gekomen theorie zoals in de wiskunde wel voorkomt: zij is geformuleerd om een beschrijving van de verschijnselen te geven, nauwkeuriger dan een waartoe de klassieke¹ natuurkunde in staat is. In andere woorden: de quantummechanica is ons opgelegd door confrontatie met klassiek niet te verklaren verschijnselen. Wij zullen enige daarvan bezien.

Aan het eind van de 19^e eeuw leek het bouwwerk van de natuurkunde zijn voltooiing genaderd te zijn. Toen Max Planck, de latere grondlegger van de quantummechanica, overwoog natuurkunde te studeren werd hem dit afgeraden met het argument dat ‘nog slechts een paar decimalen moesten worden berekend’.



Max Planck,
1858-1947

1.1 Dispuut over de aard van het licht



Isaac Newton,
1643-1727

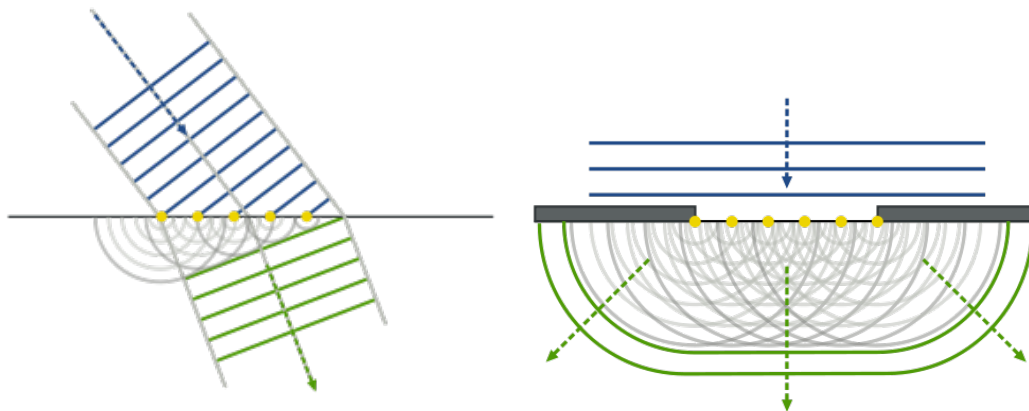


Christiaan Huygens,
1629-1695

Vanaf de 17^e eeuw woedde een debat over de aard van het licht. Dit debat speelde zich voornamelijk af tussen Newton en Huygens. Voor Newton be-

¹Met ‘klassiek’ bedoelen we in deze colleges die vorm van natuurkunde die gebaseerd is op de mechanica van Newton en de electrodymanica van Maxwell. Kortweg: klassiek is alles dat *niet*-quantum is.

stond licht uit deeltjes: een lichtstraal is dan niets meer of minder dan een stroom deeltjes², die, niet aan krachten onderhevig, in een rechte lijn zou moeten bewegen. Dit idee was natuurlijk geheel in de geest van de ‘Newtoniaanse mechanica’, die zo succesvol de beweging van materiële puntmassa’s wist te beschrijven. Huygens daarentegen zag de verspreiding van het licht als een zich voortplantende golfbeweging³. Het argument daarvoor was het gegeven dat licht dat door een smalle opening valt, evenals geluid dat doet, zich voortplant alsof de opening de bron van het licht (geluid) is. Huygens zag de voortplanting van licht als een proces waarbij ieder punt van een golffront optreedt als een bron van licht; de *interferentie* van de door de verschillende bronnen voortgebrachte golven geven dan gestalte aan het patroon van de zich inderdaad zo bewegende golven: dit heet *Huygens’ principe*.



Huygen's principe voor lichtbreking

Huygens' principe bij een opening

²Merk op dat dit voor Newton *moest* impliceren dat ook licht door een zwaartekrachtsveld wordt afgebogen! Het is dus *niet* zo dat de waarneming van dit effect de algemene relativiteitstheorie van Einstein bevestigde, zoals wel abusievelijk wordt beweerd: wel is het zo dat in Einsteins theorie de afbuiging precies tweemaal zo groot is als in de gravitatietheorie van Newton. Het is deze factor twee die, eenmaal bevestigd, de doorslag gaf voor de acceptatie van de algemene relativiteitstheorie.

³De aard van het *medium* dat dan wel de zich voortplantende golf moest dragen, zoals de zee de golven aan haar oppervlak, was niet duidelijk, en in de negentiende eeuw werd daarvoor de *æther* aangenomen. De ontdekking van het niet-bestaan van een *æther* lag aan de basis van de relativiteitstheorie. Tegenwoordig zien wij het electromagnetische veld als datgene dat, in trilling gebracht, zich manifesteert als licht of enig andere electromagnetische golf.



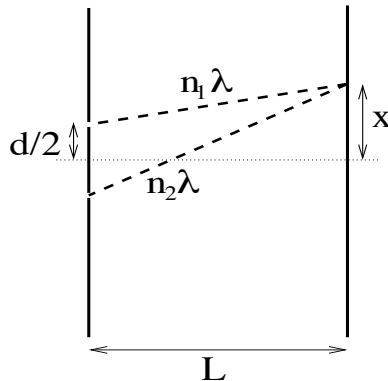
Thomas Young,
1773-1829



Jean-Augustin Fresnel,
1788-1827

Het gezag van Newton gaf de deeltjes-theorie lang de overhand. Van lieverlee echter won de algemene opvatting dat Huygens het bij het rechte eind had, met name naar aanleiding van de experimenten van Young (met name in Engeland ook bekend geworden door zijn – gedeeltelijke – ontcijfering van de Egyptische hiërogliefen): deze gaan onder de beroemde naam van het *twee-spleten* experiment. Hiermee kan men het golfkarakter van licht aantonen, en de golflengte bepalen. Young's experimenten werden bevestigd en theoretisch beter onderbouwd door de Fransman Fresnel.

1.2 Het golfkarakter van licht



Een schematische voorstelling van het twee-spleten experiment. De intensiteit van het bij x aankomende licht wordt bepaald door de bijdragen van de twee mogelijke lichtstralen (met onderbroken lijnen aangegeven).

We stellen ons de volgende situatie voor. Een scherm staat opgesteld, waarop te zien is of er enig licht op valt (denk hierbij aan een projectiescherm of iets dergelijks). Op een afstand L vóór dit scherm staat een ondoorzichtige plaat waarin twee smalle spleten zijn voorzien, op een afstand d van elkaar. Op deze plaat laten we licht vallen (bij voorkeur uit een laser omdat deze lichtstralen van één enkele kleur uitzendt). Dit licht kan het scherm alleen

bereiken middels de spleten. We vragen ons nu af wat de intensiteit van het licht is dat op een afstand x van het midden op het scherm valt (zie bovenstaand diagram).

Als we Newton geloven bestaat licht uit deeltjes die zich min of meer gedragen als kleine kogeltjes. Elk kogeltje gaat in dit beeld ofwel door de bovenste ofwel door de onderste spleet. We zouden dan twee lichtstrepen op het scherm verwachten, die wellicht wat ‘uitgesmeerd’ zijn omdat de kogeltjes aan de randen van de spleten verstrooid kunnen worden. In dit beeld zijn er dus twee lichtbanden op het scherm. Met name voor $x = 0$ (precies tussen de twee spleten in) zou men geen, of nauwelijks enig licht verwachten.

Het feitelijke resultaat is heel anders! Als men het experiment zorgvuldig uitvoert, verschijnt op het scherm een patroon van afwisselend lichte en donkere banden. In het bijzonder is bij $x = 0$ de helderste streep van het hele patroon te zien! De door Young en Fresnel gegeven verklaring van dit effect berust op de aanname dat licht geen deeltjes-, maar een golfverschijnsel is, waarbij de voortplanting van de golven plaats vindt volgens Huygens’ principe. Van elke spleet strekt zich naar het punt x op het scherm een lichtgolf uit. Als van deze beide golven de golftoppen en -dalen *tegelijk* het scherm raken, zullen de golven elkaar versterken, en zal op het scherm licht te zien zijn. Als daarentegen de *top* van de ene golf tegelijk aankomt met het *dal* van de andere golf, zullen de golven elkaar daar uitdoven en blijft het scherm donker. Dit verschijnsel, waarbij twee of meer golven elkaar kunnen versterken of juist (in meerdere of mindere mate) opheffen heet *interferentie*.

We kunnen hier een eenvoudige berekening op loslaten. Stel dat de *golflengte* van het licht, dwz de afstand tussen een golftop en de volgende, λ bedraagt. Een golftop en zijn naaste golfdal zijn dan $\lambda/2$ van elkaar verwijderd. Veronderstel dat twee lichtgolven zich uitstrekken van de spleten naar het door x aangegeven punt op het scherm. De lengte van de weg die het licht uit de bovenste spleet aflegt wordt dan gegeven door

$$L_1 = \sqrt{L^2 + (x - d/2)^2} ,$$

terwijl de corresponderende weglengte voor de straal uit de onderste spleet

$$L_2 = \sqrt{L^2 + (x + d/2)^2}$$

bedraagt. Drukken we deze weglengtes uit in *aantallen golflengtes* n , dan vinden we voor het licht uit de bovenste resp. onderste spleet

$$L_1 = n_1\lambda \quad , \quad L_2 = n_2\lambda \quad .$$

Aannemende dat het licht met dezelfde fase uit de twee spleten treedt, bijvoorbeeld, dat de *golftoppen* tegelijkertijd tevoorschijn komen, dan zullen de golftoppen bij hun aankomst op het scherm een afstand $(n_1 - n_2)\lambda$ van elkaar verwijderd zijn. Als nu $n_1 - n_2$ een *geheel* getal is⁴, dan vallen de toppen van de golfpatronen precies op elkaar, met als gevolg een versterking van de intensiteit; is echter $n_1 - n_2$ *halftallig*⁵, dan zullen de toppen van de ene golf precies samenvallen met de dalen van de andere golf, hetgeen leidt tot wederzijdse uitdoving, en geen licht op het scherm. We hebben dus de relatie

$$L_2 - L_1 = n \lambda \quad , \quad (1)$$

die in de benadering dat L groot is ten opzichte van x en d geschreven kan worden als

$$\begin{aligned} L_2 - L_1 &= \frac{L_2^2 - L_1^2}{L_2 + L_1} \approx \frac{1}{2L} (L_2^2 - L_1^2) \\ &= \frac{1}{2L} \left([L^2 + (x + d/2)^2] - [L^2 - (x - d/2)^2] \right) = \frac{x d}{L} = n \lambda \quad (2) \end{aligned}$$

Als L maar groot genoeg is, kan de waarde van λ goed gemeten worden ook al is λ zelf klein.

1.3 Het spectrum en de stabiliteit van het atoom

Tegen het einde van de 19^e eeuw was de theorie van elektromagnetische verschijnselen goed begrepen. Eén van haar voorspellingen is dat een elektrische lading die versnelling ondergaat⁶ elektromagnetische golven moet uitzenden. Toen aan het begin van de twintigste eeuw de structuur van het atoom gaandeweg ontrafeld werd, trad een ernstig probleem aan den dag. In het atoom, wat enigzins als een miniatuur-zonnestelsel zou kunnen worden opgevat, draaien de elektronen hun baantjes om de kern: de ‘zwaartekracht’ van dit systeem is de elektrische aantrekking tussen de positief geladen atoomkern

⁴Dat wil zeggen één van de getallen $\dots, -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots$.

⁵Een haftallig getal is een geheel getal plus $1/2$: de getallen $\dots, -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2, 7/2 \dots$ zijn halftallig.

⁶In de fysica spreken we van ‘versnelling’ bij iedere *verandering van de beweging*. Deze verandering kan er een van grootte zijn (waarmee ook een vertraging als een versnelling geldt), maar ook een van de bewegingsrichting. Een zich in een cirkelbaan bewegende lading wordt dus ook voortdurend versneld.

en de negatief geladen electronen. Volgens de wetten van het electromagnetisme zullen dergelijke electronen echter electromagnetische golven uitzenden. Daardoor zal hun energie afnemen, en zullen ze dichter naar de kern toe bewegen. Dit proces stopt niet, en in een fractie van een seconde zou elk electron op de atoomkern storten. Volgens de (toen) gangbare fysica zou een atoom helemaal niet kunnen bestaan⁷, in duidelijke tegenspraak met onze ervaring.

Een ander probleem in de klassieke theorie van het atoom is het volgende. Een atoom kan onder de juiste omstandigheden licht absorberen of uitzenden. Op zich is dit niet verbazend, omdat de bestanddelen van het atoom electrisch geladen zijn en dus interactie met electromagnetische velden moeten hebben. Het blijkt echter dat ieder atoom alleen licht⁸ van zeer nauwkeurig bepaalde frequenties⁹ absorbeert, en dezelfde kleuren kan uitzenden. Elk chemisch element heeft zijn eigen karakteristieke *spectrum* van kleuren. Reeds in de negentiende eeuw werd hiervan gebruikt gemaakt om de aanwezigheid van chemische elementen te detecteren, maar de *verklaring* van deze kieskeurigheid van het atoom was niet in de klassieke theorie te vinden.

⁷Er moet worden opgemerkt dat ook een door gravitatie bijeengehouden systeem iets dergelijks moet ondergaan, tenminste in de algemene relativiteitstheorie: de aarde zendt in haar baan rond de zon *gravitatiegolven* uit, en verliest daardoor eveneens voortdurend aan energie. Omdat de zwaartekracht zo ontzettend veel zwakker is dan de electrische wisselwerking is dit energieverlies echter uitermate miniscuul, en het zonnestelsel is dan ook een lang leven beschoren, althans wat dit effect betreft. Voor systemen van zware (neutron)sterren die razendsnel om elkaar heen draaien is het energieverlies daarentegen wel degelijk aangetoond.

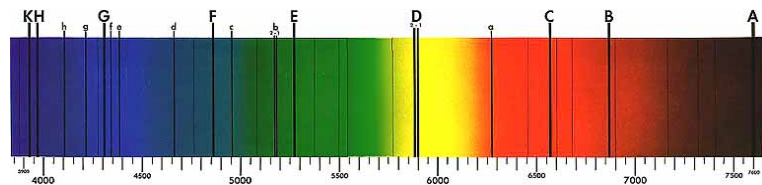
⁸Of andere electromagnetische golven, zoals ultraviolette of infrarode golven.

⁹De frequentie van lichtgolven doet zich aan ons voor als de *kleur* van het licht.



Joseph von Fraunhofer,
1787-1826

Joseph von Fraunhofer was de ontdekker van de absorptie-lijnen in spectra. Dit zijn de golflengten van het licht dat door bepaalde chemische stoffen wordt geabsorbeerd: als licht van alle kleuren door een hoeveelheid van die stof gaat, zullen sommige kleuren geabsorbeerd worden en dus als ‘donkere’ plaatsen in het uiteengerafelde spectrum optreden.



Fraunhofer lijnen in het spectrum van zonlicht

In de sterrenkunde worden de Fraunhofer lijnen gebruikt als ‘vingerafdrukken’ waaruit een schat aan informatie te halen valt: aan het door een ster uitgezonden licht kan zijn chemische samenstelling worden bepaald¹⁰; de breedte van de lijnen is een goede maat voor de temperatuur waarbij het licht werd uitgezonden, en een eventuele Doppler-verschuiving van de lijnen geeft direct de snelheid waarmee de ster van ons af of naar ons toe beweegt.

1.4 Het foto-electrisch effect

Een ander, niet uit de klassieke theorie goed te beschrijven, verschijnsel draagt de naam van het *foto-electrisch effect*. Dit bestaat daaruit dat sommige materialen electronen kunnen uitstoten wanneer er licht op valt. Dit effect wordt bijvoorbeeld gebruikt om lichtgevoelige schakelaars (‘schemerschakelaars’) te construeren. De *energie* waarmee de electronen naar buiten treden kan vrij eenvoudig gemeten worden, evenals het *aantal* electronen dat per seconde vrij komt. Op zich is het niet verwonderlijk dat een electron uit

¹⁰Waarbij natuurlijk rekening moet worden gehouden met het feit dat het licht van de ster op weg naar de aarde eventueel nog door hoeveelheden kosmisch stof en gas moet ploegen, die ook hun afdruk op het spectrum achterlaten.

een stof kan worden vrijgemaakt door het een electromagnetische ‘schop’ te verkopen: het is veeleer het kwantitatieve karakter van het effect dat zich niet laat rijmen met de klassieke fysica. Men zou verwachten dat naarmate het licht intenser is, de electronen hogere energie krijgen. Nu is bijvoorbeeld blauw licht energierijker dan rood licht¹¹, maar een navenant intensere bundel rood licht zou de klus ook moeten kunnen klaren. Wat men ziet is echter geheel anders: alleen licht van een minimale frequentie¹² geeft een foto-electrisch effect, hoe intens het licht ook is. Boven dit minimum treedt het effect wel op, echter (a) de energie van de electronen hangt niet van de intensiteit af, maar alleen van de frequentie, en (b) de hoeveelheid electronen is evenredig met de intensiteit.

1.5 Het deeltjeskarakter van licht

In zijn *annus mirabilis* 1905 gaf Einstein een verklaring voor het foto-electrisch effect. De essentiële aanname in deze verklaring is dat licht uit pakketjes bestaat, waarvoor de naam *licht-quanta* werd bedacht. Tegenwoordig spreken we liever van *fotonen*¹³. Elk foton van een bepaalde frequentie (dwz een bepaalde kleur) heeft precies dezelfde energie als elk ander foton van die frequentie. Hoe intenser (en dus energetischer) het licht is, des te meer fotonen bevat het. Het proces waarbij een electron uit het materiaal wordt losgemaakt tijdens het foto-electrisch effect is niets meer dan een botsing tussen een invallend foton en een electron in het materiaal. Als de energie die het foton aan het electron overdraagt groot genoeg is kan het electron zijn bindings-energie (waarmee het in het materiaal vast zit) overwinnen. Dit verklaart waarom een minimale frequentie van het licht vereist is; is de frequentie hoger, dan heeft het electron navenant meer energie over bij het uittreden. Als meer en meer fotonen invallen (hogere intensiteit van het licht)

¹¹Ongeveer 50%.

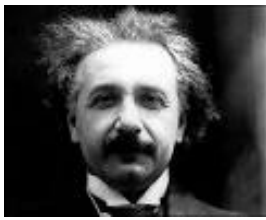
¹²Men denke hierbij aan de kleuren van licht zoals geordend in de regenboog. Rood licht heeft de laagste frequentie, violet licht de hoogste. Naarmate een kleur dichterbij het violet ligt is de frequentie groter.

¹³Deze naam volgt een min of meer algemene conventie waarbij het achtervoegsel *-on* wordt gebruikt om een min of meer fundamentele bouwsteen van het een of andere effect aan te duiden. Zo kennen we in de subatomaire fysica het proton, neutron, muon, tau-lepton, het gluon, *W*, *Z* en Higgs boson, het graviton, dyon, sphaleron, etcetera. In de fysica van gecondenseerde materie, een technisch gezien verwant vak, kennen we bevoorbeeld het fonon en het polaron. Een *electron* is een partikeltje *electrische lading*, een *foton* is een partikeltje *licht*.

zullen meer en meer electronen uittreden.

We hebben hier een voorbeeld van wat een paradigma-wisseling wordt genoemd. Tot het begin van de twintigste eeuw werd licht uitsluitend als een golf-verschijnsel gezien, en kon het foto-electrisch effect niet begrepen worden. Ziet men het licht echter als deeltjes, dan is de verklaring onmiddellijk, simpel en inzichtelijk.

Het idee van ‘quanta’ was al eerder geopperd door Planck, die daarmee de aartsvader van de quantummechanica genoemd mag worden. Hij hield zich echter niet bezig met het foto-electrisch effect maar met warmtestraling (ook licht, zij het dan niet altijd zichtbaar maar bijvoorbeeld infrarood) die door alle voorwerpen wordt uitgezonden en geabsorbeerd. Planck vond dat de trillende elektrische ladingen in materie die voor deze stralings-uitwisseling verantwoordelijk zijn niet met willekeurige energie konden voorkomen, maar slechts in bepaalde hoeveelheden (quanta) samenhangend met de trillingsfrequentie. Voor Planck echter was dit idee niet meer dan een wiskundig trucje om de theorieën omtrent zulke straling voor onacceptabele voorspellingen te behoeden. Het was Einstein die de boude stap maakte en het quantum-karakter zag als een intrinsieke eigenschap van de straling zélf.



Albert Einstein,
1879-1955

De verklaring van het foto-electrisch effect door Einstein is een van de beslissende momenten in de ontwikkeling van de moderne fysica, en daarmee is Einstein een van de grondleggers van de quantummechanica. In latere jaren had hij echter grote moeite met de tegen-intuïtieve consequenties van de theorie, en poogde te laten zien dat de quantummechanica niet een fundamentele theorie kan zijn. Overigens was het het foto-electrisch effect, en niet de relativiteitstheorie, die Einstein in 1921 de Nobelprijs bezorgde.

Het foto-electrisch effect suggereert, zoals gezegd, dat licht uit deeltjes bestaat. Maar hoe zit het dan met het werk van mensen als Young en Fresnel? Hun experimenten, die gemakkelijk gereproduceerd kunnen worden¹⁴ kunnen immers alleen begrepen worden als licht uit golven bestaat. Het antwoord (waarover Newton en Huygens posthuum tevreden kunnen zijn) is dat licht *allebei* is. Dit is de beroemde/beruchte ‘golf-deeltjes dualiteit’. Het

¹⁴Zoals tijdens iedere zichzelf respecterende natuurkunde-opleiding waaraan een practicum is verbonden.

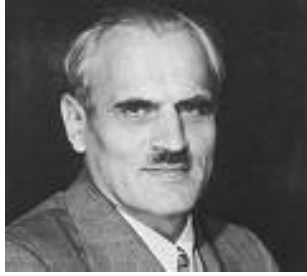
is niet helemaal correct om te zeggen dat licht zowel uit golven als uit deeltjes bestaat. Laten we het liever formuleren op de manier van R.P. Feynman¹⁵: *licht bestaat uit deeltjes; de manier waarop die deeltjes bewegen wordt het best beschreven met golf-vergelijkingen*. Op de manier waarop dit wiskundig handen en voeten moet krijgen zullen we nog uitgebreid ingaan. Of het deeltjes-, dan wel het golfkarakter het meest aan den dag treedt hangt af van de situatie. Een 60-Watts gloeilamp zendt zóveel fotonen uit¹⁶ dat het zinloos is ieder individueel foton te volgen, en de golfbeschrijving is dan verreweg het eenvoudigst. Aan de andere kant is het mogelijk om een lamp te construeren die zó zwak is dat de individuele fotonen er met grote tussenpozen uit sijpelen. In grote, moderne deeltjesversnellers worden tijdens de deeltjesbotsingen fotonen geproduceerd van een zo extreem grote energie dat deze als een kogel door dikke lagen materiaal kunnen ploegen. Zulke fotonen hebben een uitgesproken deeltjeskarakter¹⁷.

Het deeltjeskarakter van licht treedt ook duidelijk naar voren in het aan het foto-electrisch effect verwante process dat *Compton verstrooiing* wordt genoemd. Hierbij botst licht op een electron en uit deze botsing komt weer licht tevoorschijn. Het is in zekere zin alsof het licht en het electron een elastische botsing uitvoeren, ongeveer zoals twee biljartballen. Het blijkt nu dat het uittredende licht een lagere frequentie, dat wil zeggen een lagere energie heeft dan het inkomende licht. Het energieverlies hangt van de verstrooiingshoek af. Dit effect kan alleen verklaard worden door het licht als deeltjes op te vatten, en dit vormt ook weer een argument voor de foton-hypothese.

¹⁵Richard. P. Feynman, een van mijn grootste helden. Zijn zogenaamde *pad-integralen* formulering van de quantumtheorie (zie later) is in feite niet anders dan een consequente doordenking van het twee-spleten experiment.

¹⁶*Wave upon wave* of them.

¹⁷Hiermee is niet gezegd dat de beschrijving van fotonen *eenvoudig* is. Immers, aangezien fotonen de bouwsteentjes van het licht zijn, bewegen ze met lichtsnelheid, en een correcte theorie van fotonen en hun interactie met materie moet dan ook niet alleen de quantummechanica maar ook de *relativiteitstheorie* recht doen: dit is het vakgebied van de *realitivistische quantum-velden theorie*, waarop we in dit college niet zullen ingaan.



Arthur Holly Compton,
1892-1962

Omdat zichtbaar licht te weinig energierijk is om met electronen in materiaal een elastische botsing uit te voeren, bedreef Compton zijn experimenten met Röntgen- en gammastraling. De fotonen van deze vorm van licht zijn zo energierijk dat de bindingsenergie van het electron in het materiaal te verwaarlozen is, en het electron is dan zo goed als ‘vrij’.

1.6 De constanten van Planck en Dirac

Volgens Einstein is de energie van elk foton een functie van zijn frequentie: wat nu is de precieze relatie tussen deze beide? Laten we de frequentie met f aangeven, en de energie met E , dan luidt ze

$$E = h f . \quad (3)$$

Een tweemaal zo grote frequentie impliceert dus een tweemaal zo grote energie. De constante h is de door Planck geïntroduceerde quantumconstante die te zijner ere de *constante van Planck* genoemd wordt. Omdat energie uitgedrukt wordt in Joules, en frequentie in inverse seconden¹⁸ moet ze de eenheid van energie maal seconde hebben. Numeriek hebben we

$$h = 6.62606896(33) \times 10^{-34} \text{ Joule} \cdot \text{sec} , \quad (4)$$

waarbij het getal (33) de meet-onzekerheid in de laatste twee decimalen aangeeft.

In de fysica is het gebruikelijk om periodieke verschijnselen zoals trillingen niet aan te geven in termen van hun frequentie (zo-en zoveelwentelingen van 360 *graden* per seconde), maar in termen van hun *hoekfrequentie* ω (zo-en zoveel hoeveelheden van 2π *radialen* per seconde). Daarmee is

$$\omega = 2\pi f$$

en de relatie energie-hoekfrequentie is daarmee

$$E = \hbar \omega , \quad (5)$$

¹⁸Immers een frequentie is ‘zo- en zoveel maal per seconde’.

waarbij

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054571628(53) \times 10^{-34} \text{ Joule} \cdot \text{sec} \text{ ,} \quad (6)$$

de *constante van Dirac* genoemd wordt¹⁹.

De numerieke kleinheid van \hbar impliceert dat elk individueel foton maar een heel klein beetje energie bevat, althans naar de maastaven van het dagelijks leven. De frequentie van zichtbaar licht ligt tussen ongeveer 450 TeraHertz (rood licht) en 750 TeraHertz (violet licht), dat wil zeggen

$$4.5 \times 10^{14} \text{ sec}^{-1} < f < 7.5 \times 10^{14} \text{ sec}^{-1} \text{ .} \quad (7)$$

De energie van een foton van zichtbaar licht ligt daarmee tussen de 3 en 5 maal 10^{-19} Joule. Het is in de subatomaire fysica dan ook gebruikelijk om een kleinere eenheid van energie te hanteren, de electronvolt:

$$1 \text{ eV} = 1.60217653(14) \times 10^{-19} \text{ Joule} \text{ .} \quad (8)$$

Daarmee heeft een rood foton een energie van ongeveer 2 eV, en een blauw foton een energie van ongeveer 3 eV. De electronvolt is de energie die een enkel electron krijgt door het doorlopen van een potentiaalverschil van 1 Volt: bij uitstek een ‘subatomaire’ grootheid!²⁰

Naast een *frequentie* heeft licht ook een *golflengte*: immers, deze ligt aan de basis van het twee-spleten experiment. Omdat de snelheid van het licht

$$c = 299792458 \text{ m/sec} \quad (9)$$

bedraagt²¹, is de golflengte

$$\lambda = \frac{c}{f} \text{ .} \quad (10)$$

¹⁹In natuurkundige discussies wordt meestal \hbar gebruikt, liever dan h . Naast het feit dat de combinatie $h/2\pi$ inderdaad veel voorkomt, is wellicht ook het feit dat \hbar zijn eigen karakteristieke typografie heeft terwijl h een gewone, en zelfs vrij oninspirerende letter is, hiervoor verantwoordelijk. Dit gaat zover dat de meeste natuurkundigen \hbar ‘Planck’s constante’ noemen. In ieder geval kan men er zeker van zijn dat in *elke* uitdrukking waarin een \hbar voorkomt, de quantumfysica op de loer ligt. \hbar is daarmee niet alleen een constante maar ook een *logo*.

²⁰De hoog-energetische fotonen die vrijkomen in deeltjesversnellers hebben energieën van de orde van 10^9 eV.

²¹De snelheid van het licht *in vacuo* is een van de weinige natuurconstanten waarvan de waarde *exact* bekend is: in feite is vergelijking (9) de definitie van de *meter*.

is daarmee de golflengte van rood licht ongeveer 700 nanometer²², en van violet licht ongeveer 400 nm.

Een kleine dimensionele analyse is nu op zijn plaats. De energie-eenheid Joule is

$$\text{Joule} = \frac{\text{kg m}^2}{\text{sec}^2} .$$

de eenheid van \hbar is daarmee

$$\hbar \leftarrow \frac{\text{kg m}^2}{\text{sec}} .$$

Dit is niet alleen het product van energie en tijd, maar *ook* het product van *impuls* en *afstand*:

$$\frac{\text{kg m}^2}{\text{sec}} = \left(\text{kg} \frac{\text{m}}{\text{sec}} \right) \times \text{m} .$$

We kunnen dus middels h of \hbar niet alleen een energie E aan een foton toekennen op basis van zijn frequentie f , maar ook een impuls p op basis van zijn golflengte λ :

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi \hbar}{\lambda} . \quad (11)$$

Daarmee is eveneens vastgelegd dat

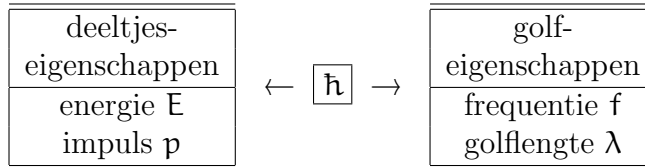
$$E = c p \quad (12)$$

voor het foton. Net als de energie is ook de impuls van lichtstralen goed te meten²³, en ze voldoet inderdaad aan bovenstaande relatie²⁴. We zien dat het loutere bestaan van een natuurconstante met de eenheid van energie maal tijd al het mogelijke bestaan van de golf-deeltje dualiteit impliceert, volgens onderstaand schema:

²²Een nanometer (nm) is 10^{-9} meter.

²³En te gebruiken! De zon zendt voortdurend licht uit, en er zijn min of meer realistische ontwerpen voor ruimteschepen die door het zonnestelsel *zeilen* op de ‘fotonwind’. Het volstaat om een groot (en licht!) genoeg zeil te maken. Dit is weer een voorbeeld van een situatie waarin de *science-fiction* (waarin dergelijke schepen regelmatig voorkomen) vooruitloopt op de *science*.

²⁴In de Newtoniaanse mechanica geldt voor voorwerpen een andere relatie tussen energie en impuls. Uit $p = Mv$, waarbij M de massa en v de snelheid van een lichaam is, en $E = Mv^2/2$, volgt immers $E = p^2/(2M)$. De andere vorm van de relatie tussen impuls en energie van de (massaloze, $M = 0!$) fotonen is een indicatie van de andere vorm van deze formules in de relativiteitstheorie.



1.7 Het golfkarakter van deeltjes



Louis-Victor-
Pierre-Raymond,
7^e hertog van Broglie
1892-1987

Als licht zowel een golf- als een deeltjes-interpretatie toelaat, hoe zit het dan met die objecten die we natuurlijkerwijze als deeltjes zien? In het tweede decennium van de twintigste eeuw wierp Louis de Broglie de hypothese op dat ook ‘echte deeltjes’ zich als golven kunnen gedragen. Dat zou betekenen dat ook aan een deeltje een golflengte zou moeten worden toegekend, en de Broglie gokte dat de relatie dezelfde zou zijn als bij fotonen. De *de Broglie* golflengte van een deeltje met massa M en snelheid v , dus met impuls $p = Mv$, wordt daarmee

$$\lambda_B = \frac{h}{Mv} = \frac{2\pi \hbar}{p} . \quad (13)$$

Hoe echter kunnen we effecten van deze golflengte, en daarmee het golfkarakter, zien? Het antwoord ligt voor de hand: door een twee-spleten experiment! Technisch gezien is dit een formidabele opgave, omdat aan de ene kant electronen vanwege hun elektrische lading veel gemakkelijker door externe factoren beïnvloed kunnen worden (hetgeen het experiment kan verstoren), anderzijds voor electronen omdat ze massief zijn λ_B veel kleiner is dan voor fotonen, en daarmee de afstand tussen de spleten heel klein moet zijn. Men kan echter het kristalrooster van een metaal als een spleten-patroon zien, en electronen aan dit ‘veel-spleten’ experiment onderwerpen. Enkele jaren later lukte dit de Amerikanen Davisson en Germer, en de Engelsman George P. Thomson. Voor electronen is het golfkarakter daarmee aangetoond. Tegenwoordig worden dergelijke experimenten uitgevoerd met veel ingewikkelder systemen, zelfs met ‘Buckyballen’ (C_{60} en C_{70} moleculen).

We moeten echter wel opmerken dat de impuls van *stilstaande* deeltjes nul is, hetgeen $\lambda_B = \infty$ zou suggereren! Nu is er in de natuur altijd een grootheid met de dimensie van een snelheid voorhanden, namelijk c . We kunnen aan ieder deeltje dus nóg een golflengte toekennen, namelijk de *Compton golflengte*:

$$\lambda_C = \frac{h}{Mc} = \frac{2\pi \hbar}{Mc} . \quad (14)$$

Dit kan gezien worden als de ‘effectieve afmeting’ van een deeltje. Hierbij moeten we dit niet al te letterlijk nemen: de Compton golflengte van een electron, waarvan de massa $m_e = 9.10938188(72) \cdot 10^{-31}$ kg bedraagt, is $2.4263102175 \cdot 10^{-12}$ meter, dat wil zeggen honderden malen de werkelijke diameter van de atoomkern! In experimenten die trachten de feitelijke diameter van een electron te meten, vinden we tot nu toe dat deze kleiner is dan ongeveer 10^{-18} m, een paar duizend maal kleiner dan de kern-diameter.



Clinton J. Davisson (l),
1881-1958,
en Lester Germer,
1896-1971

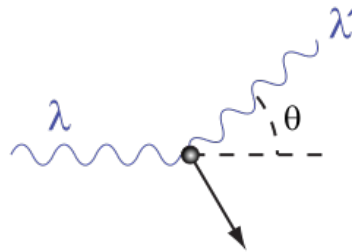


George Paget Thomson,
1892-1975

In Compton-vertrooiing komt het licht binnen met golflengte λ , en treedt onder een hoek θ uit met golflengte λ' . Compton ontdekte het verband

$$\lambda' - \lambda = \lambda_C (1 - \cos \theta)$$

waarbij $\lambda_C = h/(m_e c)$. De naam ‘Compton golflengte’ herinnert aan deze formule.



1.8 Het atoommodel van Bohr: kwantisatie

Het atoommodel van Bohr was het eerste succesvolle idee omtrent de substructuur van atomen, dat zowel de stabiliteit van het atoom als ook de spectraallijnen kwalitatief kon relateren aan principes van de quantummechanica, op een manier die wel ‘a mixture of artistry and effrontery’ genoemd is. We zullen hieronder deze afleiding geven, gebaseerd op een pervers mengsel van klassieke en quantummechanische ideeën.



Niels Henrik David Bohr,
1882 - 1962

Het simpelste atoommodel is dat van het chemische element waterstof. Dit eenvoudigste aller atomen bestaat uit één enkel proton, waaromheen één enkel electron draait. Omdat het proton zo’n 2000 keer zwaarder is dan het electron nemen we aan dat het proton zelf niet beweegt. Analoog aan het idee van een Newtoniaans planetenstelsel is er een aantrekkende kracht die het electron in zijn baan houdt, in dit geval niet de zwaartekracht maar de elektrische aantrekking tussen de tegengestelde ladingen van het proton en het electron. De totale dynamische energie²⁵ van het proton-electron systeem

²⁵Ik gebruik hier de term ‘dynamische energie’ ter onderscheiding van de ‘totale energie’, die immers via de relativiteitstheorie ook de rustmassa-energieën van electron en proton bevat. Omdat we het hier alleen over *energieverschillen* zullen hebben, zijn deze rustmassa-energieën niet relevant.

is daarmee

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi r} , \quad (15)$$

waar de eerste term de kinetische energie van het electron is, en de tweede term zijn potentiële energie in het elektrische veld van de kern. De snelheid van het electron is v , zijn afstand tot de kern (we nemen aan dat het electron in een cirkelbaan beweegt) is r , en e staat voor de lading van het electron in zgn. Gaussische eenheden. Omdat het electron een kracht ondervindt, wordt het voortdurend naar de kern toe versneld, en de eerste wet van Newton voor deze versnelling luidt

$$m_e \mathbf{a} = \frac{e^2}{4\pi r^2} , \quad (16)$$

waar \mathbf{a} de versnelling van het electron is, en het rechterlid van de vergelijking niets anders is dan de Coulombkracht die kan worden afgeleid uit vergelijking (15). Nu geldt voor een cirkelbaan

$$v = \omega r , \quad \mathbf{a} = \omega^2 r , \quad (17)$$

waarbij ω de *hoekfrequentie* is (zie boven). We kunnen nu vergelijking (16) gebruiken om te vinden dat

$$v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi m_e r}} . \quad (18)$$

Het electron in zijn baan heeft daarmee een de Broglie golflengte²⁶

$$\lambda_B = h \sqrt{\frac{4\pi r}{e^2 m_e}} , \quad (19)$$

en de cirkelbaan zelf heeft natuurlijk een omtrek

$$2\pi r .$$

Nu komt de beslissende stap: als het electron inderdaad een echte golf is, is deze golf op een cirkelbaan in zichzelf besloten. Dit kan echter alleen goed gaan als de golf niet zichzelf weg-interfereert. Daarom moet de golflengte λ_B precies een geheel aantal keren passen op de omtrek van de baan. We hebben daarmee een zogenaamde *quantisatie-conditie*:

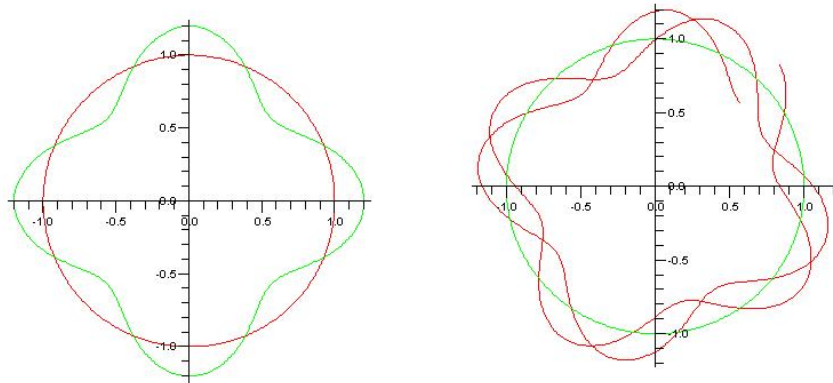
$$2\pi r = n \lambda_B , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (20)$$

²⁶Merk op hoe listig hier van klassieke naar quantummechanica wordt overgestapt...

We kunnen vergelijking (20) gebruiken om r te vinden:

$$r = \frac{n^2 \hbar^2}{\pi e^2 m_e} , \quad (21)$$

en dit ‘verklaart’ waarom het atoom stabiel is: het electron kan niet in willekeurige cirkelbanen bewegen, maar alleen in streng geselecteerde! Met name is er een ‘binnenste’ baan, voor $n = 1$. De baan van een electron dat geleidelijk naar de kern toe spiraalt zoals de klassieke wetten dat voorspellen, kan dankzij de kwantisatie-conditie niet optreden.



Weergave van de structuur van een golf met $n = 4$.

Voor $n = 4.2$ sluit de golf niet meer op zichzelf aan, en ‘kan dus niet bestaan’.

We kunnen ook de dynamische energie van het systeem berekenen, door het resultaat (21) in de energie-vergelijking (15) in te vullen. We vinden dan een energie die natuurlijk ook weer van het discrete getal n afhangt:

$$E = -\frac{1}{n^2} \frac{e^4 m_e}{8 \hbar^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2} . \quad (22)$$

Hierbij hebben we de electromagnetische *fijnconstante*²⁷ ingevoerd:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi \hbar c} \approx \frac{1}{137.03599976(50)} \quad (23)$$

²⁷Dat α een dimensieloos getal is, volgt direct uit een eenvoudige dimensionele analyse. De numerieke waarde van α is dus *onafhankelijk* van welk eenhedenstelsel dan ook. *Waarom* de waarde deze is, en niet een ander, is een van de grote nog onbeantwoorde vragen van de fundamentele fysica.

De energie is nu helemaal uitgedrukt in fundamentele, bekende grootheden! In feite zijn we meer geïnteresseerd in *energie-verschillen*: het idee is dat als het atoom een ‘quantsprong’ maakt²⁸ van een waarde n_1 voor n naar een andere waarde n_2 , het energieverval wordt goedgehaakt door het uitzenden of absorberen van een foton. De energie van de fotonen is daarmee bekend, en hangt van de twee quantumgetallen n_1 en n_2 af:

$$E_{\text{foton}} = \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \times 13.6 \text{ eV} . \quad (24)$$

We zien hier een hele verzameling spectraallijnen, de zgn. Rydberg-reeksen, die inderdaad in het spectrum van het waterstof-atoom worden aangetroffen bij precies die energieën.

Het atoommodel van Bohr, dat past binnen de traditie van wat wel de ‘oude quantummechanica’ wordt genoemd, was behoorlijk succesvol in het verklaren van atoomspectra. Ook de straal van de laagste baan, met $n = 1$:

$$a_0 \equiv \frac{h^2}{\pi m_e c^2} \approx 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (25)$$

komt goed overeen met de waargenomen afmeting van een waterstof-atoom in deze *grondtoestand*. Het Bohrse model heeft echter ook zijn tekortkomingen. Zo moet het waterstofatoom, als we het model serieus nemen, helemaal *plat* zijn, net als het zonnestelsel²⁹. Het mechanisme waarmee een electron dan wel van een baan in een andere komt tijdens het absorberen of uitzenden van licht, blijft ook duister. Voor grotere atomen met meerdere electronen zien we uit de spectra dat niet alle electronen in de energetisch meest gunstige baan ($n = 1$) zitten, en ook hiervoor geeft het Bohrse model geen verklaring³⁰.

²⁸Deze term wordt eigenlijk nergens meer gebruikt, maar aan het begin van de vorige eeuw was ze populair.

²⁹Voor atomen met meerdere electronen zouden we ons nog kunnen voorstellen dat hun banen onderling grote hoeken maken, en op die manier de kern met een soort bolvormig banen-netwerk omhullen: voor het waterstofatoom, met zijn een enkel electron, is dit geen optie.

³⁰De verklaring ligt in het feit dat electronen een intrinsiek draaimoment, de zgn. *spin*, hebben. Deze spin werd echter eerst later ontdekt.

1.9 Het twee-spleten experiment op de keper: quantum-interferentie

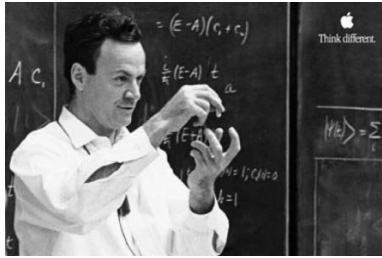
Als we een twee-spleten experiment uitvoeren maakt het in principe niet uit of we dit met fotonen of met andere deeltjes doen: immers, alle hebben ze het benodigde golfkarakter. We zullen ons dus tot fotonen beperken. Een bundel fotonen geeft in het experiment een interferentie-patroon: dit patroon wordt gevormd door de ‘inslagen’ van de fotonen. Waar veel fotonen terecht komen is het scherm licht, waar er weinig eindigen blijft het donkerder. Ieder foton echter komt op precies één plaats terecht. We kunnen misschien aannemen dat de fotonen in de bundel elkaar op een of andere manier beïnvloeden om de verdeling van de fotonen op het scherm te bewerkstelligen. Maar veronderstel nu dat we de bundel ijler en ijler maken, totdat er slechts één foton per seconde wordt afgevuurd. Als we maar lang genoeg wachten zal desalniettemin het interferentiepatroon worden opgebouwd³¹. De conclusie moet luiden dat elk deeltje ‘met zichzelf interfereert’! In een zekere zin gaat ieder foton of electron tegelijkertijd door elke spleet — een onhandige manier van uitdrukken, maar onze taal is nu eenmaal niet erg quantum-proof. Een bevestiging hiervan is het volgende: als we op welke manier dan ook informatie krijgen over door welke spleet precies het deeltje gaat³², verwijnt het interferentiepatroon onmiddellijk!

Een uitstekende animatie over deze verschijnselen is te vinden op <http://www.youtube.com/watch?v=DfPeprQ7oGc>

³¹In 1974 is dit ook voor electronen aangetoond door Pier Giorgio Merli en zijn medewerkers.

³²In het geval van electronen zou men dit kunnen doen door bv met een mageetje bij elke spleet het passeren van de lading waar te nemen.

1.10 Het twee-spleten experiment op de keper: pad-integralen



Richard Phillips Feynman,
1918 - 1988

We kunnen het twee-spleten experiment uitbreiden. Stellen we ons, met Richard P. Feynman, voor dat in het scherm geen twee maar bijvoorbeeld drie spleten zitten. We kunnen dan het interferentiepatroon weer bepalen, waarbij we nu rekening moeten houden met drie mogelijke paden van het foton (of ander deeltje). Het patroon zal er anders uitzien, maar wordt nog steeds gevormd door bijdragen van ieder pad op te tellen. Maken we in het scherm honderd

spleten, dan zijn er honderd mogelijke paden, waarvan de bijdragen moeten worden opgeteld. We kunnen nu *twee* schermen opstellen, ieder met honderd spleten. Het foton kan dan op honderd manier door het eerste scherm gaan, en op nogmaals honderd manieren door het tweede scherm: in totaal 10000 mogelijke paden. Plaatsen we honderd schermen met elk honderd spleten, dan zijn er 10^{200} mogelijke paden. Het kan nog veel erger: we kunnen besluiten *oneindig* veel schermen te gebruiken, elk met *oneindig* veel paden! Dit lijkt op het eerste gezicht erg ambitieus, maar als we inzien dat van een scherm waarin *oneindig* veel spleten uitgesneden zijn ieder molecuul verdwenen is, realiseren we ons dat het foton dus eigenlijk *door het gewone vacuum* beweegt! Ons ideale, ‘oneindig-maal-oneindig-veel-spleten’ experiment is niets anders dan de gewone manier waarop een deeltje beweegt — en deze manier om van een punt naar een ander punt te komen wordt dus beschreven door een som over *alle mogelijke paden*: een *pad-integraal*. Deze zienswijze heeft geleid tot een van de meest vruchtbare formuleringen van de relativistische quantumtheorie.

Een opmerking is hier aan de orde. De eerste wet van Newton zegt dat een deeltje waarop geen kracht werkt in een rechte lijn zal bewegen, met constante snelheid. De pad-integraal formulering ziet de beweging van het deeltje als ‘opgebouwd’ uit interferentie van alle mogelijke paden. Dit is slechts een schijnbare tegenspraak. Ook het ‘klassieke’ pad bevindt zich onder de verzameling van alle mogelijke paden. Als we mogelijke paden bekijken die slechts weinig van het klassieke pad afwijken (met bv. kleine zig-zag bewegingkjjes

om het klassieke pad heen), kunnen we vaststellen dat deze paden onderlinge constructieve interferentie hebben, dat wil zeggen elkaar versterken. Paden die duidelijk afwijken van het klassieke pad hebben destructieve interferentie, dat wil zeggen dat die bijdragen elkaar uitdoven. Op macroscopische schaal is de beweging van het deeltje dus niet van de klassieke, uniforme beweging te onderscheiden. Als we echter proberen de positie van het deeltje tijdens de beweging met microscopische precisie te bepalen, zullen we inderdaad afwijkingen van de klassieke beweging vinden, op basis van het onzekerheidsprincipe, waarover later (nog veel) meer.

2 Quantum-mechanische beschrijving van de natuur

We zullen nu een begin maken met het opzetten van een wiskundig formalisme dat poogt recht te doen aan de quantum-structuur van de werkelijkheid. De belangrijkste aspecten van dit formalisme zijn het begrip van een *toestand* als een fysische entiteit, het superpositie-beginsel, en de waarschijnlijkheidsinterpretatie van zulke superpositities.

2.1 Systemen, toestanden en hun ‘kets’

Evenals de klassieke fysica hanteert de quantummechanica het begrip ‘systeem’. Dit wordt geacht het aan onderzoek of waarneming onderworpen gedeelte van het universum te zijn. We kunnen denken aan een enkel subatomair deeltje als een systeem; anderzijds zijn een verzameling deeltjes ook een systeem; en in principe is zelfs een zo verregaand complexe verzameling van deeltjes en hun interacties als een kat ook een systeem. Belangrijk hierbij is de vooronderstelling dat, *op enig moment*, het mogelijk is dit systeem te zien als op zichzelf staand, dwz afgezonderd van de rest van het universum. Aan een ‘systeem’ kan dan een aantal *eigenschappen* worden toegekend, die in principe gemeten kunnen worden door het systeem waar te nemen, ofwel te *observeren*³³. In de klassieke fysica wordt het mogelijk gedacht een systeem te observeren zonder het op enigerlei wijze te beïnvloeden: de quantumfysica leert ons dat dit niet correct is, en dat elke observatie een zekere mate van wisselwerking tussen systeem en buitenwereld behelst.

Een (klassiek of quantum-)systeem kan in principe geheel beschreven worden door al zijn eigenschappen in een lijst weer te geven³⁴. Wij zullen de notie

³³We merken hierbij op dat de *daad van het waaremen* een of andere vorm van interactie tussen het systeem en de buitenwereld (waaronder de waarnemer!) veronderstelt, en dat daarmee de isolationistische positie van het systeem niet geheel ideaal is: in feite is het dit simpele feit dat de quantummechanica zo doet verschillen van de klassieke fysica!

³⁴Een interessant discussiepunt zou kunnen zijn of zo’n lijst überhaupt mogelijk is. Immers, het zou zo kunnen zijn dat een systeem een *oneindig* aantal eigenschappen heeft, elk waarvan informatie over het systeem geeft die niet in een van de andere eigenschappen vervat is. In dat geval is een lijst van eigenschappen niet haalbaar. In een diep opzicht is dit het standpunt van de klassieke fysica, die daarom ook zich niet baseert op zulke lijsten. In de quantummechanica is voor ieder systeem de lijst van eigenschappen in zekere zin

van een systeem als een lijst van zijn eigenschappen uitgebreid gebruiken, en noemen hem de *toestand* van het systeem. Een toestand wordt aangegeven door een zgn *ket*:

|lijst van bekende eigenschappen⟩

Als voorbeeld: als de ruimtelijke coördinaten x , y en z van een deeltje bekend zijn, zou de toestand kunnen worden weergegeven als

$$|x = \dots, y = \dots, z = \dots\rangle .$$

Als er twee deeltjes zijn, genummerd 1 en 2, en van het eerste deeltje is alleen de x -coördinaat bekend en van tweede deeltje alleen de energie E , zou de ket luiden

$$|x_1 = \dots, E_2 = \dots\rangle .$$

De inhoud van de door het symbool $| \ \rangle$ aangegeven ket is in principe willekeurig, haar betekenis wordt meestal geacht duidelijk te zijn uit de context van de beschrijving. Het moet echter benadrukt worden dat de ‘lijst van eigenschappen’ niet meer is dan dat, *een weergave van wat wij over het systeem weten*. Weten we meer over een systeem, dan is de lijst van eigenschappen navenant langer.



Paul Adrien
Maurice Dirac,
1902-1984
bedacht de ‘ket’
notatie, en meer!

Het moet benadrukt worden dat de inhoud van de ket onze *zekere* kennis over het systeem moet weergeven: als de positie van een deeltje als afstand van enige gekozen oorsprong met x wordt aangegeven, betekent de uitspraak ‘de toestand van het systeem is op dit moment $|x = 10 \text{ cm}\rangle$ ’ niet meer of minder dan ‘als de positie van het deeltje op dit moment zou worden gemeten, zou de uitkomst *met zekerheid* $x = 10 \text{ cm}$ bedragen’. De ‘ket’ notatie en zijn uitbreidingen zijn geïntroduceerd door P. Dirac. Zoals alle nuttige notaties verkrijgt zij haar waarde niet zozeer in de *definitie* maar in het *gebruik*.

eindig groot, hoewel ze natuurlijk zeer groot kan zijn voor een complex systeem waarvan (bijvoorbeeld) de positie van ieder deeltje gespecificeerd zou moeten worden.

2.2 Het superpositie-beginsel

Voor het gemak bezien we een systeem bestaand uit één enkel deeltje, en eveneens voor het gemak beperken we ons tot één ruimtelijke dimensie. Laat zoals tevoren de positie-coördinaat van het deeltje worden aangegeven door x . Laten we nu de twee volgende kets bekijken:

$$|\psi_1\rangle \equiv |x = x_1\rangle \quad \text{en} \quad |\psi_2\rangle \equiv |x = x_2\rangle \quad .$$

Deze beschrijven twee mogelijke toestanden van het systeem: het deeltje bevindt zich met zekerheid op coördinaat x_1 als het in de toestand $|\psi_1\rangle$ is, en even zo zeker op coördinaat x_2 als het in de toestand $|\psi_2\rangle$ is³⁵. Als er geen kans op verwarring bestaat, kunnen we $|x = x_1\rangle$ ook simpelweg aangeven met $|x_1\rangle$, enzovoorts.

Laat ons voor het moment aannemen dat de waarden x_1 en x_2 de enig mogelijke posities zijn waarop het deeltje mogelijkwijs zou kunnen worden aangetroffen. In de klassieke fysica is de situatie dan betrekkelijk eenvoudig: het deeltje bevindt zich *ofwel* bij $x = x_1$, *ofwel* bij $x = x_2$, en de toestand van het systeem is dus óf $|\psi_1\rangle$, óf $|\psi_2\rangle$.

In de quantummechanica is de situatie minder dichotoom: het *superpositie-beginsel* van de quantummechanica stelt dat **als $|\psi_1\rangle$ en $|\psi_2\rangle$ mogelijke toestanden van een systeem zijn, dan is de *superpositie***

$$|\psi\rangle = z_1|\psi_1\rangle + z_2|\psi_2\rangle \tag{26}$$

eveneens een toestand waarin het systeem zich mogelijkwijs kan bevinden. Hierbij zijn z_1 en z_2 complexe getallen³⁶ die in principe alle complexe waarden kunnen aannemen, met uitzondering van het geval waarin zowel z_1 als z_2 gelijk aan nul zijn. De situatie $z_1 = z_2 = 0$ zou opleveren $|\psi\rangle = 0$, en zo'n toestand wordt niet geacht een echte toestand te zijn.

We zien dat waar in de klassieke fysica de kets, hoewel mogelijk, niet meer zijn dan een intellectueel ogende beschrijving van de bekende eigenschappen van een systeem, zij in de quantummechanica een echt wiskundige en daarmee ook fysische rol krijgen: de kets zijn echt deelnemers aan het spel

³⁵Een opmerking over de status van de verschillende symbolen: x staat voor de positie van het deeltje als abstracte, in principe meetbare *grootheid*, een zogenaamde *observeerbare*. De symbolen x_1 en x_2 staan voor concrete *numerieke waarden* van deze grootheid.

³⁶Een beknopte inleiding in de complexe getallen wordt gegeven in paragraaf 7.2 van de Appendix.

van de werkelijkheid.

Een uitbreiding van het bovenstaande ligt uiteraard voor de hand: als $x_1, x_2, x_3, \dots, x_N$ mogelijke uitkomsten voor de positie x zijn, dan is de meest algemene quantum-toestand van het systeem gegeven door

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= z_1|x_1\rangle + z_2|x_2\rangle + z_3|x_3\rangle + \dots + z_N|x_N\rangle \\ &\equiv \sum_{n=1}^N z_n|x_n\rangle \quad , \end{aligned} \quad (27)$$

waarbij $z_{1,2,3,\dots,N}$ complexe getallen zijn met uitzondering van het geval $z_1 = z_2 = z_3 = \dots = z_N = 0$.

2.3 De interpretatie van superposities

Het bovenstaande superpositie-beginsel gegeven zijnde, blijven we natuurlijk zitten met een vraag: als de toestand van het systeem gegeven wordt door

$$|\psi\rangle = z_1|x_1\rangle + z_2|x_2\rangle \quad , \quad (28)$$

wat vinden we dan als we de positie x van het deeltje meten? Het resultaat kan dan niet met zekerheid x_1 zijn, want in dat geval zou de systeemtoestand $|x_1\rangle$ zijn en niet $|\psi\rangle$: evenzo kan het resultaat niet met zekerheid x_2 zijn. De interpretatie die de quantummechanica geeft aan de toestand $|\psi\rangle$ is dat het resultaat van een meting van x aan het systeem de waarde x_1 geeft met *onzekerheid*, en ook de waarde x_2 met *onzekerheid*! Voor een deeltje in toestand $|\psi\rangle$ bestaat er een zekere *kans* om het deeltje bij x_1 aan te treffen, en een *kans* om het bij x_2 aan te treffen. Het ligt voor de hand dat de betreffende kansen worden bepaald door de coëfficiënten z_1 en z_2 . Nu moeten kansen reële getallen zijn tussen 0 en 1, terwijl de coëfficiënten $z_{1,2}$ complexe getallen zijn. De quantummechanica stelt dat de kans om $x = x_1$ te vinden, die we zullen schrijven als $P(x = x_1)$ of, als er geen kans op verwarring bestaat, als $P(x_1)$, wordt gegeven door

$$P(x_1) = \frac{|z_1|^2}{|z_1|^2 + |z_2|^2} \quad , \quad (29)$$

en de kans op $x = x_2$ door

$$P(x_2) = \frac{|z_2|^2}{|z_1|^2 + |z_2|^2} \quad , \quad (30)$$

Dat dit een in principe acceptabel standpunt is kunnen we zien aan

$$P(x_1) \geq 0 \quad , \quad P(x_2) \geq 0 \quad , \quad P(x_1) + P(x_2) = 1 \quad . \quad (31)$$

Het laatste stelt dat het deeltje met zekerheid bij x_1 óf x_2 wordt aangetroffen, wat redelijk is als deze twee posities de enig mogelijke uitkomsten zijn. We zien ook dat het geval $z_1 = z_2 = 0$ inderdaad vermeden moet worden. Het is gebruikelijk om de coëfficiënten z zo te kiezen dat $|z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$: in dat geval spreken we van een *genormeerde* fysische toestand. In dat geval zijn de kansen $P(x_1) = |z_1|^2$ en $P(x_2) = |z_2|^2$. Uiteraard geldt in het meer algemene geval beschreven in vgl.(27) dat de fysische toestand genormeerd is als

$$|z_1|^2 + |z_2|^2 + |z_3|^2 + \dots + |z_N|^2 = 1 \quad .$$

We kunnen een aantal zaken opmerken aan deze interpretatie. In de eerste plaats moeten de toestanden $|x_1\rangle$ en $z_1|x_1\rangle$ dezelfde fysische toestand beschrijven omdat in beide gevallen het deeltje met zekerheid bij x_1 gevonden zal worden. Met andere woorden, het vermenigvuldigen van een ket met een complex getal (niet nul!) verandert niets aan de fysica van het systeem. In de tweede plaats zal de keuze $z_1 = 1, z_2 = 0$ enerzijds leiden tot $|\psi\rangle = |x_1\rangle$, en anderzijds tot $P(x_1) = 1, P(x_2) = 0$, wat precies consistent is.

In het geval van de meer algemene toestand gaat de kans-interpretatie analoog: als de toestand gegeven wordt door

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N z_n |x_n\rangle \quad , \quad \sum_{n=1}^N |z_n|^2 = 1 \quad , \quad (32)$$

dan is de kans om het deeltje bij x_k aan te treffen (waarbij k een van de indices $1, 2, \dots, N$ is) gegeven door

$$P(x = x_k) = P(x_k) = |z_k|^2 \quad . \quad (33)$$

De kans om het deeltje aan te treffen op x_k óf x_m wordt dan gegeven door

$$P(x = x_k \text{ of } x = x_m) = P(x_k) + P(x_m) = |z_k|^2 + |z_m|^2 \quad ,$$

in overeenstemming met wat voor kansen gebruikelijk is.

Tenslotte merken we op dat het feit dat wij ons op positie als observabele hebben geconcentreerd, evenals de restrictie tot één ruimtelijke dimensie, in feite irrelevant zijn: het superpositie-beginsel en zijn kans-interpretatie gelden voor willekeurige quantumtoestanden.

2.4 Het ‘meetprobleem’

Het bovenstaande moge enigzins vreemd overkomen. Laten we ons echter wel realiseren dat, enerzijds, het superpositie-beginsel de quantummechanica ‘milder’ maakt dan de klassieke fysica omdat het een of-of situatie verzacht tot een en-en situatie; en dat anderzijds alle waarnemingen tot op heden de quantummechanica bevestigen, zodat dit echt de manier lijkt te zijn waarop ons universum functioneert. Indien wij dit aanvaarden komen we echter tot een verrassende gevolgtrekking!

Laten we weer een ééndimensionaal systeem van een enkel deeltje beschouwen, in de quantumtoestand

$$|\psi\rangle = z_1|x_1\rangle + z_2|x_2\rangle$$

als boven beschreven. Veronderstel dat we nu daadwerkelijk de positie van het deeltje meten, en dat (bijvoorbeeld) $x = x_1$ wordt gevonden. Stellen wij ons nu voor dat we de positie-meting *onmiddellijk* herhalen, dat wil zeggen zo snel na de eerste meting dat geen macht ter wereld het deeltje al heeft kunnen doen bewegen van zijn plaats. Het resultaat van deze tweede meting is dan natuurlijk al van te voren bekend: de tweede meting zou zeker ook $x = x_1$ opleveren. Maar dit betekent dat, zelfs als wij van deze tweede meting afzien, het systeem nu in een andere toestand is, namelijk niet $|\psi\rangle$ maar $|x_1\rangle$! De conclusie is onontkoombaar: **het feit dat wij kennis omtrent het systeem hebben verkregen (in dit geval dat $x = x_1$) heeft de quantumtoestand van het systeem veranderd.** Waarnemer en het waargenomene zijn met elkaar verstrengeld op een manier die in de klassieke fysica niet voorkomt: in het klassieke wereldbeeld is het in principe mogelijk een systeem te observeren zonder het te verstoren, in de quantummechanica niet³⁷.

Het bovenstaande verschijnsel gaat gebukt onder romantische namen als ‘het instorten van de golffunctie’, en ‘het meetprobleem’. Wat precies het mechanisme is dat de quantumtoestand doet verkeren van $|\psi\rangle$ in $|x_1\rangle$ is niet geheel duidelijk, en generaties natuurkundigen zijn in dit zwarte gat van de quantum-theorie verdwenen³⁸. Wel moet er op gewezen worden dat juist op

³⁷Behalve natuurlijk indien $|\psi\rangle$ toevalligerwijze al gelijk was aan $|x_1\rangle$. Meting van een eigenschap aan een systeem waarvan de waarde van die eigenschap reeds bekend is, verstoort het systeem niet.

³⁸In het natuurkundigen-wereldje wordt, wanneer iemand aankondigt zich te gaan

het moment van waarneming de scheidslijn tussen het systeem en de rest van het universum *moet* verdwijnen, zodat een beschrijving van het proces van waarnemen die zich alleen concentreert op het systeem wel tekort *moet* schieten.

2.5 Geconjugeerde toestanden en ‘bras’

We hebben gezien hoe in de quantummechanica de kets een werkelijk eigen rol hebben die ze in de klassieke fysica niet bezitten³⁹. Hieraan voegen we nog een extra eigenschap van kets toe: **voor elke ket bestaat er een *bra***. Een bra wordt gezien als de *geconjugeerde* van zijn ket, en omgekeerd. We geven een bra aan met het omgekeerde symbool als dat van een ket:

$$\text{ket is } |\psi\rangle \Leftrightarrow \text{bra is } \langle\psi| .$$

Voor superposities geldt:

$$\begin{aligned} \text{als } & |\psi\rangle = z_1|x_1\rangle + z_2|x_2\rangle \\ \text{dan is } & \langle\psi| = z_1^*\langle x_1| + z_2^*\langle x_2| . \end{aligned} \tag{34}$$

Merk op dat de coëfficiënten complex geconjugerd worden! Het moge duidelijk zijn dat de verzameling van alle mogelijke kets van een systeem precies dezelfde informatie bevat als die van alle mogelijke bras. De *fysische* inhoud van een bra is precies dezelfde als die van zijn ket wat betreft het resultaat van een eventuele waarneming op het systeem. Wat nu precies het nut is van het introduceren van bras zullen we hieronder zien.

bezighouden met het meetprobleem, dit als een omineuze beslissing gezien. Dit laat onverlet dat wel degelijk voortgang op dit terrein wordt geboekt — waarmee wij ons in deze colleges verder niet zullen bezighouden.

³⁹Het gebruik van kets is in de klassieke fysica dan ook zo goed als afwezig, aangezien het niet enig duidelijk voordeel oplevert. Overigens moet worden opgemerkt dat bijvoorbeeld in de deeltjes-fysica het resultaat van een waargenomen botsing in een deeltjes-versneller geformuleerd en *opgeslagen* wordt als precies een lijst van de deeltjes die werden waargenomen, met hun snelheden en energieën: dit is in feite een ket, die zo precies mogelijk de *eind-toestand* van het proces beschrijft.

2.6 Het ‘inwendig product’ van toestanden

Van een ket $|\psi_1\rangle$ en een bra $\langle\psi_2|$ kunnen we een zogenaamd *inwendig product* vormen. Dit wordt aangegeven met een *bracket*⁴⁰, aangegeven met

$$\text{ket } |\psi_1\rangle \text{ en bra } \langle\psi_2| \Rightarrow \text{bracket } \langle\psi_2|\psi_1\rangle$$

De notie van inwendig product komt in de wiskunde en theoretische natuurkunde bijzonder veel voor. De verzameling van alle kets, met hun bras en voorzien van een inwendig product wordt een *lineaire vector-ruimte* genoemd⁴¹, en in de quantummechanica spreken we ook wel van een *Hilbert-ruimte*. Het werken met kets, bras en brackets heet *lineaire algebra*.

Laten we wat dieper ingaan op hoe inwendige producten geacht worden te werken. In de eerste plaats is een bracket een (complex) *getal*, dat uiteraard van de elementen van de bracket afhangt. Een bracket is dus géén toestand! Het is het resultaat van een *bewerking* op toestanden.

In de tweede plaats is de bracket van een ket met zichzelf (of liever gezegd zijn eigen bra) altijd minstens nul:

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0 . \quad (35)$$

Een bracket van een ket met zichzelf is alleen nul als de toestand zelf nul is (dus niet echt een toestand):

$$\langle\psi|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0 . \quad (36)$$

Ten derde levert het ‘omkeren’ van de bracket een complexe conjugatie op:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \left(\langle\psi_2|\psi_1\rangle\right)^* . \quad (37)$$

Ten vierde zijn brackets *lineair*. We zullen dit verduidelijken. Bezien we twee fysische toestanden, beide gegeven door kets, die (eventueel) superposities van eenvoudiger toestanden zijn:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= z_1|\mathbf{a}_1\rangle + z_2|\mathbf{a}_2\rangle , \\ |\psi_2\rangle &= y_1|\mathbf{b}_1\rangle + y_2|\mathbf{b}_2\rangle . \end{aligned} \quad (38)$$

⁴⁰Dit verklaart de ongewone benamingen, en geeft eveneens een idee van het soort humor dat sommige natuurkundigen aanspreekt...

⁴¹In dit geval een *complexe* lineaire vector-ruimte, om precies te zijn: de benaming ‘lineair’ duidt op het feit dat een superpositie ook wel een *lineaire combinatie* wordt genoemd.

Hier zijn $z_{1,2}$ en $y_{1,2}$ complexe getallen. De kets $|\mathbf{a}_{1,2}\rangle$ en $|\mathbf{b}_{1,2}\rangle$ staan voor fysische toestanden beschreven (voor $|\psi_1\rangle$) door de waarden van de (abstracte) eigenschap \mathbf{a} , en (voor $|\psi_2\rangle$) door de waarden van de eigenschap \mathbf{b} . We kunnen bijvoorbeeld voor zowel \mathbf{a} als \mathbf{b} de positie van een deeltje nemen, maar \mathbf{a} en \mathbf{b} kunnen gerust ook naar verschillende eigenschappen verwijzen; bijvoorbeeld, \mathbf{a} kan verwijzen naar de positie van een deeltje, en \mathbf{b} naar de snelheid van het deeltje. Voor beide toestanden hebben we een superpositie van twee kets genomen, maar uiteraard kan dit direct gegeneraliseerd worden naar meer algemene superposities. Van de ket ψ_1 kunnen we de bra $\langle\psi_1|$ vormen:

$$\langle\psi_1| = z_1^* \langle\mathbf{a}_1| + z_2^* \langle\mathbf{a}_2| \quad , \quad (39)$$

als boven. De bracket wordt dan gegeven door

$$\begin{aligned} \langle\psi_1|\psi_2\rangle &= (z_1^* \langle\mathbf{a}_1| + z_2^* \langle\mathbf{a}_2|) (y_1 |\mathbf{b}_1\rangle + y_2 |\mathbf{b}_2\rangle) \\ &= (z_1^* y_1) \langle\mathbf{a}_1|\mathbf{b}_1\rangle + (z_2^* y_1) \langle\mathbf{a}_2|\mathbf{b}_1\rangle \\ &\quad + (z_1^* y_2) \langle\mathbf{a}_1|\mathbf{b}_2\rangle + (z_2^* y_2) \langle\mathbf{a}_2|\mathbf{b}_2\rangle \quad . \end{aligned} \quad (40)$$

We kunnen natuurlijk alleen echt met brackets werken als we in staat zijn ook werkelijk bekende getallen aan genoeg brackets toe te kennen: is hieraan voldaan, dan kunnen we ook voor brackets van superposities de waarden berekenen. Als een fysische toestand $|\omega\rangle$ genormeerd is betekent dit

$$\langle\omega|\omega\rangle = 1 \quad . \quad (41)$$

Laten we nu eens twee mogelijke fysische toestanden van een systeem (voor het gemak weer een enkel deeltje) bekijken. Noem deze toestanden $|\xi_1\rangle$ en $|\xi_2\rangle$. Bedenk dat ξ_1 en ξ_2 lijsten voorstellen van eigenschappen waarvan we zeker weten wat de waarde zal zijn bij meting aan het systeem. Als het nu het geval is dat vaststaat dat de twee lijsten incompatibel zijn, dat wil zeggen dat een systeem dat voldoet aan de lijst ξ_1 *zeker niet* kan voldoen aan de lijst ξ_2 , dan heten de kets *orthogonaal* en is hun inwendig product gelijk aan nul:

$$\langle\xi_1|\xi_2\rangle = 0 \quad . \quad (42)$$

Lijsten hoeven niet incompatibel te zijn: als bijvoorbeeld ξ_1 zegt dat het deeltje met zekerheid een bepaalde waarde van zijn positie langs de x -as heeft, en ξ_2 zegt dat het met zekerheid een bepaalde waarde van de snelheid langs de y -as heeft, hoeft dit elkaar niet uit te sluiten, en is het inwendig

product niet per se gelijk aan nul.

We zullen een en ander toelichten aan de hand van ons eerste voorbeeld, een superpositie van twee mogelijke posities langs de x-as. De ket was

$$|\psi\rangle = z_1|x_1\rangle + z_2|x_2\rangle . \quad (43)$$

De toestanden $|x_1\rangle$ en $|x_2\rangle$ verwijzen naar genormeerde fysische toestanden waarin het deeltje met zekerheid op positie x_1 , respectievelijk x_2 is. Dan weten we dat

$$\langle x_1|x_1\rangle = \langle x_2|x_2\rangle = 1 \quad , \quad \langle x_1|x_2\rangle = \langle x_2|x_1\rangle = 0 . \quad (44)$$

De bracket van $|\psi\rangle$ met zichzelf kunnen we nu berekenen:

$$\begin{aligned} \langle \psi|\psi\rangle &= z_1^*z_1\langle x_1|x_1\rangle + z_1^*z_2\langle x_1|x_2\rangle + z_2^*z_1\langle x_2|x_1\rangle + z_2^*z_2\langle x_2|x_2\rangle \\ &= |z_1|^2\langle x_1|x_1\rangle + |z_2|^2\langle x_2|x_2\rangle \\ &= |z_1|^2 + |z_2|^2 . \end{aligned} \quad (45)$$

We zien dat $|\psi\rangle$ een genormeerde fysische toestand is als $|z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$. Inwendige producten stellen ons in staat een superpositie te ‘ontleden’: zo vinden we in ons geval dat

$$\langle x_1|\psi\rangle = z_1\langle x_1|x_1\rangle + z_2\langle x_1|x_2\rangle = z_1 , \quad (46)$$

en analoog voor z_2 . Omdat in ons geval de *kans* om het deeltje bij x_1 te vinden gelijk was aan $|z_1|^2$, kunnen we dus ook schrijven

$$P(x = x_1) = |\langle x_1|\psi\rangle|^2 . \quad (47)$$

Het inwendig product $\langle x_1|\psi\rangle$ wordt om voor de hand liggende redenen ook we de *overlap* van toestand $|\psi\rangle$ met toestand $|x_1\rangle$ genoemd. In meer algemene termen zeggen we: *als het systeem in toestand $|\xi_1\rangle$ is is de kans om het systeem bij meting in toestand $|\xi_2\rangle$ aan te treffen gelijk aan $|\langle \xi_1|\xi_2\rangle|^2$* . De kans is dus gelijk aan het absolute kwadraat van de overlap. De overlap wordt ook wel met *amplitude* aangeduid: het nut van deze benaming zal duidelijk worden als we ons zullen buigen over de *golffunctie* van een deeltje.

2.7 Samenvatting

We zijn nu begonnen een wiskundig fundament voor de quantummechanica te ontwikkelen. De kets beschrijven wat we van een systeem kunnen weten; lineaire combinaties van kets zijn weer andere kets; samen met de bras en het inwendig product geeft dit de structuur van een Hilbertruimte. We hebben aangewezen hoe kansen op bepaalde waarnemingen in dit formalisme hun plaats vinden, als kwadraten van opverlaps tussen toestanden. Wat ons nog ontbreekt is een wiskundige beschrijving van de manier waarop de gemeten grootheden zélf in de theorie passen. Dit is het onderwerp van het volgende hoofdstuk.

3 Observabelen

3.1 Het doen van een meting met resultaat

We zullen het concept van een *meetbare* grootheid gaan vormen binnen de wiskundige context van de quantummechanica. Hierbij moeten we een aantal zaken in de gaten houden.

In de eerste plaats moet het zo zijn dat het proces van het *meten* van een eigenschap van een systeem in de een of andere *toestand* iets is dat informatie aan het systeem onttrekt, maar daarna het systeem weer achterlaat — in de een of andere *toestand*.

In de tweede plaats hebben we gezien dat het meten/waarnemen van de waarde van een eigenschap de toestand van het systeem verandert, en wel op zo'n manier dat het systeem daarna in de toestand is waarin de waarde van de eigenschap *met zekerheid* vastligt.

In de derde plaats moeten we bedenken dat het pure idee van ‘een meting’ misschien minder fundamenteel is dan het idee van een meting *met een resultaat*.

In de quantummechanica pakken we het invoeren van een meetbegrip als hierboven beschreven als volgt aan. Laat ons ons concentreren op een bepaalde meetbare eigenschap, die we A zullen noemen (denk hierbij weer aan zaken als positie, snelheid, energie, enzovoorts). Laat de *mogelijke* waarden van deze eigenschap gegeven worden door de set⁴² $\{a_1, a_2, a_3, \dots, a_N\}$. Dit betekent dat het systeem dat we behandelen een aantal mogelijke toestanden *moet* kennen:

$$|A = a_1\rangle, |A = a_2\rangle, \dots |A = a_N\rangle \quad , \text{ ofwel } |a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_N\rangle \quad ,$$

waarin de waarde van A met zekerheid vastligt. Laat ons nu bezien hoe we de *operatie* ‘meting van A met als resultaat $A = a_1$ kunnen representeren. We zullen dit als volgt doen:

$$\hat{A}(a_1) \equiv (\text{meting van } A \text{ met resultaat } A = a_1) \equiv a_1 |a_1\rangle\langle a_1| \quad . \quad (48)$$

⁴²Op deze plek nemen we aan dat de mogelijke waarden *discreet* zijn, en ook dat er *eindig veel* mogelijke waarden zijn. Voor eigenschappen als positie en dergelijke zijn we meer geneigd aan te nemen dat er *oneindig veel* mogelijke uitkomsten zijn, die *continu* verdeeld zijn. Het onderscheid tussen de behandeling van deze gevallen is eigenlijk zuiver technisch en we zullen er ons in deze aantekeningen dan ook niet al te veel zorgen over maken, met uitzondering van een later te behandelen opmerking over de *nauwkeurigheid* waarmee continue waarden gemeten kunnen worden.

Dit is een *operator* die, precies in de zin van het bovenbehandelde inwendig product, de feitelijke toestand van het systeem vermenigvuldigt. Voor de goede orde wijzen we nogmaals op de betekenis van de drievoudig voorkomende \mathbf{a}_1 in het rechterlid. In de ket $|\mathbf{a}_1\rangle$ en de bra $\langle\mathbf{a}_1|$ betekent \mathbf{a}_1 slechts een *aanduiding*, namelijk ‘ $\mathbf{A} = \mathbf{a}_1$ ’. De *coëfficiënt* \mathbf{a}_1 die ervoor staat is werkelijk het *numerieke getal* \mathbf{a}_1 . Dat de bovenstaande definitie zinvol is kunnen we op de volgende manier zien.

In de eerste plaats, stel dat het systeem zich in toestand $|\psi\rangle = |\mathbf{a}_1\rangle$ bevindt. Dan is de werking van de operatie $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{a}_1)$ op de toestand van het systeem

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{a}_1) |\psi\rangle &= \mathbf{a}_1 |\mathbf{a}_1\rangle \langle\mathbf{a}_1| |\psi\rangle = \mathbf{a}_1 |\mathbf{a}_1\rangle \langle\mathbf{a}_1|\psi\rangle \\ &= \mathbf{a}_1 |\mathbf{a}_1\rangle \langle\mathbf{a}_1|\mathbf{a}_1\rangle = \mathbf{a}_1 |\mathbf{a}_1\rangle \quad ,\end{aligned}\tag{49}$$

omdat $|\mathbf{a}_1\rangle$ een genormeerde fysische toestand moet zijn, dus $\langle\mathbf{a}_1|\mathbf{a}_1\rangle = 1$. Het resultaat van de operatie is dat het systeem in toestand $|\mathbf{a}_1\rangle$ blijft.

In de tweede plaats, stel dat het systeem weliswaar in een toestand is waarin het meetresultaat met zekerheid vastligt, doch niet op de waarde \mathbf{a}_1 , maar (laten we zeggen) de waarde \mathbf{a}_2 . De toestand is dan $|\psi\rangle = |\mathbf{a}_2\rangle$, en de werking van de operatie geeft

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{a}_1) = \mathbf{a}_1 |\mathbf{a}_1\rangle \langle\mathbf{a}_1| |\mathbf{a}_2\rangle = \mathbf{a}_1 |\mathbf{a}_1\rangle \langle\mathbf{a}_1|\mathbf{a}_2\rangle = 0 \quad ,\tag{50}$$

omdat het inwendig product van $\langle\mathbf{a}_1|$ en $|\mathbf{a}_2\rangle$ nul is. We vatten dit samen door te zeggen dat deze meting, met resultaat \mathbf{a}_1 , *niet kan voorkomen* als het systeem in de ‘verkeerde’ toestand is. Uiteraard zal de operatie $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{a}_2)$, de ‘meting met als resultaat $\mathbf{A} = \mathbf{a}_2$ ’, *wel* succesvol zijn in dit geval.

Ten derde, laat het systeem in een superpositie van toestanden zijn:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N z_k |\mathbf{a}_k\rangle \quad .\tag{51}$$

we kunnen nu onmiddellijk inzien dat

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{a}_1) |\psi\rangle = z_1 \mathbf{a}_1 |\mathbf{a}_1\rangle \quad ,\tag{52}$$

omdat het enige inwendig product dat niet nul geeft het product met de component $|\mathbf{a}_1\rangle$ van $|\psi\rangle$ is. We zien hier ons tegen-intuïtieve resultaat terug: wat de oorspronkelijke toestand van het systeem ook zij, *als* de meting van

de grootheid A resulteert in de waarde \mathbf{a}_1 , *dan* is het systeem nadien in de toestand $|\mathbf{a}_1\rangle$.

Het is eenvoudig in te zien dat de de operatie $\hat{A}(\mathbf{a}_1)$ niet alleen ‘van links’ kunnen uitvoeren op *kets*, maar ook ‘van rechts’ op *bras*: bijvoorbeeld, voor de algemene superpositie die we het laatst gebruikten:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A}(\mathbf{a}_1) &= \left(\sum_{k=1}^N z_k^* \langle \mathbf{a}_k | \right) |\mathbf{a}_1\rangle \langle \mathbf{a}_1 | \mathbf{a}_1 \\ &= \sum_{k=1}^N z_k^* \mathbf{a}_1 \delta_{k,1} \langle \mathbf{a}_1 | \\ &= z_1^* \mathbf{a}_1 \langle \mathbf{a}_1 | \mathbf{a}_1 \rangle \langle \mathbf{a}_1 | = z_1^* \mathbf{a}_1 \langle \mathbf{a}_1 | , \end{aligned} \quad (53)$$

wederom omdat alle andere inwendige producten nul zijn. Dit wordt aangegeven met de *Kronecker delta*, waarover meer in sectie 7.4. De oorspronkelijke bra $\langle \psi |$ gaat weer over in $\langle \mathbf{a}_1 |$.

Eén ding wat nog niet verklaard is is de noodzakelijkheid van de coëfficiënt \mathbf{a}_1 , met andere woorden, de reden dat we $\hat{A}(\mathbf{a}_1) = \mathbf{a}_1 |\mathbf{a}_1\rangle \langle \mathbf{a}_1 |$ kiezen en niet simpelweg $\hat{A}(\mathbf{a}_1) = |\mathbf{a}_1\rangle \langle \mathbf{a}_1 |$. Dit zal later duidelijk worden.

3.2 Observabelen, operatoren en eigentoestanden

Tot zover hebben we ons beziggehouden met de idee van een meting met een bepaald resultaat. Hoe zit het met een meer algemene meting? Het antwoord is simpel: we tellen gewoon alle metingen-met-gegeven-resultaat bij elkaar op. We geven dit aan met

$$\hat{A} \equiv \sum_{k=1}^N \hat{A}(\mathbf{a}_k) = \sum_{k=1}^N \mathbf{a}_k |\mathbf{a}_k\rangle \langle \mathbf{a}_k| . \quad (54)$$

In het vervolg zullen we de meer algemene operator \hat{A} bekijken, en ons niet langer met operatoren als $\hat{A}(\mathbf{a}_k)$ bezighouden. Op dit punt leggen we wat taalgebruik vast. De *fysische* grootheid A , die aan een bepaald systeem gemeten kan worden, noemen we een *observabele* van dat systeem. De corresponderende *operator* \hat{A} is een *wiskundige* constructie die de grootheid A representeert.

We zouden natuurlijk ook geïnteresseerd kunnen raken in niet A zelf, maar een of andere *functie* van de grootte A , bijvoorbeeld A^2 . In dat geval kunnen we het enerzijds eenvoudig aanpakken: we meten de waarde \mathbf{a} van A , en daarna kwadrateren we deze tot \mathbf{a}^2 . Aan de andere kant is A^2 natuurlijk ook een observabele, en moet zijn eigen operator hebben. Gelukkig is dit consistent, omdat we kunnen vinden

$$\begin{aligned}
(\hat{A})^2 &= \left(\sum_{j=1}^N \mathbf{a}_j |\mathbf{a}_j\rangle \langle \mathbf{a}_j| \right) \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{a}_k |\mathbf{a}_k\rangle \langle \mathbf{a}_k| \right) \\
&= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \mathbf{a}_j \mathbf{a}_k |\mathbf{a}_j\rangle \langle \mathbf{a}_j | \mathbf{a}_k\rangle \langle \mathbf{a}_k| \\
&= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \mathbf{a}_j \mathbf{a}_k |\mathbf{a}_j\rangle \delta_{j,k} \langle \mathbf{a}_k| \\
&= \sum_{k=1}^N \mathbf{a}_k^2 |\mathbf{a}_k\rangle \langle \mathbf{a}_k| . \tag{55}
\end{aligned}$$

Merk op hoe handig de Kronecker delta hier van pas komt. We vinden dus dat de operator behorende bij de observabele A^2 gegeven wordt door \hat{A}^2 . In het algemeen kunnen we zeggen: de operator behorende bij de observabele $F(A)$ wordt gegeven door $F(\hat{A})$.

Een ander handig begrip is het volgende. Laten we de operator \hat{A} laten werken op een toestand met wel-bepaalde⁴³ waarde van A , bijvoorbeeld $|\mathbf{a}_n\rangle$. We vinden

$$\begin{aligned}
\hat{A} |\mathbf{a}_n\rangle &= \left(\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{a}_{\mathbf{k}} |\mathbf{a}_{\mathbf{k}}\rangle \langle \mathbf{a}_{\mathbf{k}}| \right) |\mathbf{a}_n\rangle \\
&= \sum_{k=1}^N \mathbf{a}_k |\mathbf{a}_k\rangle \delta_{k,n} = \mathbf{a}_n |\mathbf{a}_n\rangle . \tag{56}
\end{aligned}$$

In dit geval geeft de operator, toegepast op een toestand, eenvoudig een veelvoud van de toestand terug. We noemen de toestand $|\mathbf{a}_n\rangle$ een *eigen-toestand* van de operator \hat{A} , en het getal waarmee deze onder de operatie vermenigvuldigd wordt (in dit geval het getal \mathbf{a}_n) de *eigenwaarde*. Het komt

⁴³Met wel-bepaald bedoelen we dat de meetuitkomst *met zekerheid* vast ligt, zoals in het voorgaande besproken.

regelmatig voor dat de operator \hat{A} gegeven is, zonder dat de eigentoestanden bekend zijn. Het *vinden* van de eigentoestanden, en van de bijbehorende eigenwaarden, is dan een belangrijke stap op weg naar het quantummechanische begrip van het systeem.

3.3 Hermitische operatoren



Charles Hermite,
1822-1901

We keren nog eenmaal terug naar het verband tussen kets en bras: deze zijn verbonden door wat *Hermitische conjugatie* wordt genoemd. Deze conjugatie voert kets over in bras, en omgekeerd, en kent aan ieder complex getal zijn complex geconjugeerde toe. Als nu de mogelijke meetwaarden van een observabele *reële* getallen zijn, dan is de Hermitisch geconjugeerde van de observabele-operator gelijk aan zichzelf: als we de conjugatie met het symbool \dagger aangeven, is

$$(\hat{A})^\dagger = \sum_k (\mathbf{a}_k)^\dagger \left(|\mathbf{a}_k\rangle\langle\mathbf{a}_k| \right)^\dagger = \sum_k (\mathbf{a}_k)^\dagger \left(|\mathbf{a}_k\rangle\langle\mathbf{a}_k| \right)^\dagger = \hat{A} . \quad (57)$$

Zo'n operator heet *Hermitisch*. Het is eenvoudig het omgekeerde te bewijzen: als een operator \hat{A} hermitisch is, zijn alle eigenwaarden reëel, en bovendien kunnen we de bijbehorende eigentoestanden zo kiezen dat ze *orthonormaal* zijn:

$$\langle\mathbf{a}_k|\mathbf{a}_n\rangle = \delta_{k,n} . \quad (58)$$

We komen op deze manier tot de volgende uitspraak: **een observabele wordt gerepresenteerd door een Hermitische operator, waarvan de eigenwaarden de mogelijke meetuitkomsten zijn.**

3.4 Waarschijnlijkheden, verwachtingswaarden en onzekerheid

In sectie 2.3 hebben we gezien hoe in een algemene superpositie

$$|\psi\rangle = \sum_k z_k |\mathbf{a}_k\rangle \quad (59)$$

het getal $|z_j|^2$ de *kans* aangeeft dat bij meting van A de waarde a_j gevonden wordt. Aangezien in het algemeen meerdere verschillende meetwaarden mogelijk zijn, is er sprake van een *kansverdeling* waarbij elke mogelijke uitkomst een grotere of kleinere kans heeft om op te treden. Als tevoren geven we de kans op uitkomst a_n aan met $P(A = a_n)$ of kortweg $P(a_n)$. In sectie 7.5 beschrijven we in het kort hoe met kansen gerekend moet worden om grootheden als de *verwachtingswaarde* van een uitkomst te krijgen: de verwachtingswaarde is, zoals daar uitgelegd, de som van de mogelijke uitkomsten, ieder gewogen met de kans op die uitkomst:

$$\langle A \rangle = \sum_k a_k P(a_k) . \quad (60)$$

Bezie nu eens, voor bovengenoemde $|\psi\rangle$, het inwendig product van $\langle\psi|$ en $\hat{A}|\psi\rangle$. We schrijven dit als $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$, en we kunnen onmiddellijk inzien dat geldt

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \left(\sum_j z_j^* \langle a_j| \right) \left(\sum_k a_k |a_k\rangle \langle a_k| \right) \left(\sum_n z_n |a_n\rangle \right) \\ &= \sum_j \sum_k \sum_n z_j^* z_n a_k \langle a_j|a_k\rangle \langle a_k|a_n\rangle \\ &= \sum_j \sum_k \sum_n z_j^* z_n a_k \delta_{j,k} \delta_{k,n} \\ &= \sum_k |z_k|^2 a_k = \sum_k a_k P(a_k) \equiv \langle A \rangle . \end{aligned} \quad (61)$$

We hebben hier een direct recept voor de *verwachtingswaarde* van een observabele A voor een systeem in een gegeven toestand $|\psi\rangle$. In de trant van sectie 7.5 kunnen we ook schrijven

$$\langle A^2 \rangle = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle , \quad (62)$$

en we vinden voor de *variantie* van A als het systeem in de toestand $|\psi\rangle$ is het resultaat

$$\sigma(A)^2 = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2 . \quad (63)$$

We kunnen de variantie opvatten als een indicatie voor de mate waarin de uitkomst van meting van A *niet* met zekerheid vastligt: is de variantie groot, dan is de uitkomst slecht te voorspellen, is zij klein, dan weten we

vrij veel over de uitkomst, en is de variantie gelijk aan nul, dan ligt de meetuitkomst helemaal vast. We kunnen de variantie dus ook wel aanduiden met de *onzekerheid* in de meting van A . Het is deze onzekerheid waarvan in de beroemde Heisenberg relaties sprake is. Op deze plek is het belangrijk op te merken dat zowel verwachtingswaarde als variantie hun betekenis pas echt krijgen in de context van een groot aantal metingen, ieder gedaan aan een systeem in steeds dezelfde toestand $|\psi\rangle$. Het is dus *niet* zo dat voor een enkel systeem een bepaalde observabele om een of andere mystieke reden niet, of niet nauwkeurig, te meten zou zijn.

3.5 Commuterende en niet-commuterende operatoren

Tot zoverre hebben we ons beziggehouden met slechts één meetbare eigenschap, en de toestanden werden dan ook gekenmerkt door slechts één getal in de lijst van eigenschappen, bijvoorbeeld $|\mathbf{a}_1\rangle$. In werkelijkheid hebben systemen natuurlijk veel meer eigenschappen. Stellen we ons nu eens een systeem voor waarin toestanden voorkomen van welke *twee* eigenschappen, A en B , tegelijk wel-bepaald zijn. Zo'n toestand wordt dan gegeven door bijvoorbeeld

$$|A = \mathbf{a}_1, B = \mathbf{b}_3\rangle \quad \text{ofwel} \quad |\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_3\rangle$$

Onder meting van A zullen we dus met zekerheid \mathbf{a}_1 vinden, en onder meting van B met zekerheid \mathbf{b}_3 . Met andere woorden: de toestand $|\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_3\rangle$ is een *gemeenschappelijke eigentoestand* van de operatoren

$$\hat{A} = \sum_{j,k} \mathbf{a}_j |\mathbf{a}_j, \mathbf{b}_k\rangle \quad \text{en} \quad \hat{B} = \sum_{j,k} \mathbf{b}_k |\mathbf{a}_j, \mathbf{b}_k\rangle . \quad (64)$$

We merken op dat de som in dit geval over *alle* verschillende meetresultaten van A en B tegelijk moet lopen. Soms is het aantal mogelijkheden voor A gelijk aan N_A , en is voor iedere mogelijkheid er een vast aantal mogelijkheden, N_B , voor de meetwaarde van B . In dat geval loopt de som over $N_A \times N_B$ termen. Soms echter hangt bijvoorbeeld het aantal mogelijkheden voor B af van de waarde van A , en dan steekt de som ingewikkelder in elkaar. In de praktijk levert dit geen moeilijkheden op⁴⁴. Twee operatoren

⁴⁴Een voorbeeld van het laatste geval wordt gegeven door het waterstof-atoom, waarin A de energie voorstelt, en B het impulsmoment. In dat geval hangt het aantal mogelijke waarden van het impulsmoment af van de beschikbare energie, hetgeen op zichzelf natuurlijk logisch is.

met gemeenschappelijke eigentoestanden heten te *commuteren*. We kunnen dit begrijpen door de operatoren in verschillende volgorde te laten werken op een gemeenschappelijke eigentoestand:

$$\begin{aligned}
\hat{A}\hat{B} |a_1, b_3\rangle &= \hat{A} (\hat{B}|a_1, b_3\rangle) = \hat{A} (b_3|a_1, b_3\rangle) \\
&= b_3 \hat{A}|a_1, b_3\rangle = b_3 a_1 |a_1, b_3\rangle = a_1 b_3 |a_1, b_3\rangle , \\
\hat{B}\hat{A} |a_1, b_3\rangle &= \hat{B} (\hat{A}|a_1, b_3\rangle) = \hat{B} (a_1|a_1, b_3\rangle) \\
&= a_1 \hat{B}|a_1, b_3\rangle = a_1 b_3 |a_1, b_3\rangle .
\end{aligned} \tag{65}$$

Het resultaat is in beide gevallen hetzelfde, en de volgorde waarin we de *operatoren* \hat{A} en \hat{B} *toepassen* doet er niet toe. Dit betekent dat de volgorde waarin we de *observabelen* A en B *meten* onbelangrijk is. Zulke observabelen worden *commensurabel* genoemd: een welbepaalde waarde van de ene observabele sluit een welbepaalde waarde van de andere niet uit⁴⁵: er zijn toestanden waarin de onzekerheid⁴⁶ in beide observabelen nul is.

Er zijn ook gevallen mogelijk waarin de operatoren \hat{A} en \hat{B} *niet* commuteren. In dat geval zijn er toestanden $|\psi\rangle$ waarvoor

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle \neq \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle \tag{66}$$

We zeggen dat \hat{A} en \hat{B} *niet* commuteren. Zo'n toestand $|\psi\rangle$ kan *niet* een gemeenschappelijke eigentoestand van \hat{A} en \hat{B} zijn. Als het systeem in zo'n toestand is *kan* het zijn dat de waarde van A welbepaald is, maar dan is die van B *niet* welbepaald; en omgekeerd. De observabelen A en B heten dan *incommensurabel*: de onzekerheden in hun meetwaarden kunnen *niet* tegelijktijd nul zijn. We zien hier Heisenberg's relatie in een kwalitatieve vorm; hieronder zullen we ze meer kantitatief maken.

Om het commutatiedrag van operatoren aan te geven introduceren we de *commutator* van twee operatoren, aangegeven met vierkante haakjes:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} . \tag{67}$$

⁴⁵Er zijn natuurlijk ook toestanden in het systeem waarin een van de observabelenwaarden welbepaald is, en die van de andere niet: denk bijvoorbeeld aan een toestand als $|\psi\rangle = (|a_1, b_1\rangle + |a_1, b_2\rangle) / \sqrt{2}$. In deze toestand ligt de meetwaarde van A vast op a_1 , terwijl die van B zowel b_1 als b_2 kan blijken te zijn bij meting van B .

⁴⁶Als boven beschreven.

Het is belangrijk op te merken dat de commutator ook een *operator* is, zij het van meer ingewikkelde vorm. Als $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ zijn de observabelen commensurabel, indien $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ zijn ze incommensurabel. Commutatoren spelen een belangrijke rol in de wiskundige structuur van de quantummechanica. Ze hebben een aantal eigenschappen. Ten eerste

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] . \quad (68)$$

Ten tweede, als A en B observabelen zijn, zodat hun operatoren Hermitisch zijn, geldt

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B})^\dagger - (\hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}] . \quad (69)$$

Zo'n commutator is *anti*-Hermitisch. De commutator van twee observabele-operatoren kan dus zelf niet met een observabele corresponderen. Ten derde kunnen we commutatoren met meer ingewikkelde argumenten behandelen:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \\ &= [\hat{A}, \hat{B}] \hat{C} + \hat{B} [\hat{A}, \hat{C}] . \end{aligned} \quad (70)$$

Deze identiteiten zullen later nog van pas komen.

Alvorens we deze sectie afsluiten, is nog één belangrijke opmerking over incommensurabele observabelen aan de orde. Het is niet zo dat als A en B incommensurabel zijn de meting van bijvoorbeeld A een meting van B uitsluit: meetbaarheid hangt alleen af van ons technisch vernuft. Wat er in feite aan de hand is kunnen we als volgt zien. Laten we eerste A meten, en stel dat we \mathbf{a}_1 vinden. Het systeem is daarna in een eigentoestand van \hat{A} , met eigenwaarde \mathbf{a}_1 . Omdat de observabelen incommensurabel zijn, is het dan *niet* in een eigentoestand van \hat{B} met welbepaalde waarde van B , en er zijn verschillende mogelijke meetuitkomsten. Laten we nu B meten: veronderstel dat we \mathbf{b}_1 vinden. Dan is het systeem daarna in een eigenstoestand van \hat{B} , met eigenwaarde \mathbf{b}_1 , maar *niet langer in een eigentoestand van \hat{A}* . Een hernieuwde meting van A zal dus niet langer automatisch in \mathbf{a}_1 resulteren. De informatie die we in eerste instantie over A gewonnen hadden, is door de meting van B waardeloos geworden. Meten we nu alsnog A , dan is de informatie $B = \mathbf{b}_1$ gedevalueerd, enzovoorts: iedere meting van de ene observabele maakt informatie over de andere observabele onjuist en nutteloos.

3.6 De onzekerheidsrelaties van Heisenberg

Het is nu tijd voor wat pittiger wiskunde. We nemen een systeem in een toestand $|\psi\rangle$, en twee niet commuterende observabele-operatoren \hat{A} en \hat{B} . We geven hun commutator aan met

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv i \hat{C} . \quad (71)$$

Op grond van vergelijking (69) en ons invoeren van een factor i is nu de operator \hat{C} zelf *wel* Hermitisch. Voor het gemak nemen we aan dat de verwachtingswaarden van A en B beide nul zijn⁴⁷. Dat wil zeggen dat voor de varianties geldt:

$$\sigma(A)^2 = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle , \quad \sigma(B)^2 = \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle . \quad (72)$$

We voeren nu een ‘test’-toestand in, met een vrije parameter z die een reëel getal is:

$$|z\rangle = (\hat{A} + iz\hat{B}) |\psi\rangle . \quad (73)$$

Dit is niet langer de oorspronkelijke toestand $|\psi\rangle$, maar desalniettemin een bona fide toestand van het systeem. We gaan nu $\langle z|z\rangle$ berekenen. Daartoe vormen we eerst $\langle z|$:

$$\langle z| = \left\{ (\hat{A} + iz\hat{B}) |\psi\rangle \right\}^\dagger = \langle \psi | (\hat{A}^\dagger - iz\hat{B}^\dagger) = \langle \psi | (\hat{A} - iz\hat{B}) . \quad (74)$$

We kunnen nu $\langle z|z\rangle$ berekenen:

$$\begin{aligned} \langle z|z\rangle &= \langle \psi | (\hat{A} - iz\hat{B}) (\hat{A} + iz\hat{B}) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{A}^2 + iz(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + z^2\hat{B}^2) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{A}^2 + iz[\hat{A}, \hat{B}] + z^2\hat{B}^2) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{A}^2 + z^2\hat{B}^2 - z\hat{C}) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle + z^2 \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle - z \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \\ &= \sigma(A)^2 + z^2 \sigma(B)^2 - z \langle C \rangle . \end{aligned} \quad (75)$$

⁴⁷Dit kan altijd, eventueel door een herdefinitie van de observabele middels aftrekken van de verwachtingswaarde; dat wil zeggen we bekijken $A - \langle A \rangle$ en noemen *dat* onze nieuwe A .

Bedenk nu dat $|z\rangle$ een toestand van het systeem is: dat betekent dat $\langle z|z\rangle$ minstens nul is, ofwel

$$\sigma(A)^2 + z^2\sigma(B)^2 - z\langle C\rangle \geq 0 . \quad (76)$$

Dit moet gelden voor *alle* reële waarden van z ! We kunnen z dus zo kiezen dat het linkerlid van bovenstaande vergelijking zo klein mogelijk is. Dit is het geval⁴⁸ als $z = \langle C\rangle / (2\sigma(B)^2)$, en daaruit vinden we dat

$$\sigma(A)^2 - \frac{\langle C\rangle^2}{4\sigma(B)^2} \geq 0 , \quad (77)$$

ofwel

$$\sigma(A) \sigma(B) \geq \frac{1}{2} |\langle C\rangle| . \quad (78)$$



Werner Karl
Heisenberg
1901-1976

Dit is de *onzekerheidsrelatie van Heisenberg*: het product van de meetonzekerheden in twee observabelen is groter dan (de helft van) de verwachtingswaarde van hun commutator. Als de observabelen incommensurabel zijn, kunnen hun meetonzekerheden dus niet tegelijk willekeurig klein zijn. Nu komt het vaak voor dat de commutator van \hat{A} en \hat{B} een zuiver getal is, bijvoorbeeld gelijk aan \hbar . De ondergrens op het product van de onzekerheden is dan echt een absoluut minimum, onafhankelijk van de toestand van het systeem.

⁴⁸Dit kunnen we doen door naar z te differentiëren: we hebben $\frac{d}{dz} (\sigma(A)^2 + z^2\sigma(B)^2 - z\langle C\rangle) = 2z\sigma(B)^2 - \langle C\rangle$, en door dit gelijk aan nul te stellen vinden we de gevraagde waarde voor z .

4 De Schrödingervergelijking

4.1 De noodzaak van een ‘bewegingsvergelijking’



Erwin Rudolf Josef
Alexander
Schrödinger
1887-1961

Tot nu toe hebben we alleen gekeken naar toestanden en hun interpretaties. Alhoewel dit ons reeds een aantal verrassende inzichten heeft opgeleverd, is onze beschrijving van de natuur tot op dit moment slechts instantaan, dat wil zeggen dat ons enige onderwerp van zorg de situatie van een systeem *op enig gegeven moment* betreft. In de natuurkunde moet de ambitie groter zijn: we willen ook in staat zijn om op grond van informatie over een systeem op enig moment uitspraken te doen over de toestand van het systeem op *latere* tijdstippen. Hiertoe is een *bewegingsvergelijking* nodig. Zo'n vergelijking is, evenals de klassieke wetten van Newton, niet rigoreus te bewijzen, maar is in essentie een *postulaat*: haar rechtvaardiging moet elke voorgestelde vorm van dynamica ontlenen aan overeenstemming met het experiment.

De tijdsintervallen waarover een dynamische voorspelling reikt moeten willekeurig klein gekozen kunnen worden. De meest efficiënte vorm van een bewegingsvergelijking is er daarom een waarin het tijdsinterval infinitesimaal klein is, dat wil zeggen de vorm moet er een zijn van een *differentiaalvergelijking*.

4.2 De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking en de Hamiltoniaan

De bewegingsvergelijking die, naar uit het experiment blijkt, het best de niet-relativistische quantummechanica beschrijft is de *Schrödingervergelijking*. De ket die de toestand van het systeem beschrijft wordt daarin als tijdsafhankelijk gezien: in principe zouden we dus niet moeten schrijven

$$|\psi\rangle$$

maar

$$|\psi\rangle(t)$$

hoewel men meestal deze aanduiding als impliciet neemt. De Schrödinger-vergelijking, die tevens de plaats is waar de constante van Planck⁴⁹ in de theorie zijn intrede doet, luidt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle . \quad (79)$$

De operator \hat{H} die in het rechterlid optreedt is de bijbehorende operator van de observabele die de *totale energie* van het systeem voorstelt. Dit is in overeenstemming met de dimensionaliteit van de vergelijking, aangezien een tijds-afgeleide de dimensionaliteit 1/seconde heeft. De operator \hat{H} wordt de *Hamiltoniaan* van het systeem genoemd⁵⁰. Men kan zeggen dat de Hamiltoniaan het systeem *definieert*⁵¹.

De differentiaalvergelijking (79) stelt ons in staat om, gegeven de toestand op enig tijdstip t , deze te berekenen op tijdstip $t + dt$:

$$|\psi\rangle(t + dt) = |\psi\rangle(t) + \frac{dt}{i\hbar} \hat{H} |\psi\rangle(t) . \quad (80)$$

Bovenstaande geldt als het tijdsinterval dt infinitesimaal klein is. Het is belangrijk om te onthouden dat het gedeelte $\hat{H}|\psi\rangle$ ook een mogelijk toestand van het systeem is, en de toestand $|\psi\rangle(t + dt)$ is een superpositie, dus ook een systeemtoestand.

Voor niet-infinitesimale tijdsintervallen, die we met Δt kunnen aangeven, kunnen we de oplossing van de Schrödingervergelijking ook formeel schrijven:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle(t + \Delta t) &= \exp\left(\frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}\right) |\psi\rangle(t) \\ &\equiv \left(1 + \left(\frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}\right) + \frac{1}{2!} \left(\frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}\right)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}\right)^3 + \dots\right) |\psi\rangle(t) \end{aligned}$$

⁴⁹Eigenlijk de constante van Dirac, zie hoofdstuk 1.

⁵⁰De Hamiltoniaan is oorspronkelijk gedefinieerd in de context van de klassieke mechanica in haar zogenaamde Hamilton-formulering. Ook in de klassieke fysica is de waarde van de Hamiltoniaan vaak (alhoewel niet altijd) gelijk aan de totale energie van het systeem.

⁵¹Dat wil zeggen, *wiskundig* definieert. De Hamiltoniaan geeft alle wiskundige informatie omtrent het systeem. Wat de *interpretatie* is van de verschillende operatoren, dat wil zeggen, wat de *observabelen* zijn, wordt door de Hamiltoniaan natuurlijk niet gezegd. Daarom is het mogelijk dat verschillende fysische systemen door dezelfde Hamiltoniaan worden beschreven. Een belangrijk voorbeeld is dat waarin de harmonische oscillator, een klassiek deeltje dat heen en weer slingert in een parabolische potentiaal, dezelfde Hamiltoniaan heeft als een *vrij* deeltje in de relativistische quantummechanica.

$$\begin{aligned}
&= |\psi\rangle(t) - i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{H}|\psi\rangle(t) - \frac{(\Delta t)^2}{2\hbar^2}\hat{H}^2|\psi\rangle(t) \\
&\quad + i\frac{(\Delta t)^3}{6\hbar^3}\hat{H}^3|\psi\rangle(t) + \frac{(\Delta t)^4}{24\hbar^4}\hat{H}^4|\psi\rangle(t) + \dots
\end{aligned} \tag{81}$$

Hoewel formeel correct, is deze uitdrukking in het algemeen niet nuttig om de toestand $|\psi\rangle(t + \Delta t)$ te bepalen. In de volgende sectie bediscussiëren we een betere methode.

4.3 Strategie voor oplossingen: de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking

De totale energie van een gegeven systeem is een observabele, en de operator \hat{H} is daarom een Hermitische operator, met orthonormale eigenstoestanden. Welke deze eigentoestanden zijn wordt beschreven met behulp van de *tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking*:

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle . \tag{82}$$

Dit is niets anders dan de eigenwaardevergelijking van de Hermitische operator \hat{H} . De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking beschrijft dan ook *niet* de dynamica van het systeem, maar alleen de energie-eigentoestanden. Laten we nu eens veronderstellen dat we de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking hebben opgelost: dat wil zeggen dat we eigenstoestanden $|\mathbf{n}\rangle$ hebben gevonden, met de bijbehorende eigenwaarden $E_{\mathbf{n}}$, zodanig dat

$$\hat{H} |\mathbf{n}\rangle = E_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle . \tag{83}$$

De aanduiding van de ket is hier eenvoudig het *nummer* van de eigentoestand. Het is mogelijk dat energie-eigenwaarden met verschillende \mathbf{n} numeriek gelijk zijn, bijvoorbeeld als het systeem twee of meer eigentoestanden kent die dezelfde energie hebben maar verschillen in hun waarde van een andere, commensurabele observabele⁵². Voor het moment doet dit er niet toe. We kunnen nu de *tijdsevolutie* van elke energie-eigentoestand eenvoudig vinden uit de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\mathbf{n}\rangle = \hat{H} |\mathbf{n}\rangle = E_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \quad \Rightarrow \quad |\mathbf{n}\rangle(t + \Delta t) = \exp\left(-i\frac{E_{\mathbf{n}} \Delta t}{\hbar}\right) |\mathbf{n}\rangle(t) . \tag{84}$$

⁵²Dit is zelfs de gebruikelijke situatie.

De energie-eigentoestand evolueert met een eenparig ‘draaiende’ complexe fase. Deze fase is niet direct fysisch, maar komt wel tot uiting in het meer algemene geval. Laten we immers veronderstellen dat de toestand van het systeem op tijdstip t gegeven wordt door $|\psi\rangle(t)$. Deze toestand *moet* een superpositie zijn van energie-eigenstoestanden⁵³, en dus zijn er coëfficiënten c_n zodanig dat

$$|\psi\rangle(t) = \sum_n c_n |n\rangle(t) . \quad (85)$$

Als nu de tijd voortschrijdt, evolueren de energie-eigentoestanden elk op hun eigen wijze, en de systeemtoestand op tijdstip $t + \Delta t$ wordt dan gegeven door

$$|\psi\rangle(t + \Delta t) = \sum_n c_n \exp\left(-i \frac{E_n \Delta t}{\hbar}\right) |n\rangle(t) . \quad (86)$$

De systeemtoestand is, zoals blijkt, een superpositie van de energie-eigenstoestanden met gedurig veranderende coëfficiënten. De interferentie-effecten tussen deze coëfficiënten zijn wel degelijk meetbaar, *en het zijn deze effecten die dynamica mogelijk maken*. Dat de oplossing (86) inderdaad aan de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking voldoet is gemakkelijk te checken aan de hand van het feit dat de Hamiltoniaan natuurlijk geschreven kan worden als

$$\hat{H} = \sum_n E_n |n\rangle\langle n| : \quad (87)$$

enerzijds is voor (86)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle(t + \Delta t) = \sum_n c_n E_n \exp\left(-i \frac{E_n \Delta t}{\hbar}\right) |n\rangle , \quad (88)$$

en anderzijds hebben we

$$\begin{aligned} \hat{H} |\psi\rangle(t + \Delta t) &= \left(\sum_k E_k |k\rangle\langle k| \right) \left(\sum_n c_n \exp\left(-i \frac{E_n \Delta t}{\hbar}\right) |n\rangle \right) \\ &= \sum_{k,n} E_k c_n \exp\left(-i \frac{E_n \Delta t}{\hbar}\right) |k\rangle \langle k|n\rangle \\ &= \sum_{k,n} E_k c_n \exp\left(-i \frac{E_n \Delta t}{\hbar}\right) |k\rangle \delta_{k,n} \\ &= \sum_n c_n E_n \exp\left(-i \frac{E_n \Delta t}{\hbar}\right) |n\rangle . \end{aligned} \quad (89)$$

⁵³Immers, we kunnen altijd de totale energie van het systeem *meten*.

Deze algemene strategie werkt dus altijd, en dit onderstreept het belang van het kennen van de energie-eigentoestanden van een systeem: niet alleen is de energie een belangrijke observabele, maar zijn eigentoestanden regeren de volledige tijdsevolutie van het systeem in elke willekeurige toestand.

4.4 De Heisenberg/Ehrenfest vergelijking



Paul Ehrenfest
1880-1933

In sommige gevallen zijn we niet per se geïnteresseerd in alle details van de evolutie van een quantumstelsel, aangezien de toestand toch alleen toegankelijk gemaakt kan worden door er waarnemingen aan te verrichten. Als de mogelijke meetresultaten verdeeld zijn volgens een waarschijnlijkheidsverdeling, kan het genoeg zijn als bekend is *hoe de waarschijnlijkheidsverdeling evolueert*. In het bijzonder kunnen we geïnteresseerd zijn in de tijdsevolutie van de *verwachtingswaarden*, en deze tijdsevolutie zullen we nu nader bekijken. Laten we ons concentreren op een observabele A (waarvan we aannemen dat deze nietzelf expliciet van de tijd afhangt). Laten we aannemen dat het systeem op enig moment t in de toestand $|\psi\rangle$ is. De verwachtingswaarde wordt dan, zoals we gezien hebben, gegeven door

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle , \quad (90)$$

waarbij \hat{A} de operator geassocieerd met A is. De tijdsafgeleide wordt dan gegeven door

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \right) \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} \left(\frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle \right) . \quad (91)$$

Nu weten we, op grond van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking, dat

$$\frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} | \psi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} | \psi \rangle , \quad (92)$$

en, middels het nemen van de Hermitisch geconjugeerde, ook dat

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | = +\frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} . \quad (93)$$

We kunnen nu het tijdsverloop van de verwachtingswaarde vinden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle &= \left(\frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} \right) \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} \left(\frac{-i}{\hbar} \hat{H} | \psi \rangle \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) | \psi \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle i[\hat{H}, \hat{A}] \rangle . \end{aligned} \quad (94)$$

Dit is de *Heisenberg/Ehrenfest vergelijking*: zij relateert, zoals we zien, de mate van verandering van (de verwachtingswaarde van) een observabele aan de mate van commensurabiliteit van de observabele met de energie.

We zien direct dat er een *behoudswet* geldt: als een observabele commensurabel is met de energie (wat wil zeggen dat $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$) verandert $\langle A \rangle$ niet in de tijd⁵⁴.

4.5 Een vrij deeltje: de fundamentele commutator

Het moment is nu aangebroken om een expliciet quantum-systeem te bekijken. Het eenvoudigste systeem, zowel in de klassieke als in de quantumfysica, is dat bestaand uit een enkel vrij deeltje, zich bewegend in een ruimte met een enkele dimensie. De positie wordt in de klassieke mechanica aangegeven met x , en het momentum met p : we hebben de relatie

$$\frac{\partial}{\partial t} x = \frac{1}{m} p , \quad (95)$$

als m de massa van het deeltje is. De totale energie van een vrij deeltje is niet anders dan zijn kinetische energie:

$$E = \frac{1}{2m} p^2 . \quad (96)$$

Laat ons nu overgaan op een quantummechanische beschrijving. De positie en het momentum zijn nu niet langer eenvoudig *getallen* maar observabelen, beschreven met *operatoren*. Dit wil zeggen dat we x moeten vervangen door \hat{x} en p door \hat{p} . De Hamiltoniaan van het systeem wordt dan gegeven door

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 . \quad (97)$$

⁵⁴In feite geldt er zelfs meer: als de observabele commensurabel is met de energie, is de *waarschijnlijkheidsverdeling* van de mogelijke meetwaarden zelf invariant in de tijd.

We maken nu een belangrijke aanname betreffende de relatie tussen de klassieke en de quantum-mechanische beschrijving: **de klassieke variabelen komen overeen met de verwachtingswaarden van de quantummechanische observabelen**. Dit is de enige redelijke manier waarop de twee verschillende wereldbeelden met elkaar in contact gebracht kunnen worden.

Passen we bovenstaande toe op het vrije deeltje, dan zien we dat we graag het volgende resultaat willen hebben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle . \quad (98)$$

Volgens de Heisenberg/Ehrenfest vergelijking voor $\langle x \rangle$ moet dus gelden

$$\frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\hat{p}^2, \hat{x}] \rangle \quad (99)$$

Omdat deze relatie tussen verwachtingswaarden moet gelden voor *elke* systeemtoestand waarvoor de verwachtingswaarde genomen wordt, moeten we aannemen dat de gelijkheid voor de operatoren *zelf* geldt:

$$[\hat{p}^2, \hat{x}] = -2i\hbar \hat{p} , \quad (100)$$

hetgeen eigenlijk alleen mogelijk is als we eisen dat⁵⁵

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar . \quad (101)$$

Dit is de *fundamentele commutator* van de niet-relativistische quantummechanica. Het is een enigzins onthutsend resultaat waartoe wij gebracht zijn: de twee uiterst fundamentele observabelen, positie en momentum, zijn *niet commensurabel!*

Een gevolg van de fundamentele commutator is dat positie en momentum aan de Heisenberg onzekerheids-relatie voldoen:

$$\sigma(x) \sigma(p) \geq \frac{\hbar}{2} , \quad (102)$$

hetgeen het populaire (maar enigzins foutieve) idee belichaamt dat positie en momentum niet tegelijkertijd meetbaar zijn (voor een nauwkeuriger discussie

⁵⁵Dat dit een goede commutatierelatie is kunnen we zien uit het feit dat, onder deze aanname, $[\hat{p}^2, \hat{x}] = \hat{p}\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}\hat{p} = \hat{p}\hat{p}\hat{x} - \hat{p}\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\hat{p} - \hat{x}\hat{p}\hat{p} = \hat{p}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{p} = \hat{p}(-i\hbar) + (-i\hbar)\hat{p} = -2i\hbar \hat{p}$.

zij verwezen naar boven). Aan de andere kant moet worden opgemerkt dat, *indien* positie en momentum *wel* commensurabel waren, de tijdsafgeleide van $\langle \mathbf{x} \rangle$ altijd nul zou zijn: in zo'n wereld is geen beweging mogelijk⁵⁶!

4.6 De Ehrenfest vergelijking: Newton's tweede wet

De correspondentie tussen de verwachtingswaarden van de quantummechanische observabelen en de klassieke variabelen kan nog verder worden uitgebreid. Uit de fundamentele commutator kan worden afgeleid dat voor hogere machten van de operator \hat{x} geldt

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = i\hbar n \hat{x}^{n-1} . \quad (103)$$

Voor een algemene functie van \hat{x} geldt daarom

$$[V(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar V'(\hat{x}) , \quad (104)$$

waarbij V' de afgeleide van V voorstelt⁵⁷. Laten we nu een deeltje bekijken dat niet vrij is, maar zich beweegt in een potentiaal. Als $V(\mathbf{x})$ de klassieke potentiële energie voorstelt, is de klassieke energie nu

$$E = \frac{1}{2m} p^2 + V(\mathbf{x}) , \quad (105)$$

en het quantum-equivalent is

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(\hat{x}) . \quad (106)$$

Omdat $V(\hat{x})$ met \hat{x} commuteert, is nog steeds de Heisenberg/Ehrenfest vergelijking (98) van kracht. Maar ook hebben we nu een vergelijking voor $\langle \mathbf{p} \rangle$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [V(\hat{x}), \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle i\hbar V'(\langle \mathbf{x} \rangle) \rangle = -\langle V'(\hat{x}) \rangle : \quad (107)$$

⁵⁶Bedenken we dat het feit of een deeltje stilstaat dan wel eenparig en rechtlijnig beweegt ook afhangt van het coördinatensysteem van de waarnemer, dan zien we in dat de incommensurabiliteit ons zelfs wordt opgedrongen door het principe van relativiteit, zij deze relativiteit Einsteins of Galileïsch.

⁵⁷Hierbij wordt de functie V van een operator \hat{x} als reeksontwikkeling opgevat: als $V(\mathbf{x}) = v_0 + v_1 \mathbf{x} + v_2 \mathbf{x}^2 + v_3 \mathbf{x}^3 + \dots$, dan is $V(\hat{x}) = v_0 + v_1 \hat{x} + v_2 \hat{x}^2 + v_3 \hat{x}^3 + \dots$.

dit is de *Ehrenfest vergelijking*, waarin we het quantum-equivalent herkennen van Newton's bewegingsvergelijking:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p} = -\frac{d}{dx}V(\mathbf{x}) \ . \quad (108)$$

Er zij opgemerkt dat de Ehrenfest vergelijking de verwachtingwaarde $\langle V(\hat{\mathbf{x}}) \rangle$ bevat, en *niet* $V'(\langle \mathbf{x} \rangle)$. Echter, in situaties waarin een klassieke beschrijving van het systeem adequaat is, is de waarschijnlijkheidsverdeling van \mathbf{x} zo sterk gepiekt rond $\langle \mathbf{x} \rangle$ (dat wil zeggen dat $\sigma(\mathbf{x})$ heel klein is gerekend naar macroscopische maatstaven) dat het verschil tussen deze alternatieve uitdrukkingen verwaarloosbaar is.

4.7 Systemen in drie dimensies

Het is eenvoudig om de bovenstaande beschouwing van een systeem in één enkele ruimtelijke dimensie uit te breiden naar systemen in de gebruikelijke drie ruimtelijke dimensies. Geven we de positie-observabelen aan met \mathbf{x} , \mathbf{y} en \mathbf{z} , en de corresponderende momenta met \mathbf{p}_x , \mathbf{p}_y , en \mathbf{p}_z , dan vinden we de fundamentele commutatoren

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \ , \quad (109)$$

en de commutatoren van elke andere combinatie van deze operatoren is identiek nul. Zo zijn bijvoorbeeld x en \mathbf{p}_z prima commensurabel. We kunnen eenvoudig aantonen (al zullen we dat hier niet doen) dat deze 'diagonale' vorm van de fundamentele commutator niet van de keuze van de coördinaatassen afhangt, dat wil zeggen onder een rotatie van het systeem blijven ze gelden voor de *nieuwe* observabelen.

Ten leste kan worden opgemerkt dat de laatste tijd er veel belangstelling is voor zogenaamde *niet-commutatieve meetkunde*: in deze alternatieve quantummechanica is bijvoorbeeld de commutator $[\hat{x}, \hat{y}]$ niet gelijk aan nul, maar aan een of andere nieuwe fundamentele natuurconstante. Dit heeft uiteraard consequenties voor begrippen als rotatie-invariantie en (Galilei-)relativiteit, maar kan ook leiden tot elegante nieuwe constructies van theorieën van de elementaire deeltjes. Hierop zullen we verder niet ingaan.

5 Representaties en golffuncties

5.1 De plaats-representatie en de golffunctie ψ

Eén van de meest fundamentele observabelen, en degene die het makkelijkst valt te visualiseren, is de *positie* van een deeltje⁵⁸. De set van kets waarin alle andere als superposities worden uitgedrukt, die daarom vaak wordt gekozen is die van eigentoestanden van de plaats: dit heet de *plaatsrepresentatie* van de quantum-toestanden. Laten we deze eens wat nader bekijken, voor het gemak allereerst weer in één dimensie. Een deeltje waarvan de plaats, onder meting, met zekerheid de waarde x zal hebben, wordt natuurlijk aangegeven met de ket $|x\rangle$; daarbij hoort dan weer de bra $\langle x|$. De operator die hoort bij de observabele x is dan

$$\hat{x} = \sum_x x |x\rangle \langle x| . \quad (110)$$

We herhalen, voor de goede orde: de argumenten van de bra en de ket zijn niets anders dan een (in dit geval heel eenvoudige) lijst van eigenschappen: de coëfficiënt x is de numerieke waarde van de positie.

Een algemene toestand $|\psi\rangle$ van het deeltje is een superpositie van positie-eigentoestanden. Dat wil zeggen dat er coëfficiënten c_x zijn zodanig dat

$$|\psi\rangle = \sum_x c_x |x\rangle . \quad (111)$$

Zoals we hebben gezien geldt ook

$$c_x = \langle x|\psi\rangle . \quad (112)$$

Dit is in feite niet de gebruikelijke notatie. In de eerste plaats is (vrijwel altijd) de verzameling van mogelijke posities continu en niet discreet. We

⁵⁸Merk op dat we er stilzwijgend van uitgaan dat de positie van een deeltje te bepalen valt! Dit kan eigenlijk alleen maar voor deeltjes welke positie door *een enkel getal* kan worden weergegeven, dat wil zeggen voor *puntvormige* deeltjes. Dit is natuurlijk in de klassieke fysica een idealisatie: zo worden in de Newtoniaanse cosmografie de sterren, planeten en andere hemellichamen routinematig als puntdeeltjes voorgesteld. Er zijn zeker kleine effecten van de *vorm* van een hemellichaam, bijvoorbeeld liggen deze ten grondslag aan het feit dat de maan altijd dezelfde kant naar de aarde richt. Voor hun beweging in het zonnestelsel kunnen deze verwaarloosd worden (gelukkig!). Aan de andere kant is het interessant om op te merken dat de *elementaire* deeltjes zoals electronen en quarks naar ons beste weten inderdaad puntvormig zijn.

vervangen in dat geval het sommatie-teken door een *integraal*⁵⁹. In de tweede plaats wordt de coëfficiënt c_x vaak aangeduid met het symbool $\psi(x)$. Zo krijgen we de vorm

$$|\psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle \quad , \quad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad . \quad (113)$$

We merken op dat $\psi(x)$ voor iedere gegeven waarde van x een bepaald (complex!) getal is: dus in feite is $\psi(x)$ een *functie van x* : dit is de befaamde *golffunctie* van het deeltje! Het is belangrijk om de *toestand* $|\psi\rangle$ en de *golffunctie* $\psi(x)$ goed van elkaar te onderscheiden: de eerste is een, van de beschrijving onafhankelijke, *toestand*; de tweede is een *functie*, de *weergave* van deze toestand als superpositie van een afgesproken verzameling kets, namelijk de *plaatsrepresentatie*.

Eén belangrijk aspect is nu de waarschijnlijkheidsinterpretatie die we al eerder hadden gegeven aan superposities. We moeten concluderen dat *de kans*⁶⁰ *dat een deeltje gevonden wordt op positie x wordt gegeven door*

$$P(\text{positie}=x) = |\psi(x)|^2 \quad . \quad (114)$$

Tevens betekent dit dat alleen die golffuncties acceptabel zijn als beschrijving van een bestaande quantumtoestand waarvoor de zogenaamde *normalisatie-conditie* geldt

$$\int dx |\psi(x)|^2 = 1 \quad , \quad (115)$$

aangezien het deeltje zich met zekerheid *ergens* moet bevinden.

In het geval van drie ruimtelijke dimensies is de generalisatie eenvoudig: als de plaats-eigentoestanden gegeven worden door $|x, y, z\rangle$ dan hebben we een golffunctie die van drie argumenten afhangt:

$$|\psi\rangle = \iiint dx dy dz \psi(x, y, z) |x, y, z\rangle \quad . \quad (116)$$

De normalisatie-conditie luidt nu

$$\iiint dx dy dz |\psi(x, y, z)|^2 = 1 \quad . \quad (117)$$

⁵⁹De overgang van sommatie naar integratie vereist enige technische aanpassingen, die verder de fysica niet noemenswaard beïnvloeden. We zullen ons hier verder geen zorgen over maken. Overigens zullen we onbekommerd het sommatie-teken gebruiken als ons dat beter uitkomt.

⁶⁰Eigenlijk de *kansdischtheid*, wederom in zekere zin een detail-kwestie.

Ons rest nog de vraag hoe het inwendig product tussen toestanden genomen moet worden. De normalisatie-conditie geeft hiervoor al een indicatie. Laat ons twee toestanden $|\psi_1\rangle$ en $|\psi_2\rangle$ bekijken, met bijbehorende golffuncties $\psi_1(x)$ en $\psi_2(x)$. Dan hebben we de relaties

$$\begin{aligned} |\psi_{1,2}\rangle &\Leftrightarrow \psi_{1,2}(x) \text{ ,} \\ \langle\psi_{1,2}| &\Leftrightarrow \psi_{1,2}(x)^* \text{ ,} \\ \langle\psi_2|\psi_1\rangle &\Leftrightarrow \int dx \psi_2(x)^*\psi_1(x) \text{ .} \end{aligned} \quad (118)$$

5.2 Plaats en impuls in de plaatsrepresentatie

Als we de quantumfysica geheel in de plaatsrepresentatie willen bedrijven⁶¹ moeten we natuurlijk ook de vorm van de *operatoren* in deze representatie vinden. Voor de plaatsoperator is dit eenvoudig:

$$\begin{aligned} \hat{x}|\psi\rangle &= \left(\sum_x x|x\rangle\langle x|\right)\left(\sum_{x'}\psi(x')|x'\rangle\right) \\ &= \sum_{x,x'} x\psi(x')|x\rangle\langle x|x'\rangle \\ &= \sum_{x,x'} x\psi(x')|x\rangle\delta_{x,x'} \\ &= \sum_x (x\psi(x))|x\rangle \text{ .} \end{aligned} \quad (119)$$

Het effect van de operator \hat{x} is dus dat de golffunctie $\psi(x)$ vervangen wordt door $x\psi(x)$. We schrijven daarom (alhoewel niet geheel naar des puristen smaak):

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \text{ .} \quad (120)$$

De uitbreiding naar het geval van drie dimensies is rechttoe-rechtaan.

De momentum-operator kan gevonden worden uit de vorm van de fundamentele commutator $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, omdat de momentum-operator zo moet zijn dat hieraan altijd voldaan is. Het valt in te zien dat we kunnen schrijven

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \text{ .} \quad (121)$$

⁶¹Dit is ongeveer de oorspronkelijke aanpak van Schrödinger.

Immers, in dat geval volgt uit Leibniz' regel dat voor iedere golffunctie

$$\begin{aligned}
 [\hat{x}, \hat{p}] \psi(x) &= \hat{x} \hat{p} \psi(x) - \hat{p} \hat{x} \psi(x) \\
 &= x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(x)) \\
 &= -i\hbar x \psi'(x) + i\hbar \psi(x) + i\hbar x \psi'(x) \\
 &= i\hbar \psi(x) .
 \end{aligned} \tag{122}$$

Met deze twee fundamentele operatoren zijn veel andere belangrijke te construeren. Wederom geeft het driedimensionale geval geen extra problemen.

5.3 De Schrödingervergelijkingen

De veelvoorkomende vorm van de Hamiltoniaan is, zoals we gezien hebben, voor een ééndimensionaal systeem

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(\hat{x}) . \tag{123}$$

In de plaatsrepresentatie wordt dit dus

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{(\partial x)^2} + V(x) . \tag{124}$$

In de plaatsrepresentatie krijgt de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking dus de vorm van een 'echte' differentiaalvergelijking:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{(\partial x)^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) . \tag{125}$$

De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking luidt nu uiteraard

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{(\partial x)^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) , \tag{126}$$

waarbij de te vinden oplossing *tijdsafhankelijk is* (uiteraard!). Dit is het soort vergelijking dat veelal moet worden opgelost om een quantumstelsel onder de knie te krijgen. In veel gevallen blijkt dat voor elke waarde van de energie E weliswaar een oplossing te vinden is, maar *niet* een die voldoet aan de normalisatie-conditie (115): oplossingen die normaliseerbaar zijn zijn

vaak alleen te vinden voor bepaalde waarden van de energie, hetgeen het ‘quantum’-karakter van de theorie benadrukt. Als voor alle mogelijke waarden E_n van de energie de bijbehorende golffuncties $\psi_n(\mathbf{x})$ gevonden zijn kunnen we de oplossings-strategie weer toepassen, nu in de plaatsrepresentatie. Dat wil zeggen, als op enig moment t de *golffunctie* $\psi(\mathbf{x}, t)$ van het systeem een superpositie is van de energie-eigen*golffuncties* $\psi_n(\mathbf{x})$:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{x}) \quad , \quad (127)$$

dan is op een later tijdstip de golffunctie een veranderde superpositie:

$$\psi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_n c_n \exp\left(-i \frac{E_n \Delta t}{\hbar}\right) \psi_n(\mathbf{x}) \quad . \quad (128)$$

Deze constructie voldoet uiteraard aan de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking (125). De driedimensionale tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking luidt

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad . \quad (129)$$

Hierbij is het symbool

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{(\partial x)^2} + \frac{\partial^2}{(\partial y)^2} + \frac{\partial^2}{(\partial z)^2} \quad (130)$$

de zogenaamde *Laplace*-operator, ook zeer bekend uit de klassieke driedimensionale fysica.

5.4 Echte impulsen, vlakke golven

In principe is elke toestand van een quantumstelsel te beschrijven met behulp van de plaatsrepresentatie⁶². In veel gevallen wordt een systeem veeleer gekenmerkt door een *impuls* dan door een *positie*. In het bijzonder geldt dit voor het vrije deeltje: immers, Newton’s eerste wet zegt dat voor zo’n vrij deeltje de *impuls* constant is, terwijl (als de impuls niet nul is) de positie van het deeltje gestaag verandert. Laat ons nu zo’n vrij deeltje bekijken, en

⁶²Of het ook *handig* beschreven wordt is weer een andere kwestie.

aannemen dat de impuls welbepaald is: dat wil zeggen, we bekijken de *impuls*-eigentoestand in de *plaats*-representatie. Voor een impuls-eigentoestand geldt per definitie

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle \quad , \quad (131)$$

en deze impuls-eigentoestand heeft een eigen golffunctie:

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle \quad , \quad (132)$$

waarbij het subscript p aangeeft dat het hier om een impuls-eigentoestand met impuls p gaat. Vertalen we dit in de plaatsrepresentatie, dan wordt dit de volgende vergelijking voor de golffunctie:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p \psi_p(x) \quad . \quad (133)$$

De oplossing van deze eerste-orde differentiaalvergelijking is eenvoudig:

$$\psi_p(x) = C \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right) \quad . \quad (134)$$

Hierbij is C een te bepalen constante, die ook van de tijd mag afhangen. Het getal p is in deze beschrijving een vast getal, terwijl we de positie x waar we de golffunctie nemen vrijelijk te kiezen is.

Omdat voor een vrij deeltje de energie E alleen van het momentum p afhangt (of, in quantumtaal, de Hamiltoniaan \hat{H} alleen van de momentum-operator \hat{p} afhangt), weten we ook dat voor momentum-eigentoestanden in dit geval

$$\hat{H}\psi_p(x, t) = \frac{p^2}{2m}\psi_p(x) \quad . \quad (135)$$

De energie en de impuls zijn in dit geval commensurabele observabelen. Een toestand met wel-bepaalde impuls heeft nu ook een wel-bepaalde energie, en de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking luidt dus in dit geval

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_p(x, t) = \frac{p^2}{2m} \psi_p(x, t) \quad , \quad (136)$$

zodat we ook moeten vinden dat

$$\psi_p(x, t) = C' \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \quad , \quad E \equiv \frac{p^2}{2m} \quad . \quad (137)$$

Nu mog de te bepalen constante C' van de plaats afhangen. Combineren we (134) en (137), dan zien we dat de tijdsafhankelijke vorm van de golffunctie van een vrij deeltje met welbepaald momentum \mathbf{p} gegeven wordt door

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) \propto \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{E}t - \mathbf{p}\mathbf{x})\right) . \quad (138)$$

Dit soort plaats-en-tijd afhankelijke exponent wordt een *vlakke golf* genoemd. Het is deze vorm die ten grondslag ligt aan het ‘golf-karakter’ van quantumsystemen. Eén belangrijke opmerking is hier op zijn plaats: omdat de absolute waarde van een complexe e -macht altijd één is:

$$|\exp(i\mathbf{A})|^2 = 1 \quad \text{als } \mathbf{A} \text{ reëel is} , \quad (139)$$

is voor zo’n vlakke golf de kans om het deeltje op enige positie aan te treffen precies uniform⁶³. De vlakke golf komt dus *niet* overeen met een min of meer gelocaliseerd deeltje dat eenparig met momentum \mathbf{p} beweegt. Slechts een *superpositie* van vlakke golven kan zo iets opleveren.

In drie dimensies hebben we natuurlijk ook een drie-dimensionaal momentum $\vec{\mathbf{p}}$, en de eigentoestand heeft dan de analoge vorm

$$\psi_{\vec{\mathbf{p}}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \propto \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{E}t - \vec{\mathbf{x}} \cdot \vec{\mathbf{p}})\right) , \quad \mathbf{E} = \frac{1}{2m}|\vec{\mathbf{p}}|^2 . \quad (140)$$

5.5 Verandering van representatie

De plaats-representatie is zeker niet alleenzalmakend⁶⁴. Gelukkig is het mogelijk om van representatie te wisselen. Zo kennen we ook de *impuls*-representatie waarbij alle toestanden geschreven worden als superposities van *impuls*-eigentoestanden. Analoot aan de plaatsrepresentatie kunnen we aan een toestand ook een ‘impuls-golffunctie’ toekennen:

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{p}} \phi(\mathbf{p}) |\mathbf{p}\rangle . \quad (141)$$

⁶³In overeenstemming met de onzekerheidsrelaties: immers, voor een momentum-eigentoestand is $\sigma(\mathbf{p}) = 0$ dus moet $\sigma(\mathbf{x})$ oneindig groot zijn.

⁶⁴Het is daarom te betreuren dat ook heden ten dage, na ruim een eeuw quantummechanica, het onderwerp nog steeds meestal wordt geïntroduceerd aan de hand van de plaatsrepresentatie, met een onverdiend grote rol voor de golffunctie.

In deze impuls-representatie hebben de operatoren natuurlijk een andere vorm:

$$\hat{p} \phi(p) = p \phi(p) \quad , \quad \hat{x} \phi(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) \quad , \quad (142)$$

waarbij ik dit laatste graag ter oefening laat.

Wat nu is, voor gegeven toestand $|\psi\rangle$, het verband tussen de plaats-golffunctie $\psi(x)$ en de impuls-golffunctie $\phi(p)$? Dit kunnen we beantwoorden door de toestanden $|p\rangle$ op hun beurt weer in de $|x\rangle$ uit te drukken, voor het gemak in het tijdsafhankelijke geval:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_p \phi(p) |p\rangle \\ &= \sum_p \phi(p) \left(\sum_x \psi_p(x) |x\rangle \right) \\ &= \sum_x \left(\sum_p \phi(p) \psi_p(x) \right) |x\rangle . \end{aligned} \quad (143)$$

Gebruiken we weer de integraal-vorm, dan zien we dat de representaties verbonden zijn middels

$$\psi(x) = \int dp \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \phi(p) . \quad (144)$$

In drie dimensies luidt de relatie

$$\psi(\vec{x}) = \int d\vec{p} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) \phi(\vec{p}) . \quad (145)$$

Dat wil zeggen dat plaat- en impuls-representatie in elkaar overgaan door het toepassen van de *Fourier*-transformatie. Deze is zeer bekend, onder andere uit technische (en zelfs werktuigbouwkundige) toepassingen! In het algemeen geldt dat het altijd mogelijk is tussen twee representaties heen en weer te bewegen: dit onderstreept eenvoudigweg het feit dat een representatie een *hulpmiddel* is, en van zichzelf geen fysica aan het systeem oplegt⁶⁵.

⁶⁵Dit betekent natuurlijk ook dat we uit $\psi(x)$ de impuls-golffunctie $\phi(p)$ moeten kunnen berekenen. Dit is de *inverse* Fourier-transformatie, gegeven door

$$\phi(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) \psi(x) ,$$

met de gebruikelijke uitbreiding naar drie dimensies.

5.6 Toepassing: deeltje in een doosje

We zijn nu voldoende toegerust om het eenvoudigste niet-vrije quantum-systeem te bekijken. Dit is het zogenaamde ‘deeltje-in-een-doosje’. Zoals gebruikelijk doen we dit eerst in één dimensie. Het systeem bestaat uit een deeltje met massa m , dat zich vrij kan bewegen tussen positie $x = 0$ en $x = L$, maar in het geheel niet daarbuiten: het zit ‘opgesloten’ in een ‘doosje’ van grootte L . Dit is een uiterst primitief beeld van een electron opgesloten in een waterstof-atoom, of een quark opgesloten in een proton, etcetera.

We zullen werken in de plaatsrepresentatie. Omdat we hebben verboden dat het deeltje buiten het interval $[0, L]$ kan worden aangetroffen moet gelden:

$$\psi(x) = 0 \quad \text{als } x < 0 \text{ of } x > L . \quad (146)$$

Laat ons nu de eindpunten van het interval nauwkeuriger bekijken. Omdat de impuls van het deeltje in de plaatsrepresentatie de afgeleide van de golffunctie behelst, moet deze bij $x \geq 0$ en $x \leq L$ eindig zijn, immers anders zouden we een oneindige impuls vinden. De golffunctie moet daarom *continu* zijn bij de eindpunten, dat wil zeggen dat

$$\psi(x) = \psi(L) = 0 . \quad (147)$$

De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking luidt nu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E \psi(x) . \quad (148)$$

met als algemene oplossing de trigonometrische functies⁶⁶:

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) . \quad (149)$$

met zekere (eventueel complexe) constanten A en B . Omdat de cosinus de waarde 1 heeft voor $x = 0$ moet B gelijk zijn aan nul. Vullen we de waarde $x = L$ in, dan hebben we tevens de conditie

$$\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L\right) = 0 , \quad (150)$$

⁶⁶Voor deze functies geldt $\cos''(z) = -\cos(z)$, $\sin''(z) = -\sin(z)$. De constante factoren in het argument volgen uit de kettingregel.

welks oplossingen worden gegeven door die waarden waarvoor de sinus ook nul wordt⁶⁷:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L = n\pi \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad . \quad (151)$$

We vinden onmiddellijk dat de energie E niet alle waarden kan aannemen, maar *gequantiseerd* is, dat wil zeggen beperkt tot een discreet spectrum E_n waarvoor

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (152)$$

Vullen we voor m de electronmassa, en voor L de diameter van het waterstofatoom (dat wil zeggen twee maal de Bohrse straal a_0) in, dan vinden we

$$E_1 \approx 37 \text{ eV} \quad . \quad (153)$$

Dit is zeker niet *nauwkeurig*, en dit is te verwachten aangezien het electron beslist niet in een waterstof-atoom-groot doosje zit opgeborgen: maar numeriek zitten in we het grootte-gebied van de energieën die gepaard gaan met overgangen in het waterstofatoom. De *spatiëring* van de energieën is beslist fout, omdat bovenstaande E_n snel oploopt met groeiende n : dit komt omdat bij grotere n het Bohrse model ook een grotere straal voorspelt. Het doosje is dus wijder voor grotere energieën. Ook kunnen we het volgende argument maken. Een quark in een proton of neutron is ongeveer tien keer zo zwaar als een electron: ook is een proton ruwweg 10^5 keer zo klein als een waterstofatoom. We verwachten daarom dat, als de quarks in een proton/neutron ook hogere-energie toestanden kennen zoals het waterstofatoom dat doet, dat deze toestanden dan in energie verschillen met bedragen die ruwweg 10^9 keer zo groot zijn als de karakteristieke energiever verschillen in het waterstofatoom, dat wil zeggen deze verschillen zijn ongeveer van de grootte van giga-electronvolts in plaats van electronvolts. Inderdaad zijn deze toestanden aangetroffen met energie-verschillen van deze orde van grootte.

Voor gegeven natuurlijk getal n is de golffunctie van de energie-eigentoestand nu

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \quad . \quad (154)$$

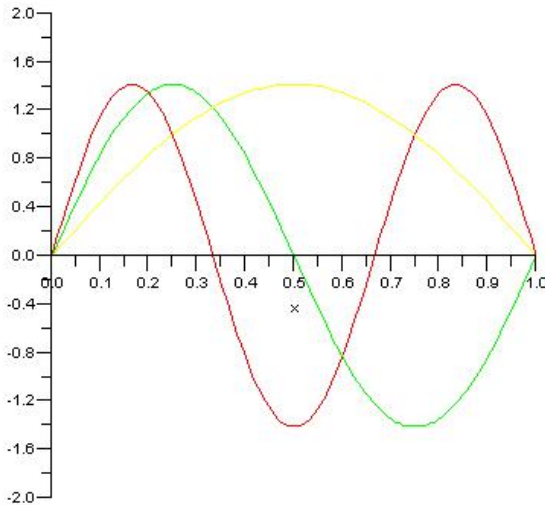
⁶⁷Merk op dat $n = 0$ het resultaat $\psi(x) = 0$ zou geven, hetgeen niet als een toestand geldt. *Negatieve* waarden van n geven eenvoudig het tegengestelde van de positieve waarden, en $-\psi(x)$ telt niet als een andere toestand dan $\psi(x)$. We moeten ons dus beperken tot de natuurlijke getallen.

De normalisatie-conditie geeft ons de waarde van A :

$$\int_0^L dx |\psi(x)|^2 = A^2 \int_0^L dx \sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right) = 1 \Rightarrow A^2 = \frac{2}{L}, \quad (155)$$

zodat de uiteindelijke vorm de volgende wordt:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right), \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2. \quad (156)$$



De energie-eigenfuncties $\psi_n(x)$ voor $n = 1, 2, 3$. We hebben $L = 1$ gekozen. Naarmate n toeneemt bevat de golf functie meer knopen. In alle gevallen gaat de kans om het deeltje precies bij de randen $x = 0$ of $x = L$ aan te treffen naar nul.

Ook het tijdsverloop van toestanden kunnen we nu in kaart brengen. Voor het gemak nemen we $L = 1$. Laat ons aannemen dat we op tijdstip $t = 0$ weten dat het deeltje zich met zekerheid bevindt tussen $x = 3/8$ en $x = 5/8$. Dat wil zeggen dat

$$P(x) = \begin{cases} 4 & \text{als } 3/8 \leq x \leq 5/8 \\ 0 & \text{als } 0 < x < 3/8 \text{ of } 5/8 < x < 1 \end{cases}, \quad (157)$$

op basis van de normalisatie-conditie. Een mogelijke golf functie van het systeem op tijdstip $t = 0$ is dan⁶⁸

$$\psi(x) = \begin{cases} 2 & \text{als } 3/8 \leq x \leq 5/8 \\ 0 & \text{als } 0 < x < 3/8 \text{ of } 5/8 < x < 1 \end{cases}. \quad (158)$$

⁶⁸Bedenk dat de kansverdeling ons geen informatie geeft over de complexe fase van $\psi(x)$! We nemen hier eenvoudig aan dat $\psi(x)$ voor $3/8 \leq x \leq 5/8$ niet van fase verandert. Andere keuzes geven een ander dynamisch gedrag.

De bijbehorende toestand noemen we natuurlijk weer $|\psi\rangle$. We kunnen nu de coëfficiënten c_n berekenen, die $\psi(x)$ geven als een som van energie-eigentoestanden $\psi_n(x)$. Immers,

$$\begin{aligned} c_n &= \langle n|\psi\rangle = \int_0^1 dx \psi_n(x)^* \psi(x) \\ &= 2\sqrt{2} \int_{3/8}^{5/8} dx \sin(\pi n x) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi n} \left(\cos\left(\frac{3\pi n}{8}\right) - \cos\left(\frac{5\pi n}{8}\right) \right) \end{aligned} \quad (159)$$

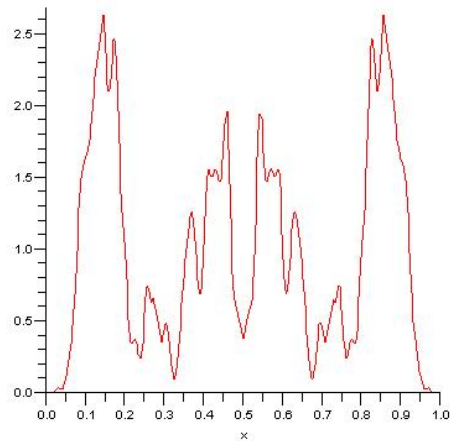
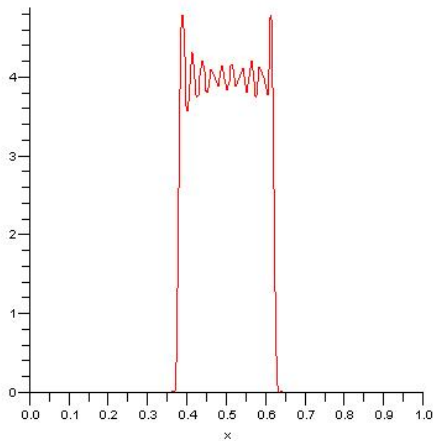
Met andere woorden, de golffunctie op tijdstip $t = 0$ wordt gegeven door

$$\psi(x, t = 0) = \sum_{n \geq 1} c_n \psi_n(x), \quad (160)$$

waarbij $\psi_n(x)$ gegeven is in (156) en de c_n in (159). Het tijdsverloop ligt nu vast: op enig later tijdstip t wordt de golffunctie, op basis van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking, gegeven door

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n(x). \quad (161)$$

We kunnen dit illustreren. Omdat een oneindige som zich niet per computer laat evalueren, beperken we ons tot $1 \leq n \leq 80$. Dit geeft een vrij goede benadering.



In de linker afbeelding geven de waarde van de waarschijnlijkheidsverdeling $P(x) = |\psi(x, t)|^2$ op tijdstip $t = 0$. Het deeltje is gelokaliseerd in het interval $[3/8, 5/8]$. De kansverdeling is niet geheel vlak, omdat we maar tot $n = 80$ hebben gesommeerd. De totale oppervlakte onder de kromme is 0.989, zodat we er dus ongeveer 1 procent naast zitten. In de rechterafbeelding is $t = 1$ gekozen. De lokalisatie is helemaal verdwenen. Dit volgt uit het feit dat de oorspronkelijke toestand $\psi(x, 0)$ componenten met allerlei verschillende momenta (dwz snelheden van het deeltje) bevat. Na enige tijd geeft iedere component natuurlijk een geheel andere positie van het deeltje. In deze illustraties hebben we $L = m = \hbar = 1$ gekozen.

Alvorens we deze sectie afsluiten moet nog één vraag beantwoord worden. Als de energiën van een deeltje in een doosje gequantiseerd zijn, waarom merken we daar dan niets van voor bijvoorbeeld een knikker in een koekblik? Het antwoord is numeriek. Nemen we een klein deeltje van 1 gram massa in een doosje van 1 cm. Laat het deeltje bewegen met een snelheid van 1 cm per seconde, zodat het met een periode van 2 sec tussen de wanden van het doosje heen en weer kaatst. De klassieke kinetische energie van het deeltje is dan

$$E_{\text{klassiek}} = 5 \times 10^{-8} \text{ Joule} .$$

Stellen we dit gelijk aan de quantummechanische energie, dan kunnen we uitrekenen welke waard van n bij zo'n toestand hoort, en vinden

$$n \approx 3.2 \times 10^{26} .$$

Bij zulke gigantische getallen is het onderscheid tussen E_n en E_{n+1} natuurlijk onmeetbaar klein (althans, op macroscopische schaal). Voor zwaardere deeltjes, grotere dozen of hogere snelheden wordt de spatiëring van de energieniveaux nog weer kleiner. In de klassieke benadering kan de energie daarom als een continue variabele gezien worden.

6 Impulsmoment en spin

6.1 De observabelen van impulsmoment

De structuur van het begrip impulsmoment⁶⁹ bijzonder aantrekkelijk. In veel fysische systemen treedt enige vorm van draaiing rond een middelpunt op, men denke bijvoorbeeld aan het waterstof-atoom. Het aardige van de quantummechanische beschrijving is dat we een heel aantal uitspraken kunnen doen die onafhankelijk zijn van het systeem. Dit volgt uit de algebraïsche structuur van het impulsmoment-systeem.

In de *klassieke* fysica kunnen we impulsmoment als volgt definiëren. Laat een puntdeeltje momentum \vec{p} hebben, en een positie \vec{x} *ten opzichte van een bepaald punt* (dat we het ‘middelpunt’ zullen noemen, ook al heft dit niet in enig opzicht het middelpunt van de beweging te zijn; zelfs hoeft er van enige ‘draaiende’ beweging geen sprake te zijn). Het klassieke impulsmoment \vec{L} van het deeltje ten opzichte van het middelpunt wordt dan gegeven door

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} , \quad (162)$$

waarbij \times het uitwendig product voorstelt. In componenten uitgedrukt hebben we

$$\begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y , \\ L_y &= z p_x - x p_z , \\ L_z &= x p_y - y p_x . \end{aligned} \quad (163)$$

Klassiek valt hierover verder weinig op te merken op twee punten na: als het deeltje onderworpen is aan een kracht die altijd naar het middelpunt toe gericht is (of eventueel er vanaf gericht) is het impulsmoment een behouden grootte, en dus gedurende de gehele beweging constant; verder is de notie van impulsmoment een essentieel drie-dimensionaal object: als de beweging in het (x, y) vlak plaatsheeft is het impulsmoment nog altijd langs de z -as gericht.

In de quantummechanica is het impulsmoment een observabele, waarvoor de corresponderende operator eenvoudig wordt gegeven door de observabelen

⁶⁹Dit wordt ook wel aangeduid met hoekmoment, draaimoment, of draai-impuls. In alle gevallen wordt hiermee precies hetzelfde bedoeld.

van plaats en impuls door hun operatoren te vervangen:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y , \\ \hat{L}_y &= \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z , \\ \hat{L}_z &= \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x .\end{aligned}\tag{164}$$

6.2 De algebra van impulsmoment

Aangezien in het impulsmoment alle plaats- en impulsoperatoren voorkomen, is het commutatiedrag niet noodzakelijkerwijs triviaal. En inderdaad vinden we bijvoorbeeld

$$\begin{aligned}[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x \\ &= (\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y) (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) - (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) (\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y) \\ &= \hat{y} \hat{p}_x [\hat{p}_z, \hat{z}] + \hat{p}_y \hat{x} [\hat{z}, \hat{p}_z] \\ &= i\hbar (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) \\ &= i\hbar \hat{L}_z .\end{aligned}\tag{165}$$

Vanwege de cyclische manier waarop de operatoren gedefinieerd zijn vinden we dan ook onmiddellijk

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z , \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x , \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y .\tag{166}$$

We concluderen het volgende: *de drie componenten van impulsmoment zijn niet commensurabel*. Als we er één meten is de waarde van die component wel-bepaald, maar die van de andere twee *niet*. We kunnen ook de operator voor het kwadraat van het impulsmoment opschrijven: deze luidt

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 .\tag{167}$$

Enig rechttoe-rechtaan rekenwerk laat zien dat deze grootheid *wel* commensurabel is met de componenten:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 .\tag{168}$$

Een dergelijk, onder commutatie in zichzelf gesloten systeem wordt een *Lie-algebra* genoemd. In de fysica zijn zulke algebra's van groot belang voor het

classificeren van de structuur van systemen. Met name de bekende elementaire deeltjes kunnen middels Lie algebra's handig beschreven worden.

Het impulsmoment van een toestand kan dus gekarakteriseerd worden door *twee* getallen: een voor de eigenwaarde van \hat{L}^2 , en een voor de eigenwaarde van een van de andere componenten, waarvoor in de regel (maar niet noodzakelijkerwijs!) de component \hat{L}_z genomen wordt. Zo'n toestand wordt aangegeven met de ket

$$|j, m\rangle$$

en we spreken dan van een toestand met totaal impulsmoment j en z -component m , met dien verstande dat we daarmee *bedoelen* dat de eigenwaarden gegeven worden door

$$\begin{aligned}\hat{L}_z |j, m\rangle &= m \hbar |j, m\rangle , \\ \hat{L}^2 |j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle .\end{aligned}\tag{169}$$

Let op de enigzins tegen-intuïtieve definitie van de eigenwaarde van het totale impulsmoment(-kwadraat)! De reden voor deze conventie zal later duidelijk worden.

6.3 Opwaartse en neerwaartse operatoren

Het zal handig blijken twee andere operatoren te introduceren: de *opwaartse* operator

$$\hat{L}_+ \equiv \hat{L}_x + i\hat{L}_y ,\tag{170}$$

en de *neerwaartse* operator

$$\hat{L}_- \equiv \hat{L}_x - i\hat{L}_y .\tag{171}$$

Omdat deze (zoals blijkt!) niet Hermitisch zijn kunnen ze niet met een observable corresponderen; toch zijn ze bijzonder nuttig. Door gebruik te maken van niets anders dan de algebra-regels (166) vinden we

$$\begin{aligned}\hat{L}_- \hat{L}_+ &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z , \\ \hat{L}_+ \hat{L}_- &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z , \\ [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= 2\hbar \hat{L}_z , \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_+] &= \hbar \hat{L}_+ , \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_-] &= -\hbar \hat{L}_- .\end{aligned}\tag{172}$$

We kunnen nu de volgende redenering opzetten. Laat $|j, m\rangle$ een genormeerde fysische toestand zijn, en laat ons de volgende toestand definiëren:

$$|\psi\rangle = \hat{L}_+ |j, m\rangle . \quad (173)$$

Deze toestand is, net als $|j, m\rangle$, een eigentoestand van \hat{L}_z : we vinden

$$\begin{aligned} \hat{L}_z |\psi\rangle &= \hat{L}_z \hat{L}_+ |j, m\rangle = ([\hat{L}_z, \hat{L}_+] + \hat{L}_+ \hat{L}_z) |j, m\rangle \\ &= (\hbar \hat{L}_+ + m\hbar \hat{L}_+) |j, m\rangle = (m+1)\hbar |\psi\rangle . \end{aligned} \quad (174)$$

Dit verklaart de naam ‘opwaartse operator’: de toestand $|\psi\rangle$ is een eigentoestand van \hat{L}_z , met een eigenwaarde die één hoger is dan die van $|j, m\rangle$: dus⁷⁰

$$\hat{L}_+ |j, m\rangle = C |j, m+1\rangle , \quad (175)$$

waarbij C nog te bepalen valt. Op dezelfde manier vinden we dat

$$\hat{L}_- |j, m\rangle = C' |j, m-1\rangle . \quad (176)$$

De constanten C en C' kunnen gevonden worden door het kwadraat van $|\psi\rangle$ te bekijken:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= |C|^2 \langle j, m | \hat{L}_- (\hat{L}_+ |j, m\rangle) \\ &= |C|^2 \langle j, m | (\hat{L}_- \hat{L}_+) |j, m\rangle \\ &= |C|^2 \langle j, m | \left(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \right) |j, m\rangle \\ &= |C|^2 \langle j, m | (j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2) |j, m\rangle \\ &= |C|^2 \hbar^2 (j-m)(j+m+1) . \end{aligned} \quad (177)$$

We vinden dus de meer precieze relatie

$$|j, m+1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}} \hat{L}_+ |j, m\rangle . \quad (178)$$

Op precies dezelfde wijze komen we tot

$$|j, m-1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}} \hat{L}_- |j, m\rangle . \quad (179)$$

⁷⁰Bedenk dat \hat{L}^2 commuteert met \hat{L}_+ : het totale impulsmoment blijft dus ongewijzigd!

6.4 De mogelijke waarden van het impulsmoment

Door herhaalde toepassing van \hat{L}_+ kunnen we de z-component van het impulsmoment ophogen. Echter, m kan niet willekeurig groot worden, omdat de eigenwaarde van \hat{L}_z^2 natuurlijk niet groter mag zijn dan die van \hat{L}^2 . Op enig moment moet de ‘ladder’ van toestanden afbreken. De relatie (178) geeft aan hoe dit mogelijk is: als m te hoog wordt, wordt de combinatie $(j - m)(j + m + 1)$ nul! Daarmee is de *would-be* toestand $\hat{L}_+|j, m\rangle$ in feite de nul-toestand, die geen acceptabele quantumtoestand van een systeem is. Dit wil zeggen dat de ‘hoogste’ toestand moet voldoen aan $m = j$. Op dezelfde wijze kunnen we beargumenteren dat de ‘laagste’ toestand moet voldoen aan $m = -j$. Voor gegeven j hebben we dus een totaal van $2j + 1$ mogelijke m -waarden:

$$m = -j, -j + 1, -j + 2, \dots, j - 2, j - 1, j. \quad (180)$$

We zien ook dat het verschil in m -waarde van de hoogste en laagste toestand een geheel getal moet zijn⁷¹, dus $2j$ moet een geheel getal zijn. We concluderen de volgende uiterst algemene regels:

1. Voor *ieder* quantumstelsel is het quantumgetal van het totale impulsmoment ofwel heeltallig ($j = 0, 1, 2, 3, \dots$) ofwel halftallig ($j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$);
2. Voor gegeven j zijn er altijd $2j + 1$ waarden voor m , lopend van $m = -j$ tot $m = +j$.

Het is belangrijk dat we ons realiseren dat deze regels altijd gelden, ongeacht het systeem onder beschouwing, of het nu gaat om een deeltje in een doosje, een waterstofatoom, of een kat.

6.5 De plaatsrepresentatie: sferische harmonischen

We kunnen de abstracte technieken, hierboven ontwikkeld, ook toepassen in een meer concrete situatie, namelijk door de plaatsrepresentatie te gebruiken. Het is hierbij het meest efficiënt om poolcoördinaten te gebruiken, waarin

$$x = r \sin(\theta) \cos(\phi), \quad y = r \sin(\theta) \sin(\phi), \quad z = r \cos(\theta) \quad (\theta). \quad (181)$$

⁷¹Immers, we kunnen van de laagste naar de hoogste toestand komen door herhaald \hat{L}_+ toe te passen.

Voeren we ook de volgende grootheden in:

$$v = \sin(\theta) e^{i\phi} \quad , \quad \bar{v} = \sin(\theta) e^{-i\phi} \quad , \quad w = \sqrt{1 - v\bar{v}} = \cos(\theta) \quad , \quad (182)$$

dan blijkt na enig rekenwerk dat in de plaatsrepresentatie de verschillende operatoren de volgende vorm hebben:

$$\hat{L}_+ = 2\hbar w \frac{\partial}{\partial v} \quad , \quad \hat{L}_- = -2\hbar w \frac{\partial}{\partial \bar{v}} \quad , \quad \hat{L}_z = \hbar \left(v \frac{\partial}{\partial v} - \bar{v} \frac{\partial}{\partial \bar{v}} \right) \quad . \quad (183)$$

Zoals te verwachten was, hangen deze alleen van de *hoeken* (v en \bar{v}) af, en *niet* van de straal r . Die gedeelten van de golffunctie die eigentoestanden zijn van het impulsmoment worden *sferische harmonischen* genoemd. Dit zijn functies van θ en ϕ ; we zullen in het kort zien hoe ze verkregen kunnen worden. Hun belang is (zoals boven al aangegeven) gelegen in het feit dat het impulsmoment-gedeelte van een quantummechanisch probleem onafhankelijk van de rest kan worden opgelost.

Laat ons beginnen met *gehele* j . De sferische harmonische $Y_{j,m}$ bestaat uit een combinatie van v 's, \bar{v} 's, en normalisatie-factoren. De *hoogste* toestand voor gegeven j (die met $m = j$) geeft nul als we er \hat{L}_+ op laten werken, met andere woorden ze bevat *geen* \bar{v} :

$$Y_{j,j} = C_j v^j \quad , \quad (184)$$

met zekere C_j en p . Omdat deze toestand een eigentoestand van \hat{L}_z is met eigenwaarde $j\hbar$, kunnen we vinden

$$\hat{L}_z Y_{j,j} = \hbar \left(v \frac{\partial}{\partial v} - \bar{v} \frac{\partial}{\partial \bar{v}} \right) C_j v^j = p\hbar C_j v^j = p\hbar Y_{j,j} \quad , \quad (185)$$

waaruit volgt dat $p = j$:

$$Y_{j,j} = C_j v^j \quad . \quad (186)$$

De normalisatiefactor wordt vastgelegd door te eisen dat

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos(\theta) |Y_{j,m}|^2 = 1 \quad : \quad (187)$$

in het onderhavige geval dus

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos(\theta) |C_j (\sin(\theta))^j e^{ij\phi}|^2 = 4\pi |C_j|^2 \int_0^1 d\cos(\theta) (1 - \cos(\theta)^2)^j \quad . \quad (188)$$

We vinden voor de laagste j -waarden:

$$C_0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad , \quad C_1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \quad , \quad C_2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \quad . \quad (189)$$

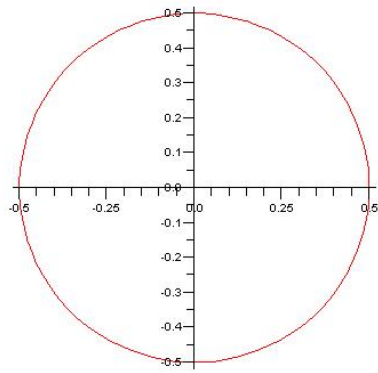
We hebben nu de *vorm* en de *normalizatie* van de ‘hoogste’ sferische harmonischen te pakken: de ‘lagere’ volgen uit herhaalde toepassing van de regel (179). Het is eenvoudig te checken dat in alle gevallen de ‘laagste’ toestand, $Y_{j,-j}$, uitsluitend \bar{v} bevat en niet langer enige v , zodat een verdere toepassing van \hat{L}_- iderdaad nul geeft.

Hieronder geven we de expliciete vorm van de eerste paar sferische harmonischen.

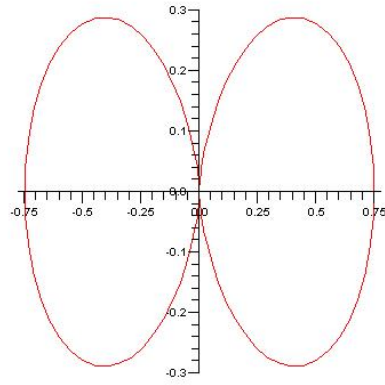
$j = 0$	$j = 1$	$j = 2$
$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$Y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{i\phi}$ $Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta)$ $Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{-i\phi}$	$Y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin(\theta)^2 e^{2i\phi}$ $Y_{2,1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{i\phi}$ $Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos(\theta)^2 - 1)$ $Y_{2,-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{-i\phi}$ $Y_{2,-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin(\theta)^2 e^{-2i\phi}$

We kunnen ook de vorm van $|Y_{j,m}|^2$ weergeven, dat wil zeggen de grootte van de waarschijnlijkheid om het deeltje te vinden als functie van zijn *richting*. De z -as is verticaal, en de figuur moet gedacht worden als een driedimensionaal object geroteerd rond de verticale as. De richting waarin de figuur uitsteekt geeft aan dat het deeltje een grotere waarschijnlijkheid heeft om in die richting gevonden te worden.

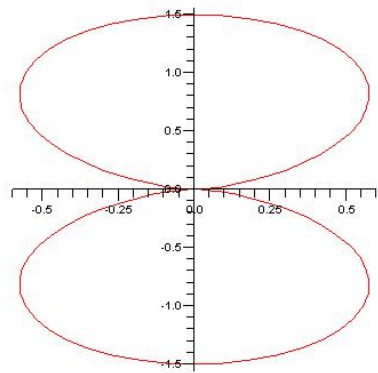
$$|Y_{0,0}|^2$$



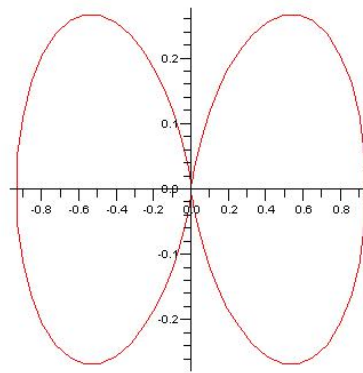
$$|Y_{1,1}|^2$$

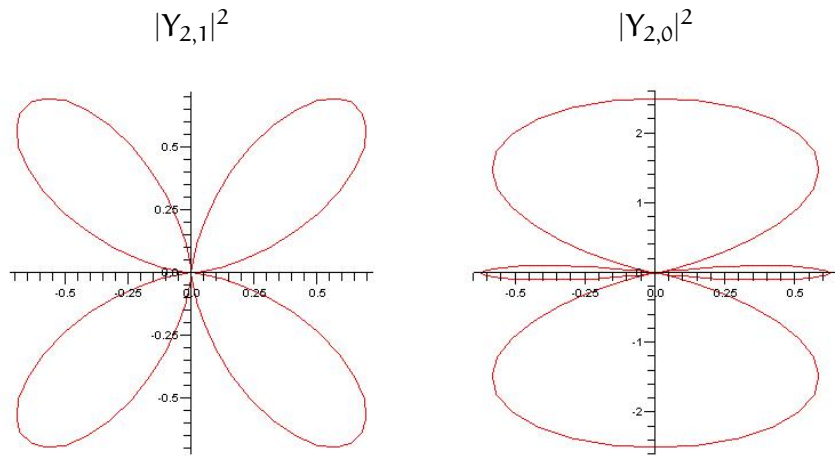


$$|Y_{1,0}|^2$$



$$|Y_{2,2}|^2$$





Bovenstaande figuren vereisen natuurlijk een zorgvuldige interpretatie: wel geeft het aan dat zelfs zoiets eenvoudigs als een waterstofatoom lang niet altijd als een ‘bolletje gezien kan worden!

6.6 Halftallige spins

We zouden ook een plaatsrepresentatie voor halftallige spins kunnen voorstellen. In het geval $j = 1/2$ zou dan de sferische harmonische $Y_{1/2,1/2}$ evenredig zijn met $v^{1/2}$. In dat geval blijkt echter dat na twee toepassingen van \hat{L}_- niet de nultoestand wordt gevonden, en we tuimelen een oneindige reeks van toestanden af met steeds hogere (negatieve) spin. Klaarblijkelijk kan halftallige spin niet voorkomen in een toestand met een plaatsrepresentatie. Zijn zulke toestanden dan irreal?

Integendeel! We zijn immers niet gebonden aan de plaatsrepresentatie, en *iedere* set operatoren die de commutatie-algebra (refLalgebra) voldoen is in principe geschikt. We geven hiervan een eenvoudig (maar belangrijk!) voorbeeld. Laat ons de *matrices* σ^j ($j = x, y, z$) definiëren als

$$\sigma^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (190)$$

Deze matrices voldoen precies aan de Lie-algebra relaties (166):

$$[\sigma^x, \sigma^y] = i\hbar \sigma^z , \quad [\sigma^y, \sigma^z] = i\hbar \sigma^x , \quad [\sigma^z, \sigma^x] = i\hbar \sigma^y . \quad (191)$$

Bovendien hebben we

$$(\sigma^x)^2 = (\sigma^y)^2 = (\sigma^z)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (192)$$

zodat

$$\vec{\sigma}^2 \equiv (\sigma^x)^2 + (\sigma^y)^2 + (\sigma^z)^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (193)$$

en inderdaad commuteert deze matrix met σ^x , σ^y , en σ^z .

Deze matrices stellen ons in staat een iets gecompliceerdere golf functie te contrueren, namelijk een die *twee* componenten heeft:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}. \quad (194)$$

Zo'n toestand wordt een *spinor* genoemd. Het impulsmoment wordt in dit geval met de term *spin* aangeduid. Als we voor het gemak de plaatsafhankelijkheid even verwaarlozen, vinden we de eigenspinoren van σ^z :

$$\sigma^z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (195)$$

Deze spinoren kunnen dus geïnterpreteerd worden als beschrijvingen van een deeltje met spin 1/2; en dit is consistent met de vorm van $\vec{\sigma}^2$ omdat $3/4 = (1/2)(1 + 1/2)$. Er zijn natuurlijk ook eigenspinoren voor de andere matrices:

$$\sigma^x \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \sigma^x \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (196)$$

en

$$\sigma^y \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \sigma^y \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (197)$$

Het is onmiddellijk te zien dat deze eigenspinoren *niet* orthogonaal zijn met die van σ^z : weer een aanwijzing dat de verschillende componenten van de spin niet commensurabel zijn.

Bovenstaande zou gezien kunnen worden als niet meer dan een wiskundige curiositeit, ware het niet dat het in de natuur gerealiseerd blijkt: het *electron* is een deeltje met *intrinsieke* spin 1/2, en wordt dus beschreven door

twee-componentige spinoren⁷². Het electron heeft dus twee bijdragen aan zijn totale impulsmoment, één tengevolge van de x-afhankelijkheid van de spinor-componenten, en één tengevolge van het feit dat er precies twee componenten zijn.

De spin van een deeltje is een *intrinsieke* eigenschap waaraan experimenteel niets te veranderen valt. *Elementaire* deeltjes met hogere spin zijn ook voorstelbaar: zo zijn bijvoorbeeld fotonen, W en Z bosonen, en gluonen onderworpen aan een systeem analoog aan dat van vergelijking (190) maar met 3×3 matrices: deze hebben intrinsieke spin 1. Een systeem van 4×4 matrices beschrijft een deeltje met spin $3/2$, enzovoorts: deze hogere-spin deeltjes zijn als *elementaire* deeltjes nooit waargenomen⁷³.

6.7 Samengestelde spins

Een systeem van meerdere deeltjes met elk een intrinsieke spin heeft natuurlijk ook een intrinsieke spin. Laat ons een electron met eigenwaarde $\hbar/2$ onder σ^z aanduiden met $|\uparrow\rangle$, en een met eigenwaarde $-\hbar/2$ met $|\downarrow\rangle$. Een combinatie van een electron in de toestand $|\uparrow\rangle$ en een in de toestand $|\downarrow\rangle$ kan dan worden geschreven als $|\uparrow\downarrow\rangle$. Zonder in de technische details te treden, kan gesteld worden dat twee electronen (of andere spin-1/2 deeltjes) kunnen combineren tot een systeem van totale spin 0 of totale spin 1. De relevante combinaties zijn

$$\begin{aligned}
 s = 0, m = 0 & : (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) / \sqrt{2} , \\
 s = 1, m = 1 & : |\uparrow\uparrow\rangle , \\
 s = 1, m = 0 & : (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) / \sqrt{2} , \\
 s = 1, m = -1 & : |\downarrow\downarrow\rangle .
 \end{aligned}
 \tag{198}$$

Samenstellingen van andere spins, of van meer spins⁷⁴ komen natuurlijk ook voor. In het algemeen geldt dat als een spin (of impulsmoment) j_1

⁷²In de *relativistische* quantummechanica bevat de golffunctie zelfs 4 componenten, twee voor het electron, en twee voor het anti-electron, ofwel positron.

⁷³In bijvoorbeeld de zogenaamde *supergravitatie* worden spin-2 en spin-3/2 deeltjes voorspeld. Overigens zijn *samengestelde* deeltjes van hogere spin wel bekend.

⁷⁴Een proton bestaat uit drie quarks, elk met spin 1/2. De spin van het proton is dus een samenstelsel van drie spin-1/2 toestanden.

samengesteld wordt met een spin j_2 , de totale spin van het systeem ligt tussen $|j_1 - j_2|$ en $j_1 + j_2$.

7 Appendix: enige wiskundige achtergrond

7.1 Faculteiten

Voor een natuurlijk getal n definiëren we zijn *faculteit* als

$$n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot \dots \cdot (n-1) \cdot n . \quad (199)$$

Dat wil zeggen, $1! = 1$, $2! = 1 \cdot 2 = 2$, $3! = 1 \cdot 2 \cdot 3 = 6$, $4! = 24$, $5! = 120$, enzovoorts. We zien dat

$$n! = (n-1)! \cdot n \quad (200)$$

Deze eigenschap aanhoudend, kunnen we dus ook zeggen dat $1! = 0! \cdot 1$, ofwel $0! = 1$. Verder geeft dit $0! = (-1)! \cdot 0$, zodat $(-1)!$, $(-2)!$, $(-3)!$ alle oneindig moeten zijn.

Het is mogelijk het begrip faculteit uit te breiden naar niet-gehele getallen, gebaseerd op de fundamentele eigenschap (200). Bijvoorbeeld,

$$(1/2)! = \frac{\sqrt{\pi}}{2} , \quad (201)$$

waaruit dan weer volgt $(-1/2)! = \sqrt{\pi}$, $(3/2)! = 3\sqrt{\pi}/4$, enzovoorts.

7.2 Complexe getallen

Complexe getallen zijn een generalizatie van de bekende reële getallen zoals $0, 1, -4$, en $3.1415926536\dots$. Waar wij reële getallen naar hartelust kunnen optellen, aftrekken, vermenigvuldigen, delen⁷⁵, en machtsverheffen, leidt de bewerking van het nemen van een vierkantswortel soms tot problemen: wat is de wortel uit -1 ? Immers, het kwadraat van een reëel getal is altijd minstens nul! De complexe getallen maken het mogelijk willekeurige wortels te nemen. We voeren een nieuw getal in, aangegeven door i , met als belangrijkste eigenschap dat zijn kwadraat *negatief* is:

$$(i)^2 = -1 . \quad (202)$$

Een complex getal z kan altijd geschreven worden als

$$z = a + ib , \quad (203)$$

⁷⁵Behalve natuurlijk delen door 0.

waarbij \mathbf{a} en \mathbf{b} reëel zijn; \mathbf{a} wordt het *reële* gedeelte van z genoemd, en \mathbf{b} het *imaginaire* gedeelte. We schrijven $\mathbf{a} = \text{Re}(z)$ en $\mathbf{b} = \text{Im}(z)$. Reële getallen zijn eenvoudigweg speciale gevallen van de complexe getallen, namelijk die waarvoor het imaginaire gedeelte nul is. Verdere bewerkingen zijn precies als voor de reële getallen. Bijvoorbeeld,

$$\begin{aligned} z^2 &= (\mathbf{a} + i\mathbf{b})^2 = \mathbf{a}^2 + 2(\mathbf{a})(i\mathbf{b}) + (i\mathbf{b})^2 \\ &= (\mathbf{a}^2 - \mathbf{b}^2) + i(2\mathbf{a}\mathbf{b}) . \end{aligned} \quad (204)$$

Het *complex geconjugeerde* van het getal $z = \mathbf{a} + i\mathbf{b}$ is het getal

$$z^* = \mathbf{a} - i\mathbf{b} . \quad (205)$$

Complexe conjugatie voor getallen is het vervangen van i door $-i$. Zo hebben we dus ook

$$(z^*)^* = z . \quad (206)$$

De *absolute waarde* $|z|$ van het complexe getal z is een niet-negatief reëel getal gedefinieerd door

$$|z|^2 \equiv z^*z = (\mathbf{a} - i\mathbf{b})(\mathbf{a} + i\mathbf{b}) = \mathbf{a}^2 + \mathbf{b}^2 . \quad (207)$$

We zien dat als $|z| = 0$, dan geldt $\mathbf{a} = \mathbf{b} = 0$ dus $z = 0$. Complexe getallen zijn in de wiskunde bijzonder belangrijk om de volgende reden: als $\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$ willekeurige (reële of complexe) getallen zijn, dan heeft de vergelijking

$$\mathbf{a}_0 + \mathbf{a}_1z + \mathbf{a}_2z^2 + \mathbf{a}_3z^3 + \dots + \mathbf{a}_nz^n = 0$$

altijd n oplossingen, die allemaal (reële of) complexe getallen zijn. Voor reële getallen geldt dit niet, immers de vergelijking $1 + z^2 = 0$ heeft geen reële oplossingen. De complexe getallen vormen een systeem dat, wat de meeste bewerkingen betreft, in zichzelf gesloten is.

7.3 Machten van e

Een bijzondere plek wordt ingenomen door *complexe fases*, dwz complexe getallen z waarvoor $|z| = 1$. Laat zo'n getal gegeven worden door $z = \mathbf{a} + i\mathbf{b}$: dan geldt $\mathbf{a}^2 + \mathbf{b}^2 = 1$. we kunnen daarom schrijven

$$|z| = 1 \Rightarrow z = \cos(\phi) + i \sin(\phi) , \quad (208)$$

waarbij ϕ een hoek tussen 0 en 2π voorstelt⁷⁶. We voeren nu het getal e in, op de volgende manier. Neem een willekurig getal x , dan geldt

$$\begin{aligned} \exp(x) &\equiv e^x \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n \\ &= 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{24}x^4 + \frac{1}{120}x^5 + \dots \end{aligned} \quad (209)$$

Voor het getal e zelf geldt dus dat

$$\begin{aligned} e &= e^1 = 1 + \frac{1}{1} + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \frac{1}{24} + \frac{1}{120} + \dots \\ &= 2.718281828459\dots \end{aligned} \quad (210)$$

Laat ons nu x gelijk nemen aan $i\phi$. Dan vinden we, middels de relaties $i^2 = -1$, $i^3 = -i$, en $i^4 = 1$, de volgende reeks:

$$\begin{aligned} e^{i\phi} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \phi^n \\ &= 1 + i\phi - \frac{1}{2}\phi^2 - \frac{i}{6}\phi^3 + \frac{1}{24}\phi^4 + \frac{i}{120}\phi^5 \\ &= \left(1 - \frac{1}{2}\phi^2 + \frac{1}{24}\phi^4 - \frac{1}{720}\phi^6 + \dots\right) \\ &\quad + i \left(\phi - \frac{1}{6}\phi^3 + \frac{1}{120}\phi^5 - \frac{1}{5040}\phi^7 + \dots\right) \\ &= \cos(\phi) + i \sin(\phi) . \end{aligned} \quad (211)$$

We kunnen dus schrijven

$$|z| = 1 \Rightarrow z = e^{i\phi} , \quad (212)$$

en daarmee kunnen we *elk* complex getal schrijven als

$$z = r e^{i\phi} , \quad r = |z| . \quad (213)$$

⁷⁶Wij gebruiken de wiskundige conventie waarbij hoeken niet worden uitgedrukt in graden tussen 0 en 360, maar in *radialen* tussen 0 en 2π . Eén radiaal komt dan overeen met $360/(2\pi) = 57.2958$ graden.

De grootheid r is de absolute waarde van z , en ϕ wordt het *argument* van z genoemd. Een interessante gevolgtrekking van de relatie

$$e^{in\phi} = (e^{i\phi})^n$$

is de volgende formule:

$$(\cos(\phi) + i \sin(\phi))^n = \cos(n\phi) + i \sin(n\phi) , \quad (214)$$

die ons in staat stelt grootheden als bv. $\cos(3\phi)$ uit te rekenen:

$$\begin{aligned} \cos(3\phi) &= \operatorname{Re} (\cos(3\phi) + i \sin(3\phi)) \\ &= \operatorname{Re} ((\cos(\phi) + i \sin(\phi))^3) \\ &= \operatorname{Re} (\cos(\phi)^3 + 3i \cos(\phi)^2 \sin(\phi) - 3 \cos(\phi) \sin(\phi)^2 - i \sin(\phi)^3) \\ &= \cos(\phi)^3 - 3 \cos(\phi) \sin(\phi)^2 . \end{aligned} \quad (215)$$

Tevens vinden we meteen

$$\sin(3\phi) = 3 \cos(\phi)^2 \sin(\phi) - \sin(\phi)^3 . \quad (216)$$

7.4 De Kronecker delta

In veel beschouwingen waarin discrete variabelen voorkomen is het handig een functie van twee van die discrete variabelen te definiëren. Dit is de zogenaamde *Kronecker delta*, die gegeven wordt door

$$\delta_{\mathbf{a},\mathbf{b}} = \begin{cases} 1 & \text{als } \mathbf{a} = \mathbf{b} \\ 0 & \text{als } \mathbf{a} \neq \mathbf{b} \end{cases} \quad (217)$$

Hierbij zijn \mathbf{a} en \mathbf{b} twee van de discrete variabelen. Met andere woorden: de Kronecker delta schakelt gevallen uit waarin twee variabelen niet aan elkaar gelijk zijn. Dit komt met name tot uiting als we *sommen* nemen over functies van de variabelen:

$$\sum_{\mathbf{a}} \delta_{\mathbf{a},\mathbf{b}} f(\mathbf{b}) = f(\mathbf{a}) . \quad (218)$$

7.5 Waarschijnlijkheden en kansberekening

We zullen hier een paar begrippen uit de statistiek bekijken. Stellen wij ons een proces voor welks uitkomst niet bij voorbaat vaststaat: het werpen met een dobbelsteen is een redelijk goed voorbeeld. Laten we het iets abstracter formuleren en zeggen: de mogelijke uitkomsten van de meting van de observabele A zijn $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \dots, \mathbf{a}_N$. In het geval van de dobbelsteen is bijvoorbeeld $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_6\} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. We definiëren de *kans* om uitkomst \mathbf{a}_k te vinden als volgt: we herhalen het proces een groot aantal keren. Als de *fractie* van de gevallen waarin het proces uitkomst \mathbf{a}_k geeft gelijk nadert tot een waarde p_k , dan zeggen we $P(A = \mathbf{a}_k) = p_k$, ofwel in woorden: de kans om \mathbf{a}_k te vinden als uitkomst van de meting van A is gelijk aan p_k . Zo is voor een goede dobbelsteen $P(2) = 1/6$, en $P(7) = 0$ omdat 7 nooit de uitkomst kan zijn van het werpen met een enkele dobbelsteen⁷⁷. Voor kansen moet het volgende gelden:

$$P(A = \mathbf{a}_k) \geq 0 \quad , \quad (219)$$

ofwel een kans mag nooit negatief zijn; verder moet de kans op *welke uitkomst dan ook* precies 100% zijn, ofwel

$$\sum_{k=1}^N P(A = \mathbf{a}_k) = 1 \quad . \quad (220)$$

Als er geen verwarring kan ontstaan mogen we $P(A = \mathbf{a}_k)$ ook wel afkorten tot $P(\mathbf{a}_k)$, net als bij kets.

De *verwachtingswaarde* van de grootheid A is het *gemiddelde* van de gevonden waarde bij een groot aantal herhalingen van het proces. Dit bestaat uit de som van alle mogelijke uitkomsten, gewogen met de kans op elke uitkomst. Voor de verwachtingswaarde van A schrijven we $\langle A \rangle$, en

$$\langle A \rangle = \sum_{k=1}^N \mathbf{a}_k P(A = \mathbf{a}_k) \quad . \quad (221)$$

Het is makkelijk te zien dat de verwachtingswaarde moet liggen tussen de kleinst mogelijke en grootst mogelijke waarde van \mathbf{a}_k , maar de verwachtingswaarde hoeft zelf niet een mogelijke uitkomst te zijn. Voor de dobbelsteen

⁷⁷Dit is de zogenaamde *frequentistische* definitie van kans. Er bestaat ook een zgn. *Bayesiaanse* definitie die wij niet zullen gebruiken.

vinden we bijvoorbeeld

$$\langle A \rangle = \frac{1}{6}1 + \frac{1}{6}2 + \frac{1}{6}3 + \frac{1}{6}4 + \frac{1}{6}5 + \frac{1}{6}6 = \frac{1}{6}(1+2+3+4+5+6) = \frac{21}{6} = \frac{7}{2} . \quad (222)$$

De verwachtingswaarde van de *som* van twee grootheden is de som van hun verwachtingswaarden:

$$\langle A + B \rangle = \langle A \rangle + \langle B \rangle , \quad (223)$$

en voor het vermenigvuldigen van een grootheid met een constante hebben we

$$\langle c A \rangle = c \langle A \rangle \quad (224)$$

als c een vast getal is. Aangezien een meting van A ook een meting van A^2 impliceert⁷⁸ kunnen we ook over de verwachtingswaarde van A^2 spreken: dit is natuurlijk

$$\langle A^2 \rangle = \sum_{k=1}^N a_k^2 P(A = a_k) , \quad (225)$$

en zo voort voor hogere machten van A . Voor onze dobbelsteen vinden we

$$\langle A^2 \rangle = \frac{1}{6} (1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2 + 6^2) = \frac{91}{6} . \quad (226)$$

Om een indruk te krijgen van de algemene vorm van de kansverdeling over alle mogelijke uitkomsten is het niet voldoende alleen te weten wat de *gemiddelde* uitkomst is: we willen vaak ook weten in welke mate de mogelijke uitkomsten afwijken van de verwachtingswaarde. De *afwijking van het gemiddelde* van A is natuurlijk $A - \langle A \rangle$: maar de gemiddelde waarde hiervan is precies nul. Daarom bekijken we het gemiddelde van het *kwadraat* van deze afwijking. Dit heet de *variantie* van A en wordt aangegeven met $\sigma(A)^2$:

$$\sigma(A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad (227)$$

Omdat $\langle A \rangle$ een gewoon *getal* is, hebben we

$$\begin{aligned} \sigma(A)^2 &= \langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - 2 \langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 . \end{aligned} \quad (228)$$

⁷⁸Immers, als we A weten weten ook meteen wat A^2 is.

De *spreiding* is de wortel uit de variantie. We kunnen eenvoudig inzien dat de spreiding van de mogelijke uitkomsten voor de dobbelsteen gelijk is aan

$$\sigma(A) = \sqrt{\frac{91}{6} - \left(\frac{7}{2}\right)^2} = \sqrt{\frac{91}{6} - \frac{49}{4}} = 1.7078\dots \quad (229)$$

De variantie is altijd minstens nul, zoals we uit de definitie kunnen zien. De volgende stelling geldt: als de variantie *nul* is, is er slechts één mogelijke uitkomst, en is de kans op iedere andere uitkomst gelijk aan nul.

Contents

1	Het falen van de klassieke natuurkunde	2
1.1	Dispuut over de aard van het licht	2
1.2	Het golfkarakter van licht	4
1.3	Het spectrum en de stabiliteit van het atoom	6
1.4	Het foto-electrisch effect	8
1.5	Het deeltjeskarakter van licht	9
1.6	De constanten van Planck en Dirac	12
1.7	Het golfkarakter van deeltjes	15
1.8	Het atoommodel van Bohr: quantisatie	17
1.9	Het twee-spleten experiment op de keper: quantum-interferentie	21
1.10	Het twee-spleten experiment op de keper: pad-integralen . . .	22
2	Quantum-mechanische beschrijving van de natuur	24
2.1	Systemen, toestanden en hun ‘kets’	24
2.2	Het superpositie-beginsel	26
2.3	De interpretatie van superposities	27
2.4	Het ‘meetprobleem’	29
2.5	Geconjugeerde toestanden en ‘bras’	30
2.6	Het ‘inwendig product’ van toestanden	31
2.7	Samenvatting	34
3	Observabelen	35
3.1	Het doen van een meting met resultaat	35
3.2	Observabelen, operatoren en eigentoestanden	37
3.3	Hermitische operatoren	39
3.4	Waarschijnlijkheden, verwachtingswaarden en onzekerheid . .	39
3.5	Commuterende en niet-commuterende operatoren	41
3.6	De onzekerheidsrelaties van Heisenberg	44
4	De Schrödingervergelijking	46
4.1	De noodzaak van een ‘bewegingsvergelijking’	46
4.2	De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking en de Hamiltoniaan	46
4.3	Strategie voor oplossingen: de tijdsafhankelijke Schröding- ervergelijking	48
4.4	De Heisenberg/Ehrenfest vergelijking	50
4.5	Een vrij deeltje: de fundamentele commutator	51

4.6	De Ehrenfest vergelijking: Newton's tweede wet	53
4.7	Systemen in drie dimensies	54
5	Representaties en golffuncties	55
5.1	De plaats-representatie en de golffunctie ψ	55
5.2	Plaats en impuls in de plaatsrepresentatie	57
5.3	De Schrödingervergelijkingen	58
5.4	Echte impulsen, vlakke golven	59
5.5	Verandering van representatie	61
5.6	Toepassing: deeltje in een doosje	63
6	Impulsmoment en spin	68
6.1	De observabelen van impulsmoment	68
6.2	De algebra van impulsmoment	69
6.3	Opwaartse en neerwaartse operatoren	70
6.4	De mogelijke waarden van het impulsmoment	72
6.5	De plaatsrepresentatie: sferische harmonischen	72
6.6	Halfvallige spins	76
6.7	Samengestelde spins	78
7	Appendix: enige wiskundige achtergrond	80
7.1	Faculteiten	80
7.2	Complexe getallen	80
7.3	Machten van e	81
7.4	De Kronecker delta	83
7.5	Waarschijnlijkheden en kansberekening	84