

Quantum Mechanics Inleiding

Jeroen Vermeulen

Inhoudsopgave

1	Het atoommodel van Bohr	1
1.1	Waarom werkt het model van Bohr?	2
1.2	Het Bohr-model heeft beperkingen	2
2	Het atoommodel van Bohr wiskundig gezien	4
2.1	Postulaten (Bohr, 1913)	4
2.2	Dynamica: Coulombkracht als centripetale kracht	4
2.3	Quantisatie van het impulsmoment en straal van de banen	5
2.4	Snelheden en de fijnstructuurconstante	6
2.5	Energieën van de stationaire toestanden	6
2.5.1	Spectrale lijnen: Rydberg-formule	7
2.6	Verbetering: gereduceerde massa (kern niet oneindig zwaar)	9
2.7	De Broglie-herinterpretatie (brug naar golven)	9
2.8	Beperkingen (conceptueel belangrijk)	9
2.8.1	Wat is QED?	10
3	Kwantummechanica een nieuwe theorie	11
4	operator-formalisme	12
4.1	Operator-formalisme in de Quantummechanica: Functionaal-analytische formulering	12
4.2	Hilbertruimte-structuur	12
4.3	Lineaire Operatoren en Domeinen	12
4.4	Adjoints, Symmetrie en Zelf-adjunctheid	13
4.5	Continue Spectra en Rigged Hilbert Space	14
4.6	Tijdsevolutie en Stone's Theorem	14
4.7	Onzekerheidsrelatie in Algemene Vorm	15
5	De Golf functie en haar interpretatie van het dubbel-spleet experiment	16
5.1	Herhaling: Complexe getallen en hun rol in de quantummechanica	17
5.1.1	Definitie van complexe getallen	17
5.1.2	Rekenregels	17
5.1.3	Complex geconjugeerde en modulus	17

5.1.4	Geometrische interpretatie	18
5.1.5	Poolcoördinaten en exponentiële vorm	18
5.1.6	Eigenschappen van de exponentiële vorm	18
5.1.7	Complexe differentieerbaarheid	19
5.1.8	Lineaire structuur	19
5.1.9	Waarom complexe getallen fundamenteel zijn	19

Samenvatting

Dit document biedt een kritische inleiding tot de overgang van de klassieke natuurkunde naar de moderne kwantummechanica, met een specifieke focus op de evolutie van atoommodellen. Centraal staat het atoommodel van Bohr, dat een revolutionaire stap betekende door de introductie van kwantisering in de atomaire structuur.

De kern van deze verhandeling analyseert de drie postulaten van Bohr:

1. De existentie van stationaire banen waarin elektronen geen straling uitzenden.
2. De voorwaarde voor kwantisering van het impulsmoment: $L = n\hbar$.
3. De frequentievoorwaarde bij elektronenovergangen tussen energieniveaus.

Hoewel het model van Bohr succesvol de spectraallijnen van waterstof verklaarde, worden de fundamentele beperkingen ervan besproken, zoals het onvermogen om spectra van complexere atomen te voorspellen en het negeren van de golf-deeltje dualiteit. Tot slot wordt uiteengezet hoe deze tekortkomingen de noodzaak creëerden voor het kwantummechanisch atoommodel van Schrödinger. Hierbij verschuift het paradigma van deterministische banen naar de probabilistische benadering van de golffunctie (ψ), gebaseerd op de fundamentele Schrödingervergelijking.

Hoofdstuk 1

Het atoommodel van Bohr

“The more success the quantum theory has, the sillier it looks.”

Albert Einstein

Het atoommodel van Bohr, geïntroduceerd in 1913, was een baanbrekende stap in de ontwikkeling van de kwantummechanica. Het gaf ons een eerste inzicht in de structuur van het atoom en de manier waarop elektronen zich gedragen. Bohr stelde drie postulaten voor die de structuur van het atoom beschrijven:

- Elektronen mogen alleen bewegen in bepaalde banen (schillen) rond de kern. Deze banen hebben een vaste energie en worden stationaire banen genoemd. Er is geen energieverlies door straling zolang het elektron zich in een stationaire baan bevindt.
- Kwantificatie van energie:
Niet alle banen zijn toegestaan; alleen die banen waarbij het impuls-moment van het elektron een geheel veelvoud is van $\hbar$ (de gereduceerde Planck-constante) zijn toegestaan. Dit wordt uitgedrukt als $L = n\hbar$, waarbij n een positief geheel getal is.
De energie van een elektron in een stationaire baan is gekwantificeerd en kan worden berekend met behulp van de formule $E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$ voor het waterstofatoom. n is ook hier een geheel getal, ook wel het hoofdkwantumgetal genoemd.
- Lichtemissie en -absorptie:
Een elektron kan van de ene stationaire baan naar de andere springen door het absorberen of uitzenden van een foton. De energie van het foton komt overeen met het verschil in energie tussen de twee banen, wat wordt uitgedrukt als $E_{\text{foton}} = E_{\text{hoger}} - E_{\text{lager}}$. Een elektron zendt licht uit wanneer het van een hogere naar een lagere baan springt, en absorbeert

licht wanneer het van een lagere naar een hogere baan springt. De energie van het foton kan ook worden uitgedrukt in termen van de frequentie van het licht: $E_{\text{foton}} = h\nu$, waarbij h de Planck-constante is en ν de frequentie van het licht. De Planck-constante is een fundamentele constante in de natuurkunde die de kwantisering van energie en impulsmoment beschrijft en heeft een waarde van ongeveer 6.626×10^{-34} joule-seconden. De frequentie van het licht is gerelateerd aan de golflengte door de formule $\nu = \frac{c}{\lambda}$, waarbij c de snelheid van het licht is en λ de golflengte van het licht. Hoe hoger de energie van het foton, hoe hoger de frequentie en hoe korter de golflengte van het licht. Hoe lager de energie van het foton, hoe lager de frequentie en hoe langer de golflengte van het licht. Hoe hoger de frequentie van het licht, hoe meer energie het foton heeft. Hoe lager de frequentie van het licht, hoe minder energie het foton heeft. Zo hebben de kleuren rood en oranje een lagere frequentie en minder energie dan de kleuren blauw en violet.

1.1 Waarom werkt het model van Bohr?

Het model van Bohr verklaart:

- De stabiliteit van atomen:
Volgens de klassieke natuurkunde zouden elektronen continu energie moeten verliezen door straling terwijl ze rond de kern draaien, wat zou leiden tot instabiliteit van atomen.
- Het emissiespectrum van waterstof:
Bohr's model verklaart de discrete lijnen in het emissiespectrum van waterstof, die overeenkomen met de energiever verschillen tussen de stationaire banen.
- waarom energieniveaus van atomen gekwantificeerd zijn:

volgens het waterstofatoom klopt het exact met de experimenten.

1.2 Het Bohr-model heeft beperkingen

Hoewel het model van Bohr succesvol was in het verklaren van het gedrag van het waterstofatoom, heeft het verschillende beperkingen:

- Het model kan niet de spectra van complexere atomen verklaren, zoals helium of lithium, omdat het geen rekening houdt met de interacties tussen meerdere elektronen.
- Het model negeert de golf-deeltje dualiteit van elektronen, wat later werd erkend als een fundamenteel aspect van de kwantummechanica.

- Het model is niet in staat om de fijne structuur van spectraallijnen te verklaren, die wordt veroorzaakt door relativistische effecten en de spin van elektronen.
- elektronen bewegen niet echt in cirkelvormige banen, maar hebben een meer complexe beweging die beter wordt beschreven door de golffunctie in de Schrödingervergelijking.

Daarom zal het later ook vervangen worden door het kwantummechanisch atoommodel van Schrödinger, dat een meer nauwkeurige en uitgebreide beschrijving biedt van de structuur en het gedrag van atomen.

Hoofdstuk 2

Het atoommodel van Bohr wiskundig gezien

Nu we de postulaten van Bohr hebben besproken, kunnen we deze wiskundig formuleren en analyseren.

We beginnen met een herhaling van de zaken die we in het vorige hoofdstuk hebben besproken:

2.1 Postulaten (Bohr, 1913)

Bohr introduceerde (in moderne notatie) de volgende kernideeën voor het waterstofachtige atoom (kernlading $+Ze$ en één elektron):

1. Het elektron kan zich enkel in *stationaire banen* bevinden zonder straling uit te zenden.
2. Enkel bij een overgang $n \rightarrow m$ wordt straling uitgezonden/geabsorbeerd met

$$h\nu = E_n - E_m.$$

3. De baanimpuls is gequantiseerd:

$$L = m_e v r = n\hbar, \quad n \in \mathbb{N}.$$

2.2 Dynamica: Coulombkracht als centripetale kracht

Neem een cirkelbaan met straal r en snelheid v . De Coulombkracht levert de centripetale kracht:

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (2.1)$$

De uitkomst wordt uitgedrukt in Newton (N)

Definieer voor compactheid

$$k \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0}.$$

Dan wordt (2.1)

$$m_e v^2 = \frac{kZe^2}{r}. \quad (2.2)$$

e is de elementaire lading en wordt uitgedrukt in Coulomb (C)
 ϵ_0 is de permittiviteit van het vacuüm en wordt uitgedrukt in Farad per meter (F/m)
 r is de afstand van het elektron tot de kern en wordt uitgedrukt in meter (m)
 m_e is de massa van het elektron en wordt uitgedrukt in kilogram (kg)
 v is de snelheid van het elektron en wordt uitgedrukt in meter per seconde (m/s)

2.3 Quantisatie van het impulsmoment en straal van de banen

Uit $L = m_e v r = n\hbar$ volgt

$$v = \frac{n\hbar}{m_e r}. \quad (2.3)$$

Combineer (2.2) en (2.3):

$$m_e \left(\frac{n\hbar}{m_e r} \right)^2 = \frac{kZe^2}{r} \quad (2.4)$$

$$\frac{n^2 \hbar^2}{m_e r^2} = \frac{kZe^2}{r} \quad (2.5)$$

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e k Z e^2}. \quad (2.6)$$

Voor $Z = 1$ definieert men de *Bohrstraal*

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{m_e k e^2} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}, \quad (2.7)$$

zodat

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_0. \quad (2.8)$$

waarbij $\hbar$ de gereduceerde Planck-constante is, m_e de massa van het elektron, k de constante gedefinieerd als $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$, Z de kernlading, en e de elementaire lading. De Bohrstraal a_0 is een fundamentele lengte-eenheid in de atoomfysica en heeft een waarde van ongeveer 0.529 Ångström (Å), wat overeenkomt met de straal van de grondtoestand van het waterstofatoom.

2.4 Snelheden en de fijnstructuurconstante

Uit (2.2) en (2.6) volgt ook een eenvoudige uitdrukking voor v_n . Gebruik (2.3) met $r = r_n$:

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e r_n} = \frac{n\hbar}{m_e} \frac{m_e k Z e^2}{n^2 \hbar^2} = \frac{k Z e^2}{n \hbar}. \quad (2.9)$$

Met α de fijnstructuurconstante,

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{k e^2}{\hbar c},$$

krijg je

$$\frac{v_n}{c} = \frac{Z\alpha}{n}. \quad (2.10)$$

Dit toont meteen de *consistentievoorwaarde* voor een niet-relativistische behandeling: $Z\alpha/n \ll 1$.

waarbij:

v_n de snelheid van het elektron in baan n is en wordt uitgedrukt in meter per seconde (m/s)

n het hoofdkwantumgetal is (een positief geheel getal)

$\hbar$ de gereduceerde Planck-constante is ($\hbar = h/2\pi \approx 1.055 \times 10^{-34}$ J·s)

m_e de massa van het elektron is ($\approx 9.109 \times 10^{-31}$ kg)

r_n de straal van de n -de baan is en wordt uitgedrukt in meter (m)

k de constante is gedefinieerd als $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ ($\approx 8.988 \times 10^9$ N·m²/C²)

Z de kernlading is (het aantal protonen in de kern)

e de elementaire lading is ($\approx 1.602 \times 10^{-19}$ C)

α de fijnstructuurconstante is, een dimensieloze natuurconstante ($\alpha \approx 1/137 \approx 0.0073$)

ϵ_0 de permittiviteit van het vacuüm is ($\approx 8.854 \times 10^{-12}$ F/m)

c de lichtsnelheid in vacuüm is ($\approx 2.998 \times 10^8$ m/s)

2.5 Energieën van de stationaire toestanden

De totale mechanische energie is

$$E = T + V,$$

met kinetische energie $T = \frac{1}{2}m_e v^2$ en potentiële energie

$$V(r) = -k \frac{Z e^2}{r}.$$

Gebruik (2.2): $m_e v^2 = \frac{kZe^2}{r}$, dus

$$T = \frac{1}{2} \frac{kZe^2}{r}, \quad (2.11)$$

$$E = \frac{1}{2} \frac{kZe^2}{r} - \frac{kZe^2}{r} = -\frac{1}{2} \frac{kZe^2}{r}. \quad (2.12)$$

Invullen van $r = r_n$ uit (2.6) geeft

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{kZe^2}{r_n} = -\frac{1}{2} kZe^2 \left(\frac{m_e kZe^2}{n^2 \hbar^2} \right) \quad (2.13)$$

$$= -\frac{m_e k^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (2.14)$$

Voor waterstof ($Z = 1$) is

$$E_n = -\frac{m_e k^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}.$$

voor de volledigheid geven we hier ook de betekenis van de symbolen die in deze formules voorkomen: waarbij:

E de totale mechanische energie is en wordt uitgedrukt in joule (J) of elektronvolt (eV)

T de kinetische energie is (bewegingsenergie van het elektron) en wordt uitgedrukt in joule (J)

V de potentiële energie is (elektrische energie door Coulombkracht) en wordt uitgedrukt in joule (J)

m_e de massa van het elektron is ($\approx 9.109 \times 10^{-31}$ kg)

v de snelheid van het elektron is en wordt uitgedrukt in meter per seconde (m/s)

k de constante is gedefinieerd als $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ ($\approx 8.988 \times 10^9$ N·m²/C²)

Z de kernlading is (het aantal protonen in de kern)

e de elementaire lading is ($\approx 1.602 \times 10^{-19}$ C)

r de afstand van het elektron tot de kern is en wordt uitgedrukt in meter (m)

E_n de energie van het elektron in de n -de stationaire baan is

r_n de straal van de n -de baan is en wordt uitgedrukt in meter (m)

n het hoofdkwantumgetal is (een positief geheel getal: $n = 1, 2, 3, \dots$)

$\hbar$ de gereduceerde Planck-constante is ($\hbar = h/2\pi \approx 1.055 \times 10^{-34}$ J·s)

eV elektronvolt is, een energie-eenheid ($1 \text{ eV} \approx 1.602 \times 10^{-19}$ J)

De negatieve waarde van E_n geeft aan dat het elektron gebonden is aan de kern. Hoe negatiever de energie, hoe sterker het elektron gebonden is. Bij $E = 0$ is het elektron vrij (geïoniseerd).

2.5.1 Spectrale lijnen: Rydberg-formule

Bij een overgang $n \rightarrow m$ ($n > m$) geldt Bohrs frequentievoorwaarde

$$h\nu = E_n - E_m.$$

Met (2.14):

$$h\nu = \frac{m_e k^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (2.15)$$

Gebruik $\nu = c/\lambda$ en $h = 2\pi\hbar$:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{m_e k^2 Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{hc} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (2.16)$$

$$= \left[\frac{m_e k^2 e^4}{4\pi\hbar^3 c} \right] Z^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (2.17)$$

De factor tussen vierkante haken definieert de *Rydberg-constante* (in deze eenvoudige versie met m_e):

$$R_\infty \equiv \frac{m_e k^2 e^4}{4\pi\hbar^3 c} = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^3 c}. \quad (2.18)$$

Dan volgt de klassieke Rydberg-formule:

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty Z^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (2.19)$$

waarbij:

h de Planck-constante is ($h \approx 6.626 \times 10^{-34}$ J·s)

ν de frequentie van het uitgezonden of geabsorbeerde licht is en wordt uitgedrukt in hertz (Hz of s^{-1})

E_n de energie van het elektron in de n -de stationaire baan is

E_m de energie van het elektron in de m -de stationaire baan is

n het hogere energieniveau is (positief geheel getal, $n > m$)

m het lagere energieniveau is (positief geheel getal)

m_e de massa van het elektron is ($\approx 9.109 \times 10^{-31}$ kg)

k de constante is gedefinieerd als $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$ ($\approx 8.988 \times 10^9$ N·m²/C²)

Z de kernlading is (het aantal protonen in de kern)

e de elementaire lading is ($\approx 1.602 \times 10^{-19}$ C)

$\hbar$ de gereduceerde Planck-constante is ($\hbar = h/2\pi \approx 1.055 \times 10^{-34}$ J·s)

c de lichtsnelheid in vacuüm is ($\approx 2.998 \times 10^8$ m/s)

λ de golflengte van het uitgezonden of geabsorbeerde licht is en wordt uitgedrukt in meter (m)

R_∞ de Rydberg-constante is ($R_\infty \approx 1.097 \times 10^7$ m⁻¹)

ε_0 de permittiviteit van het vacuüm is ($\approx 8.854 \times 10^{-12}$ F/m)

De Rydberg-formule voorspelt de golflengtes van de spectrale lijnen die een waterstofachtig atoom uitzendt. Voor waterstof ($Z = 1$) verklaart deze formule de bekende spectraalseries zoals de Lyman-serie ($m = 1$), Balmer-serie ($m = 2$), en Paschen-serie ($m = 3$).

2.6 Verbetering: gereduceerde massa (kern niet oneindig zwaar)

Strikt genomen draait niet alleen het elektron rond de kern: beide draaien rond het massamiddelpunt. Vervang daarom m_e door de *gereduceerde massa*

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M},$$

waar M de kernmassa is. Dan worden

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{\mu k Z e^2}, \quad (2.20)$$

$$E_n = -\frac{\mu k^2 Z^2 e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (2.21)$$

$$R = R_\infty \frac{\mu}{m_e}. \quad (2.22)$$

Dit verklaart een deel van het isotopen-effect in spectra.

2.7 De Broglie-herinterpretatie (brug naar golven)

Bohrs quantisatievoorwaarde $m_e v r = n \hbar$ kan ook worden gezien als een staandegolfvoorwaarde. De Broglie geeft de golflengte

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v}.$$

Een staande golf op een cirkel vereist

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{m_e v} \implies m_e v r = n \hbar,$$

dus Bohrs postulaten kunnen (deels) gemotiveerd worden vanuit golfmechanica. Zoals we in het vorige hoofdstuk besproken hebben, heeft het model van Bohr enkele beperkingen. We sommen deze hier nog eens op met een diepere wiskundige uitleg:

2.8 Beperkingen (conceptueel belangrijk)

Hoewel Bohr het waterstofspectrum goed benadert, is het model fundamenteel semi-klassiek:

- Het veronderstelt *klassieke* banen (in tegenspraak met moderne QM waar toestanden golffuncties zijn).

- Het verklaart niet systematisch fijnstructuur, Zeeman/Stark-effecten, intensiteiten en selectie-regels (daarvoor heb je Schrödinger/Dirac + perturbatietheorie nodig).
- Voor grote Z worden relativistische en QED-correcties belangrijk omdat $v/c \sim Z\alpha$.

2.8.1 Wat is QED?

QED staat voor *Quantum Electrodynamics* (Kwantumelektrodynamica in het Nederlands) en is de kwantumtheorie van elektromagnetische interacties. Het is een van de meest nauwkeurige en succesvol geteste theorieën in de natuurkunde.

Belangrijke aspecten van QED:

- **Fundamentele theorie:** QED beschrijft hoe geladen deeltjes (zoals elektronen) wisselwerken met fotonen (de kwanta van het elektromagnetische veld). Het combineert kwantummechanica met speciale relativiteitstheorie.
- **Ontwikkeling:** De theorie werd ontwikkeld in de late jaren 1940 door Richard Feynman, Julian Schwinger en Sin-Itiro Tomonaga, waarvoor zij in 1965 de Nobelprijs kregen.
- **QED-correcties in atoomfysica:** Voor het waterstofatoom voorspelt QED extreem kleine maar meetbare correcties op de energieniveaus, zoals:
 - De *Lamb-verschuiving*: een klein verschil tussen de $2S_{1/2}$ en $2P_{1/2}$ energieniveaus, veroorzaakt door kwantumfluctuaties van het elektromagnetische vacuüm.
 - Correcties door *vacuümpolarisatie*: virtuele elektron-positronparen beïnvloeden de effectieve lading van de kern.
 - De afwijking van het magnetische moment van het elektron van de Dirac-waarde (het zogeheten *anomale magnetische moment*, $g - 2$).
- **Nauwkeurigheid:** QED-berekeningen komen overeen met experimenten tot ongeveer 12 significante cijfers, wat het een van de meest nauwkeurig geteste theorieën in de wetenschap maakt.
- **Belang voor grote Z :** Voor atomen met hoge kernlading Z worden QED-effecten belangrijker omdat de elektronsnelheid $v/c \sim Z\alpha$ toeneemt. Bij zeer zware elementen kunnen deze correcties niet meer verwaarloosd worden.

In het Bohr-model worden deze subtiele kwantumeffecten volledig genegeerd, wat verklaart waarom het model slechts een benadering is van de werkelijkheid.

Hoofdstuk 3

Kwantummechanica een nieuwe theorie

“I think I can safely say that
nobody understands quantum
mechanics.”

Richard Feynman

De beperkingen van het Bohr-model en de ontdekking van nieuwe experimenten (zoals het dubbel-spleet experiment) leidden tot de ontwikkeling van een nieuwe theorie: de kwantummechanica. Deze theorie, ontwikkeld in de jaren 1920 door wetenschappers zoals Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg en Paul Dirac, biedt een fundamenteel andere kijk op de natuur. In plaats van te denken in termen van klassieke banen, beschrijft de kwantummechanica de toestand van een systeem met behulp van een golffunctie (ψ), die informatie bevat over de waarschijnlijkheid van het vinden van een deeltje op een bepaalde plaats en tijd. De evolutie van deze golffunctie wordt bepaald door de Schrödingervergelijking, die een fundamentele vergelijking is in de kwantummechanica. Eenvoudig gezegd, de kwantummechanica vervangt het deterministische beeld van de klassieke natuurkunde door een probabilistisch beeld, waarin de uitkomst van metingen niet met absolute zekerheid kan worden voorspeld, maar alleen in termen van waarschijnlijkheden. Deze nieuwe theorie heeft niet alleen de beperkingen van het Bohr-model overwonnen, maar heeft ook geleid tot een dieper begrip van de natuur en heeft talloze toepassingen in de moderne technologie, zoals in de ontwikkeling van halfgeleiders, lasers en kwantumcomputers. Het is belangrijk om te vermelden dat aan het zogeheten correspondentie principe volledig voldaan wordt: voor grote n (en dus grote banen) benadert het Bohr-model de resultaten van de kwantummechanica, wat aantoont dat de klassieke natuurkunde een goede benadering is van de kwantummechanica in het macroscopische regime.

Hoofdstuk 4

operator-formalisme

“The mathematical formulation of quantum mechanics is not unique. There are many ways to formulate it, and they are all equivalent.”

Paul Dirac

4.1 Operator-formalisme in de Quantummechanica: Functionaal-analytische formulering

4.2 Hilbertruimte-structuur

Een kwantumsysteem wordt gemodelleerd door een complexe separabele Hilbertruimte $\mathcal{H}$ met inwendig product $\langle \cdot, \cdot \rangle$, lineair in de tweede component.

De norm wordt gegeven door:

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle} \quad (4.1)$$

Fysische toestanden worden gerepresenteerd door stralen in $\mathcal{H}$, d.w.z. equivalentieklassen

$$|\psi\rangle \sim \lambda|\psi\rangle, \quad \lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}.$$

4.3 Lineaire Operatoren en Domeinen

Een lineaire operator is een afbeelding

$$\hat{A} : \mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$$

waar $\mathcal{D}(\hat{A})$ het domein is.

Voor fysische observabelen zijn operatoren in het algemeen *onbegrensd*, waardoor:

- $\mathcal{D}(\hat{A}) \neq \mathcal{H}$
- $\hat{A}$ niet continu is

Een operator is **dicht gedefinieerd** indien $\overline{\mathcal{D}(\hat{A})} = \mathcal{H}$.

4.4 Adjoints, Symmetrie en Zelf-adjunctheid

De geadjungeerde operator $\hat{A}^\dagger$ is gedefinieerd via:

$$\langle \phi, \hat{A}\psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \phi, \psi \rangle \quad (4.2)$$

voor alle $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A})$ waarvoor de linkerzijde continu is in ϕ .
Een operator heet:

- **Symmetrisch** indien $\hat{A} \subset \hat{A}^\dagger$
- **Zelf-adjunct** indien $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$
- **Essentieel zelf-adjunct** indien de sluiting $\overline{\hat{A}}$ zelf-adjunct is

Voor observabelen is *zelf-adjunctheid* noodzakelijk, niet enkel symmetrie.

4. Spectraaltheorema

Voor elke zelf-adjuncte operator $\hat{A}$ bestaat er een unieke projectiemaat $E_A(\lambda)$ zodat:

$$\hat{A} = \int_{\sigma(\hat{A})} \lambda dE_A(\lambda) \quad (4.3)$$

waar $\sigma(\hat{A})$ het spectrum is.

De verwachtingswaarde wordt dan:

$$\langle \psi, \hat{A}\psi \rangle = \int_{\sigma(\hat{A})} \lambda d\mu_\psi(\lambda) \quad (4.4)$$

met maat

$$\mu_\psi(\Delta) = \langle \psi, E_A(\Delta)\psi \rangle.$$

4.5 Continue Spectra en Rigged Hilbert Space

Voor operatoren met continu spectrum (bv. impulsoperator) liggen de gegeneraliseerde eigenvectoren niet in $\mathcal{H}$.

Men gebruikt een Gelfand-tripel:

$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi'$$

waar:

- Φ een dichte testfunctieruimte is
- Φ' de duale ruimte (distributies)

De Dirac-delta-eigenvectoren behoren tot Φ' .

6. Canonieke Commutatierelaties

De impulsoperator op $L^2(\mathbb{R})$ wordt gedefinieerd als:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (4.5)$$

met domein:

$$\mathcal{D}(\hat{p}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) : \psi \text{ absoluut continu, } \psi' \in L^2\}.$$

De canonieke commutatierelatie

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

geldt enkel op een geschikte gemeenschappelijke kern $\mathcal{D}(\hat{x}\hat{p}) \cap \mathcal{D}(\hat{p}\hat{x})$.

4.6 Tijdsevolutie en Stone's Theorem

Volgens Stone's stelling correspondeert elke sterk-continu éénparameter unitaire groep $U(t)$ met een unieke zelf-adjuncte generator $\hat{H}$:

$$U(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar} \quad (4.6)$$

De Schrödingervergelijking volgt als:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi(t) = \hat{H}\psi(t) \quad (4.7)$$

4.7 Onzekerheidsrelatie in Algemene Vorm

Voor twee zelf-adjuncte operatoren $\hat{A}, \hat{B}$ met geschikte gemeenschappelijke domein geldt:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2 \quad (4.8)$$

waar $\{\cdot, \cdot\}$ de anticommutator is.

Hoofdstuk 5

De Golffunctie en haar interpretatie van het dubbel-spleet experiment

De golffunctie vormt de hoeksteen van de kwantummechanica. De golffunctie mag niet gezien worden als een klassieke golf, maar eerder als een wiskundige constructie die de waarschijnlijkheid van het vinden van een deeltje op een bepaalde plaats en tijd beschrijft. De golffunctie wordt vaak aangeduid met de Griekse letter ψ en is een complex getal dat kan worden geschreven als $\psi(x, t) = Ae^{i\theta}$, waarbij A de amplitude is en θ de fase. Het is ook belangrijk dat we een formele afbakening maken : we spreken over niet relativistische kwantummechanica, dus we negeren

- relativistische effecten en QED-correcties, wat een goede benadering is voor systemen met lage energie en kleine snelheden (zoals het waterstofatoom in de grondtoestand).
- we gebruiken de klassieke ruimt en tijd waarbij we het hebben over absolute tijd en geen ruimtetijd zoals in de relativiteitstheorie.
- We gebruiken de Galilei invariant in plaats van de Lorentz invariant, wat betekent dat we geen rekening houden met de effecten van speciale relativiteit.
- we stipuleren dat de snelheid $v \ll c$ waarmee we zeggen de de lichtsnelheid c geen dynamische parameter is in onze theorie.

Voordat we hier verder gaan, lijkt het me een goed idee om eerst even te herhalen wat de complexe getallen zijn en hoe ze werken, aangezien de golffunctie een complex getal is en het begrijpen van complexe getallen essentieel is voor het begrijpen van de golffunctie en de kwantummechanica in het algemeen.

5.1 Herhaling: Complexe getallen en hun rol in de quantummechanica

5.1.1 Definitie van complexe getallen

Een complex getal wordt gedefinieerd als een element van de verzameling

$$\mathbb{C} = \{z = x + iy \mid x, y \in \mathbb{R}\}$$

waarbij:

- $x = \operatorname{Re}(z)$ het reële deel is,
- $y = \operatorname{Im}(z)$ het imaginaire deel is,
- i de imaginaire eenheid is met eigenschap

$$i^2 = -1.$$

De verzameling $\mathbb{C}$ vormt een lichaam (veld) onder de gebruikelijke optelling en vermenigvuldiging.

5.1.2 Rekenregels

Voor twee complexe getallen $z_1 = x_1 + iy_1$ en $z_2 = x_2 + iy_2$ geldt:

Optelling

$$z_1 + z_2 = (x_1 + x_2) + i(y_1 + y_2)$$

Vermenigvuldiging

$$z_1 z_2 = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + i(x_1 y_2 + x_2 y_1)$$

5.1.3 Complex geconjugeerde en modulus

De complexe geconjugeerde van $z = x + iy$ is gedefinieerd als:

$$z^* = x - iy$$

Belangrijke eigenschap:

$$z z^* = x^2 + y^2$$

De modulus (of absolute waarde) van z wordt gedefinieerd als:

$$|z| = \sqrt{z z^*} = \sqrt{x^2 + y^2}$$

In de quantummechanica speelt dit een fundamentele rol omdat de kansdichtheid gegeven wordt door:

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi^*(x, t) \psi(x, t)$$

5.1.4 Geometrische interpretatie

Complexe getallen kunnen geïnterpreteerd worden als punten in het complexe vlak (Argand-diagram), waarbij:

$$z = x + iy \leftrightarrow (x, y)$$

De modulus is de afstand tot de oorsprong:

$$r = |z|$$

en het argument θ wordt gedefinieerd via:

$$\theta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$$

5.1.5 Poolcoördinaten en exponentiële vorm

Een complex getal kan geschreven worden in poolvorm:

$$z = r(\cos \theta + i \sin \theta)$$

Met de formule van Euler:

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$$

kan men schrijven:

$$z = re^{i\theta}$$

Dit is de meest natuurlijke representatie in de quantummechanica.

5.1.6 Eigenschappen van de exponentiële vorm

Voor twee complexe getallen:

$$z_1 = r_1 e^{i\theta_1}, \quad z_2 = r_2 e^{i\theta_2}$$

geldt:

$$z_1 z_2 = r_1 r_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)}$$

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{r_1}{r_2} e^{i(\theta_1 - \theta_2)}$$

Vermenigvuldigen van complexe getallen komt dus overeen met:

- vermenigvuldigen van de moduli,
- optellen van de fasen.

Dit verklaart interferentie-effecten in de quantummechanica.

5.1.7 Complexe differentieerbaarheid

In de quantummechanica werken we met complexe functies:

$$\psi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$$

De afgeleide wordt componentgewijs gedefinieerd:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(\operatorname{Re} \psi) + i \frac{\partial}{\partial x}(\operatorname{Im} \psi)$$

Voor vlakke golven geldt bijvoorbeeld:

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

waarbij:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik\psi, \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi.$$

Dit is precies de reden waarom de impuls- en energie-operatoren in de quantummechanica worden gedefinieerd als:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

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

5.1.8 Lineaire structuur

De verzameling complexe functies vormt een complexe vectorruimte. Indien ψ_1 en ψ_2 oplossingen zijn van de Schrödingervergelijking, dan is ook:

$$\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$$

met $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ opnieuw een oplossing (superpositieprincipe).

5.1.9 Waarom complexe getallen fundamenteel zijn

De kernredenen waarom complexe getallen essentieel zijn in de quantummechanica:

1. De Schrödingervergelijking bevat expliciet de factor i .
2. Interferentie vereist fase-informatie.
3. Probabiliteiten worden gegeven door $|\psi|^2$, wat positieve reële getallen oplevert.
4. Unitaire tijdsevolutie vereist complexe Hilbertruimten.

Zonder complexe getallen zou de lineaire, unitaire structuur van de quantummechanica niet mogelijk zijn.