

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	Adjoint, 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
6	De Schrödingervergelijking: dynamica van de golffunctie	20
6.1	Van klassieke energie naar kwantumoperatoren	21
6.1.1	Motivatie voor de operatorvervangingen	21
6.1.2	Van de klassieke Hamiltoniaan naar de Schrödingervergelijking	23
6.2	De Hamiltoniaan-operator en stationaire toestanden	24
6.2.1	Definitie van stationaire toestanden	24
6.2.2	Eigenschappen van stationaire toestanden	24
7	Eenvoudige kwantumsystemen	26
7.1	Het vrije deeltje	26
7.1.1	Interpretatie van de vlakke golf	27
7.2	Het deeltje in een oneindige potentiaalput	27
7.2.1	Genormaliseerde eigenfuncties	29
7.2.2	Fysische betekenis	29
7.3	Tunneling	30
7.4	Samenvatting	30
8	Metingen, observabelen en onzekerheid	32
8.1	Observabelen als operatoren	32
8.2	Eigenwaarden en eigenfuncties	33
8.3	De Born-regel	34
8.4	Verwachtingswaarden	34
8.5	Superpositie en meting	35
8.6	Commutatoren	35
8.7	Spreading en onzekerheid	36
8.8	De onzekerheidsrelatie van Heisenberg	37
8.9	Fysische interpretatie van de onzekerheidsrelatie	37
8.10	Samenvatting	38

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 golf functies 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.

Hoofdstuk 6

De Schrödingervergelijking: dynamica van de golffunctie

De tijdafhankelijke Schrödingervergelijking is de fundamentele vergelijking die de evolutie van de golffunctie $\psi(x, t)$ beschrijft:

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

Deze vergelijking is een partiële differentiaalvergelijking van de eerste orde in tijd en tweede orde in ruimte. Hierin is:

- i de imaginaire eenheid,
- $\hbar$ de gereduceerde Planck-constante,
- m de massa van het deeltje,
- ∇^2 de Laplace-operator, die de ruimtelijke tweede afgeleide van ψ geeft,
- $V(x)$ de potentiële energie als functie van de positie x .

De Schrödingervergelijking kan worden afgeleid vanuit de energie-operator (Hamiltoniaan) en de tijdsevolutie van toestanden in de quantummechanica. De oplossing van deze vergelijking geeft de golffunctie $\psi(x, t)$, die alle informatie bevat over het systeem op tijd t . Hoewel de golffunctie $\psi(x, t)$ zelf een complex getal is en daardoor niet direct meetbaar is, bezit het kwadraat van de absolute waarde ervan een diepe fysische betekenis. Volgens de Born-interpretatie representeert $|\psi(x, t)|^2$ de waarschijnlijkheidsdichtheid om het deeltje op tijdstip t op positie x aan te treffen. De Schrödingervergelijking dicteert dus niet het exacte pad van een deeltje — zoals de wetten van Newton dat doen in de klassieke mechanica — maar beschrijft hoe deze kansgolven zich door de ruimte voortplanten. Dit markeert de fundamentele overstap van deterministische banen naar probabilistische toestanden.

In dit hoofdstuk zullen we de dynamica van deze golf functie in detail bestuderen. We beginnen met de overgang van klassieke energie naar kwantumoperatoren, dan gaan we het hebben over de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking, om het dan te hebben over het conceptualiseren van de Hamilton-operator $\hat{H}$, waarmee we de Schrödingervergelijking compacter kunnen schrijven als $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$.

Vervolgens introduceren we de techniek van *scheiding van variabelen*. Dit stelt ons in staat om de tijdsafhankelijke vergelijking te splitsen in een tijdonafhankelijk deel en een tijdsafhankelijk deel. Dit leidt tot het concept van *stationaire toestanden*: toestanden waarbij de waarschijnlijkheidsdichtheid constant blijft in de tijd, maar de fase van de golf functie wel evolueert. Tot slot zullen we kijken naar de behoudswet van waarschijnlijkheid en hoe de golf functie zich gedraagt onder invloed van verschillende potentiaallandschappen $V(x)$.

6.1 Van klassieke energie naar kwantumoperatoren

In de klassieke mechanica wordt de totale energie van een deeltje gegeven door de Hamiltoniaan:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x),$$

waar p de impuls is en $V(x)$ de potentiële energie. In de kwantummechanica wordt deze Hamiltoniaan omgezet in een operator $\hat{H}$ die werkt op de golf functie $\psi(x, t)$. De impuls p wordt vervangen door de impulsoperator $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, en de Hamiltoniaan wordt:

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

Deze operator $\hat{H}$ wordt de Hamilton-operator genoemd en speelt een centrale rol in de dynamica van het systeem. De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking kan nu compact worden geschreven als:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi.$$

6.1.1 Motivatie voor de operatorvervangingen

De overgang van klassieke mechanica naar kwantummechanica bestaat niet enkel uit het formeel vervangen van grootheden door operatoren. De operatoren voor impuls en energie worden gemotiveerd door de golfachtige aard van materie.

Voor een vrij deeltje met scherp bepaalde impuls en energie gebruiken we een vlakke golf van de vorm

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

Deze formule beschrijft een vlakke materiegolf met constante amplitude A en een fase $kx - \omega t$, waarbij k het golfgetal en ω de hoekfrequentie is.

Volgens de relaties van de Broglie en Planck-Einstein geldt:

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega.$$

Voor de duidelijkheid leggen we hier nog even uit wat deze relaties betekenen:

- De relatie $p = \hbar k$ verbindt de impuls p van een deeltje met het golfgetal k van de bijbehorende golf functie. Het geeft aan dat de impuls van een deeltje evenredig is aan het aantal golven per eenheid lengte (golfgetal).
- De relatie $E = \hbar \omega$ verbindt de energie E van een deeltje met de hoekfrequentie ω van de golf functie. Het geeft aan dat de energie van een deeltje evenredig is aan hoe snel de fase van de golf functie verandert in de tijd.

Beschouwen we nu de ruimtelijke afgeleide van deze golf functie, dan vinden we:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik\psi.$$

Vermenigvuldigen we beide zijden met $-i\hbar$, dan krijgen we:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = \hbar k\psi = p\psi.$$

Hieruit volgt dat de operator

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

de golf functie vermenigvuldigt met de impuls waarde p , wanneer ψ een vlakke golf is. In die zin is een vlakke golf een eigentoestand van de impuls operator:

$$\hat{p}\psi = p\psi.$$

Op analoge wijze bekijken we de tijdsafgeleide:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi.$$

Vermenigvuldigen met $i\hbar$ geeft:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hbar \omega\psi = E\psi.$$

Daarom definiëren we de energie operator als

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

De operator vervangingen

$$p \longrightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad E \longrightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

zijn dus niet willekeurig. Ze drukken uit dat impuls en energie verbonden zijn met respectievelijk ruimtelijke en temporele variatie van de fase van de golf functie.

6.1.2 Van de klassieke Hamiltoniaan naar de Schrödinger-vergelijking

In één dimensie is de klassieke Hamiltoniaan

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

Na de vervanging

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

wordt de kinetische term:

$$\frac{p^2}{2m} \longrightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Omdat

$$\hat{p}^2 = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

krijgen we:

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

De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking volgt dan uit de identificatie

$$\hat{E}\psi = \hat{H}\psi.$$

Aangezien

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

vinden we:

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

In drie ruimtelijke dimensies wordt de tweede afgeleide vervangen door de Laplaciaan:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

De Hamilton-operator wordt dan:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}),$$

en de Schrödingervergelijking krijgt de algemene vorm:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})\right) \psi(\mathbf{r}, t).$$

In woorden: de verandering van de golf functie in de tijd wordt bepaald door de totale energie-operator, die bestaat uit een kinetische term $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ en de potentiële energie $V(\mathbf{r})$.

6.2 De Hamiltoniaan-operator en stationaire toestanden

De Hamiltoniaan-operator $\hat{H}$ is de kwantum analogie van de totale energie in de klassieke mechanica. Het is een zelf-adjuncte operator die werkt op de golf-functie ψ en de energie-eigenwaarden van het systeem bepaalt. Een stationaire toestand is een speciale oplossing van de Schrödingervergelijking waarbij de waarschijnlijkheidsdichtheid $|\psi(x, t)|^2$ constant blijft in de tijd. Met een zelf-adjuncte operator bedoelen we dat $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$, wat betekent dat de operator gelijk is aan zijn eigen geadjungeerde. Dit is een belangrijke eigenschap omdat het garandeert dat de energie-eigenwaarden reëel zijn, wat essentieel is voor fysische interpretatie.

6.2.1 Definitie van stationaire toestanden

Een stationaire toestand is een oplossing van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking van de vorm:

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar},$$

waar $\phi(x)$ een tijdonafhankelijke functie is en E een constante energie-eigenwaarde. Wanneer we deze vorm in de Schrödingervergelijking substitueren, krijgen we:

$$i\hbar \left(-\frac{iE}{\hbar} \right) \phi(x)e^{-iEt/\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(x)e^{-iEt/\hbar} + V(x)\phi(x)e^{-iEt/\hbar}.$$

Na vereenvoudiging zien we dat de tijdsafhankelijke factoren aan beide zijden wegvallen, wat leidt tot de tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking:

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x).$$

6.2.2 Eigenschappen van stationaire toestanden

Stationaire toestanden spelen een centrale rol in de kwantummechanica. Ze ontstaan wanneer de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking kan worden gescheiden in een ruimtelijk en een tijdsafhankelijk deel:

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}.$$

Hierbij bevat $\phi(x)$ de ruimtelijke vorm van de toestand, terwijl de factor $e^{-iEt/\hbar}$ de tijdsevolutie van de fase beschrijft.

Stationaire toestanden hebben de volgende eigenschappen:

- Ze zijn eigenfuncties van de Hamilton-operator $\hat{H}$ met eigenwaarde E :

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x).$$

- De waarschijnlijkheidsdichtheid is constant in de tijd:

$$|\psi(x, t)|^2 = |\phi(x)e^{-iEt/\hbar}|^2 = |\phi(x)|^2.$$

Dit betekent dat de kans om het deeltje op een bepaalde positie te vinden niet verandert in de tijd.

- De fase van de golffunctie evolueert wel in de tijd:

$$e^{-iEt/\hbar}.$$

Deze globale fase heeft geen invloed op de waarschijnlijkheidsdichtheid, omdat

$$|e^{-iEt/\hbar}|^2 = 1.$$

- Bij een meting van de energie levert een stationaire toestand met zekerheid de waarde E . Dit volgt uit het feit dat $\phi(x)$ een eigentoestand is van de Hamilton-operator.
- De verwachtingswaarde van elke observabele die niet expliciet van de tijd afhangt, blijft in een stationaire toestand constant in de tijd.

De term “stationair” betekent dus niet dat de golffunctie volledig onveranderlijk is. De golffunctie zelf verandert wel door een tijdsafhankelijke fasefactor. Wat stationair blijft, is de waarschijnlijkheidsverdeling $|\psi(x, t)|^2$. Daarom verandert het meetbare ruimtelijke kanspatroon van het deeltje niet in de tijd.

Wanneer een toestand echter een superpositie is van meerdere stationaire toestanden met verschillende energieën,

$$\psi(x, t) = c_1\phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar},$$

dan is de waarschijnlijkheidsdichtheid in het algemeen niet meer tijdsafhankelijk. De relatieve fase tussen de twee termen verandert namelijk met de tijd:

$$e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}.$$

Daardoor kunnen interferentietermen ontstaan die wel tijdsafhankelijk zijn.

Hoofdstuk 7

Eenvoudige kwantumsystemen

In de vorige hoofdstukken hebben we de algemene structuur van de niet-relativistische kwantummechanica opgebouwd. We hebben gezien dat de toestand van een systeem beschreven wordt door een golf functie ψ , dat fysische grootheden worden voorgesteld door operatoren, en dat de tijdsevolutie wordt bepaald door de Schrödingervergelijking:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi.$$

7.1 Het vrije deeltje

Het eenvoudigste kwantumsysteem is een deeltje waarop geen kracht werkt. In dat geval is de potentiële energie nul:

$$V(x) = 0.$$

De Hamilton-operator in één dimensie wordt dan:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking wordt:

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

Een oplossing van deze vergelijking is de vlakke golf:

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

Deze functie beschrijft een toestand met scherp bepaalde impuls en energie. Toepassing van de impulsoperator geeft:

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} Ae^{i(kx - \omega t)} = \hbar k\psi.$$

Dus is de vlakke golf een eigentoestand van de impulsoperator met eigenwaarde:

$$p = \hbar k.$$

Ook de energie volgt uit de Hamilton-operator:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi.$$

Daarom is:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Omdat ($p = \hbar k$), krijgen we opnieuw de klassieke uitdrukking:

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

Dit voorbeeld toont dat de kwantummechanica voor een vrij deeltje de klassieke energie-impulsrelatie behoudt, maar de toestand van het deeltje beschrijft als een golf.

7.1.1 Interpretatie van de vlakke golf

Een vlakke golf heeft overal dezelfde amplitude. Daardoor is:

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

De waarschijnlijkheidsdichtheid is dus overal gelijk. Dat betekent dat het deeltje in een vlakke-golfoestand volledig onbepaald is in positie: het kan met gelijke kans overal worden aangetroffen.

Strikt genomen is een vlakke golf over de volledige ruimte niet normaliseerbaar. Ze is daarom geen volledig realistische beschrijving van een fysisch deeltje. In werkelijkheid gebruikt men golfpakketten: superposities van vlakke golven die meer gelokaliseerd zijn in de ruimte.

7.2 Het deeltje in een oneindige potentiaalput

Een belangrijker en fysisch rijker voorbeeld is het deeltje in een oneindige potentiaalput. We beschouwen een deeltje dat opgesloten zit tussen $x = 0$ en $x = L$. De potentiaal is:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L, \\ \infty, & x \leq 0 \text{ of } x \geq L. \end{cases}$$

Dit betekent dat het deeltje zich enkel binnen het interval ($0 < x < L$) kan bevinden. Buiten dit gebied is de potentiaal oneindig groot, zodat de golf functie daar nul moet zijn.

Binnen de put is ($V(x)=0$), zodat de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking wordt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = E\phi(x).$$

We herschrijven dit als:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k^2\phi(x) = 0,$$

waarbij:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

De algemene oplossing is:

$$\phi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx).$$

Omdat het deeltje niet buiten de put kan voorkomen, moet de golffunctie aan de randen verdwijnen:

$$\phi(0) = 0, \quad \phi(L) = 0.$$

Uit ($\phi(0) = 0$) volgt:

$$B = 0.$$

Dus:

$$\phi(x) = A \sin(kx).$$

De tweede randvoorwaarde geeft:

$$\phi(L) = A \sin(kL) = 0.$$

Voor een niet-triviale oplossing moet gelden:

$$\sin(kL) = 0.$$

Daaruit volgt:

$$kL = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

en dus:

$$k_n = \frac{n\pi}{L}.$$

De toegelaten energieën zijn daarom:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Dit is een zeer belangrijk resultaat. De energie van het deeltje kan niet eender welke waarde aannemen. Alleen discrete energieniveaus zijn toegestaan. De kwantisering ontstaat hier niet doordat we ze kunstmatig opleggen, maar doordat de golffunctie aan randvoorwaarden moet voldoen.

7.2.1 Genormaliseerde eigenfuncties

De eigenfuncties van het deeltje in de oneindige potentiaalput zijn:

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

De normalisatievoorwaarde is:

$$\int_0^L |\phi_n(x)|^2 dx = 1.$$

Daaruit volgt:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

De genormaliseerde eigenfuncties zijn dus:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right).$$

De volledige tijdsafhankelijke stationaire toestanden zijn:

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Omdat de tijdsafhankelijkheid enkel in een fasefactor zit, is:

$$|\psi_n(x, t)|^2 = |\phi_n(x)|^2.$$

De waarschijnlijkheidsdichtheid van een stationaire toestand verandert dus niet in de tijd.

7.2.2 Fysische betekenis

Het deeltje in een doos toont een van de diepste kenmerken van de kwantummechanica: opsluiting leidt tot kwantisering. Hoe kleiner de doos, hoe groter de minimale energie. De grondtoestand heeft energie:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Deze energie is niet nul. Een kwantumdeeltje dat opgesloten is in een eindig gebied kan dus niet volledig stilstaan. Dit is nauw verbonden met de onzekerheidsrelatie: als de positie van het deeltje sterk beperkt wordt, kan de impuls niet exact nul zijn.

7.3 Tunneling

Een ander typisch kwantummechanisch verschijnsel is tunneling. In de klassieke mechanica kan een deeltje een potentiaalbarrière alleen passeren als zijn energie groter is dan de hoogte van de barrière. Als:

$$E < V_0,$$

dan is doorgang klassiek onmogelijk.

In de kwantummechanica ligt dit anders. Beschouwen we een barrière met hoogte

$$(V_0)$$

. In het gebied waar

$$(E < V_0)$$

, wordt de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V_0\phi = E\phi.$$

Dit kan worden herschreven als:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \kappa^2\phi,$$

met:

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

De oplossingen zijn exponentiële functies:

$$\phi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}.$$

De fysische betekenis hiervan is dat de golf functie in het klassiek verboden gebied niet onmiddellijk nul wordt, maar exponentieel afneemt. Daardoor kan er aan de andere kant van de barrière nog steeds een kleine, maar niet-nul waarschijnlijkheid zijn om het deeltje aan te treffen.

Dit verschijnsel heet tunneling. Het heeft geen klassiek analogon en is essentieel in vele fysische processen, zoals alfa-verval, kernfusie in sterren, halfgeleiderfysica en de werking van de scanning tunneling microscope.

7.4 Samenvatting

In dit hoofdstuk hebben we gezien hoe de Schrödingervergelijking toegepast wordt op eenvoudige kwantumsystemen.

Voor het vrije deeltje vonden we vlakke-golfoplossingen met scherp bepaalde impuls en energie. Voor het deeltje in een oneindige potentiaalput zagen we dat randvoorwaarden leiden tot discrete energieniveaus. Bij tunneling zagen we dat

een kwantumdeeltje een klassiek verboden gebied kan binnendringen en zelfs een potentiaalbarrière kan passeren.

Deze eenvoudige systemen tonen drie fundamentele kenmerken van de kwantummechanica:

- de golfachtige beschrijving van materie;
- de kwantisering van energie door randvoorwaarden;
- het bestaan van niet-klassieke verschijnselen zoals tunneling.

Daarmee vormen ze een natuurlijke brug naar complexere systemen, zoals de harmonische oscillator, het impulsmoment, spin en uiteindelijk het waterstofatoom in de Schrödingerformulering.

Hoofdstuk 8

Metingen, observabelen en onzekerheid

In de klassieke mechanica veronderstellen we dat een fysisch systeem op elk ogenblik welbepaalde eigenschappen bezit. Een deeltje heeft bijvoorbeeld een positie (x), een impuls (p), een energie (E), enzovoort. Een meting onthult dan in principe een reeds bestaande waarde.

In de kwantummechanica is de situatie subtieler. De toestand van een systeem wordt niet beschreven door een lijst van exacte waarden, maar door een golf functie (ψ). Deze golf functie bevat de informatie waaruit we waarschijnlijkheden voor meetresultaten kunnen afleiden. De theorie voorspelt dus niet altijd één vast meetresultaat, maar meestal een kansverdeling van mogelijke resultaten.

Dit hoofdstuk bespreekt hoe fysische grootheden, metingen en onzekerheden in de kwantummechanica worden beschreven.

8.1 Observabelen als operatoren

Een fysische grootheid die gemeten kan worden, noemen we een observabele. Voorbeelden zijn positie, impuls, energie en impulsmoment. In de kwantummechanica worden observabelen voorgesteld door operatoren die werken op de golf functie.

De positie-operator in één dimensie is:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x).$$

Deze operator vermenigvuldigt de golf functie gewoon met de positie (x).

De impulsoperator is:

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

Deze operator meet hoe snel de fase van de golf functie verandert in de ruimte.

De energie van een systeem wordt beschreven door de Hamilton-operator:

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

De Hamilton-operator speelt een centrale rol omdat hij de tijdsevolutie van de golf functie bepaalt via de Schrödingervergelijking:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi.$$

Een belangrijk principe is dat observabelen worden voorgesteld door zelf-adjuncte operatoren. Dit is noodzakelijk omdat meetbare waarden reële getallen moeten zijn. De eigenwaarden van zelf-adjuncte operatoren zijn reëel, en kunnen dus als mogelijke meetresultaten geïnterpreteerd worden.

8.2 Eigenwaarden en eigenfuncties

Stel dat een operator ($\hat{A}$) werkt op een golf functie (ψ). Als geldt:

$$\hat{A}\psi = a\psi,$$

dan noemen we (ψ) een eigenfunctie of eigentoestand van ($\hat{A}$), en (a) de bijbehorende eigenwaarde.

De fysische betekenis hiervan is zeer belangrijk. Als een systeem zich in een eigentoestand van de observabele ($\hat{A}$) bevindt, dan levert een meting van (A) met zekerheid de waarde (a).

Bijvoorbeeld, voor de impulsoperator geldt:

$$\hat{p}\psi = p\psi.$$

In dat geval heeft de toestand een scherp bepaalde impuls (p). Een vlakke golf

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

is een eigentoestand van de impulsoperator, want:

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{d}{dx} Ae^{ikx} = \hbar k Ae^{ikx} = \hbar k \psi.$$

De bijbehorende impuls is dus:

$$p = \hbar k.$$

Op dezelfde manier zijn stationaire toestanden eigenfuncties van de Hamilton-operator:

$$\hat{H}\phi_n = E_n\phi_n.$$

Een meting van de energie in zo'n toestand levert met zekerheid de waarde (E_n).

8.3 De Born-regel

De golffunctie zelf is meestal complex. Een complex getal kan niet rechtstreeks als kans geïnterpreteerd worden. De fysische waarschijnlijkheidsdichtheid wordt gegeven door de Born-regel:

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

Hierbij is:

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

De kans om het deeltje op tijdstip (t) aan te treffen tussen (x=a) en (x=b) is:

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b |\psi(x, t)|^2, dx.$$

Omdat de totale kans om het deeltje ergens te vinden gelijk moet zijn aan (1), moet een fysisch aanvaardbare golffunctie genormaliseerd zijn:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2, dx = 1.$$

Voor een deeltje dat opgesloten is in een eindig interval ($0 < x < L$), wordt de normalisatievoorwaarde:

$$\int_0^L |\psi(x, t)|^2, dx = 1.$$

De Born-regel vormt de brug tussen de wiskundige golffunctie en experimentele waarnemingen. De golffunctie zelf is een waarschijnlijkheidsamplitude; het kwadraat van haar modulus geeft de waarschijnlijkheidsdichtheid.

8.4 Verwachtingswaarden

Wanneer een systeem zich niet in een eigentoestand van een observabele bevindt, kan een meting verschillende mogelijke uitkomsten geven. Toch kan men de gemiddelde waarde voorspellen die men zou verkrijgen wanneer men dezelfde meting zeer vaak herhaalt op identiek voorbereide systemen. Deze gemiddelde waarde noemt men de verwachtingswaarde.

Voor een observabele ($\hat{A}$) is de verwachtingswaarde:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

In de positievoorstelling wordt dit:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x), dx.$$

Voor de positie krijgen we:

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

Voor de impuls krijgen we:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x), dx.$$

De verwachtingswaarde is niet noodzakelijk een waarde die men bij één individuele meting werkelijk zal meten. Ze is het statistische gemiddelde van een groot aantal metingen op identiek voorbereide systemen.

8.5 Superpositie en meting

Een fundamenteel verschil tussen klassieke en kwantummechanica is het superpositieprincipe. Als (ϕ_1) en (ϕ_2) mogelijke toestanden zijn, dan is ook:

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$$

een mogelijke toestand, waarbij (c_1) en (c_2) complexe coëfficiënten zijn.

Stel dat (ϕ_1) en (ϕ_2) eigentoestanden zijn van een observabele $(\hat{A})$:

$$\hat{A}\phi_1 = a_1\phi_1, \quad \hat{A}\phi_2 = a_2\phi_2.$$

Dan betekent de toestand

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$$

niet dat het systeem simpelweg tegelijk de waarden (a_1) en (a_2) bezit in klassieke zin. Een meting van $(\hat{A})$ kan de waarde (a_1) of de waarde (a_2) opleveren.

Wanneer de toestand genormaliseerd is, geven de grootheden

$$|c_1|^2 \quad \text{en} \quad |c_2|^2$$

de kansen om respectievelijk (a_1) en (a_2) te meten.

Na een meting wordt het systeem aangetroffen in een eigentoestand die overeenkomt met het gemeten resultaat. Dit wordt vaak de projectie van de toestand op een eigentoestand genoemd. De precieze interpretatie hiervan is een van de diepste conceptuele vragen van de kwantummechanica.

8.6 Commutatoren

In de kwantummechanica is de volgorde waarin operatoren werken in het algemeen belangrijk. Voor twee operatoren $(\hat{A})$ en $(\hat{B})$ definieert men de commutator als:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Als:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0,$$

dan zeggen we dat de operatoren commuteren. In dat geval kunnen de overeenkomstige observabelen onder geschikte voorwaarden gelijktijdig scherp bepaalde waarden hebben.

Als:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0,$$

dan kunnen de observabelen in het algemeen niet tegelijk exact bepaald zijn.

Het belangrijkste voorbeeld is de commutator van positie en impuls. In één dimensie geldt:

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

We kunnen dit controleren door de commutator te laten werken op een willekeurige testfunctie ($\psi(x)$):

$$[\hat{x}, \hat{p}]\psi = \hat{x}\hat{p}\psi - \hat{p}\hat{x}\psi.$$

Nu is:

$$\hat{x}\hat{p}\psi = x \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx},$$

terwijl:

$$\hat{p}\hat{x}\psi = -i\hbar \frac{d}{dx}(x\psi) = -i\hbar \left(\psi + x \frac{d\psi}{dx} \right).$$

Dus:

$$[\hat{x}, \hat{p}]\psi = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \left(\psi + x \frac{d\psi}{dx} \right) = i\hbar \psi.$$

Daarom geldt:

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

Deze eenvoudige formule ligt aan de basis van de onzekerheidsrelatie van Heisenberg.

8.7 Spreiding en onzekerheid

Om onzekerheid precies te formuleren, moeten we eerst het begrip spreiding invoeren. De spreiding van een observabele (A) rond haar verwachtingswaarde wordt gegeven door:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}.$$

Voor de positie is:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}.$$

Voor de impuls is:

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}.$$

De grootheid (Δx) geeft aan hoe sterk de positie verspreid is rond haar gemiddelde waarde. De grootheid (Δp) geeft aan hoe sterk de impuls verspreid is rond haar gemiddelde waarde.

Een kleine (Δx) betekent dat het deeltje goed gelokaliseerd is. Een kleine (Δp) betekent dat de impuls goed bepaald is. De kwantummechanica toont echter dat deze twee eisen niet onbeperkt tegelijk vervuld kunnen worden.

8.8 De onzekerheidsrelatie van Heisenberg

Voor positie en impuls geldt de onzekerheidsrelatie:

$$\Delta x, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Deze formule zegt dat de spreiding in positie en de spreiding in impuls niet allebei willekeurig klein kunnen zijn. Hoe nauwkeuriger de positie bepaald is, hoe groter de minimale onzekerheid in de impuls wordt, en omgekeerd.

Het is belangrijk om te benadrukken dat dit geen beperking is van onze meetapparatuur. De onzekerheidsrelatie drukt geen technisch gebrek uit, maar een fundamentele eigenschap van kwantumtoestanden.

De oorsprong van deze relatie ligt in het feit dat positie en impuls worden voorgesteld door niet-commuterende operatoren:

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

Meer algemeen geldt voor twee observabelen $(\hat{A})$ en $(\hat{B})$:

$$\Delta A, \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|.$$

Voor $(\hat{A} = \hat{x})$ en $(\hat{B} = \hat{p})$ volgt:

$$\Delta x, \Delta p \geq \frac{1}{2} | \langle i\hbar \rangle | = \frac{\hbar}{2}.$$

8.9 Fysische interpretatie van de onzekerheidsrelatie

De onzekerheidsrelatie heeft een diepe fysische betekenis. Een toestand met zeer goed bepaalde positie moet opgebouwd zijn uit veel verschillende golflengten. Omdat impuls verbonden is met golfgetal via:

$$p = \hbar k,$$

betekent een spreiding in golfgetallen ook een spreiding in impuls.

Een sterk gelokaliseerd golfpakket heeft dus noodzakelijk een grote spreiding in impuls. Omgekeerd heeft een vlakke golf een scherp bepaalde impuls, maar

is ze volledig uitgesmeerd in de ruimte. In dat geval is de positie maximaal onzeker.

Dit verklaart waarom een deeltje in een oneindige potentiaalput niet in volledige rust kan zijn. Omdat het deeltje opgesloten is in een eindig gebied, is zijn positie beperkt. Daardoor kan zijn impuls niet exact nul zijn. De grondtoestand heeft daarom een niet-nul energie.

8.10 Samenvatting

In dit hoofdstuk hebben we gezien hoe metingen in de kwantummechanica worden beschreven.

Een meetbare fysische grootte noemen we een observabele. In de kwantummechanica wordt een observabele voorgesteld door een zelf-adjuncte operator. De mogelijke meetresultaten zijn de eigenwaarden van die operator. Als een systeem zich in een eigentoestand bevindt, levert een meting met zekerheid de bijbehorende eigenwaarde.

De Born-regel verbindt de golf functie met meetbare waarschijnlijkheden:

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

Verwachtingswaarden geven de statistische gemiddelden van metingen op identiek voorbereide systemen.

Ten slotte hebben we gezien dat niet alle observabelen tegelijk exact bepaald kunnen zijn. Dit wordt wiskundig uitgedrukt door commutatoren. Omdat positie en impuls niet commuteren,

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

volgt de onzekerheidsrelatie:

$$\Delta x, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

De onzekerheidsrelatie is geen meetfout, maar een fundamentele eigenschap van de kwantummechanische beschrijving van de natuur.