Voorwoord

I

II

Inhoud

Voorwoord *i*

1 Oneindig veel paden *1*
1.1 Het klassieke pad *1*
1.2 Kwantummechanische paden *3*
1.3 Twee spleten *4*
1.4 Fases en acties *6*
1.5 Nog meer spleten *7*
1.6 Waar alles om draait *9*

2 Reflecterende deeltjes *13*
2.1 Een reflectie-experiment *13*
2.2 Klassiek of niet? *14*
2.3 Spreiding en snelheid *16*

3 Maten en integralen *19*
3.1 Begin van het begin *19*
3.2 Einde van het begin *20*
3.3 Begin van het einde *22*
3.4 Einde van het einde *22*

a Gebruikte standaardfuncties *27*
a.1 Fresnelintegralen *27*
a.2 Dirac deltafunctie *28*

b Mathematicacode *31*

Literatuur *33*

IV

1 Oneindig veel paden

De meeste teksten introduceren de kwantummechanica aan de hand van canonieke kwantisatie en de bijbehorende operatoralgebra van Dirac en Von Neumann. In dit eerste hoofdstuk bekijken wij echter de veel-paden formulering van Feynman. Deze alternatieve methode levert ons niet alleen een krachtige rekenmethode op, maar ook een heel andere kijk op de voortbeweging van kwantumdeeltjes.

Aan de hand van een tweetal experimenten bekijken we de verschillen tussen het klassieke pad en de kwantummechanische paden die een deeltje kan afleggen. Hierbij komt onder andere de relatie tussen waarschijnlijkheid en fase ter sprake. Door de experimenten stap voor stap uit te breiden komen we uiteindelijk bij de padintegraal van Feynman. Dit is de basis voor de volgende hoofdstukken.

1.1 Het klassieke pad

Het eerste experiment dat wij in dit hoofdstuk beschouwen is simpel van opzet. We nemen een bron B van deeltjes met massa m. Op afstand x zetten we een detector D die de uitgezonden deeltjes opvangt. Dit is weergegeven in figuur 1.1. Voor nu is het voldoende om klassieke deeltjes door B te laten produceren. Later zullen we juist naar kwantummechanische deeltjes gaan kijken. Dit experiment zullen we hiervoor stap voor stap uitbreiden in de rest van dit hoofdstuk.

Figuur 1.1 Eerste opzet van ons experiment. Een bron B met op een afstand x een detector D. Klassieke deeltjes reizen over het pad met de kleinste actie van B naar D.

In de klassieke wereld is het niet ingewikkeld om het tijdsafhankelijke *klassieke pad* $\bar{x}(t)$ uit te rekenen dat een deeltje van B naar D aflegt. Natuurlijk zijn de wetten van Newton een goed hulpmiddel, maar laten wij gebruik maken van het (meer analytische) formalisme van Lagrange [1–3]. Lagrange karakteriseert een systeem met de vergelijking

$$L := T - V, \tag{1.1}$$

de naar hem vernoemde *Lagrangiaan*. Hierbij zijn T de kinetische energie van het systeem en V de potentiaal waarin het systeem zich bevindt. Op deze manier houden we rekening met zowel de interne eigenschappen van het systeem als met de invloeden van de omgeving. Voor een deeltje met kinetische energie $\frac{1}{2}m\dot{x}^2$ bewegend in een potentiaal $V(x,t)$ variërend in plaats en tijd geldt

$$L(x,\dot{x},t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x,t).$$

Hier is L expliciet een functie van x, $\dot{x}$ en t. We maken gebruik van de notatie $\dot{x} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = v$.

Om nu het pad te berekenen dat ons deeltje van de bron naar de detector aflegt maken we gebruik van *het principe van de kleinste actie*. Dit wil zeggen dat we een grootheid S, de *actie*, invoeren die we voor elk pad kunnen uitrekenen. Het pad dat het deeltje uiteindelijk aflegt is dat pad waarbij S minimaal is.

Om dit kwantitatief te maken, moeten we eerst een definitie geven van de actie. Deze wordt gegeven door een integraal van de Lagrangiaan van begintijdstip t_b tot eindtijdstip t_e:

$$S := \int_{t_\mathrm{b}}^{t_\mathrm{e}} L(x,\dot{x},t)\,\mathrm{d}t. \tag{1.2}$$

Er zijn natuurlijk veel verschillende manieren om van een positie x_b op tijdstip t_b naar positie x_e op tijdstip t_e te komen. De positie x in de Lagrangiaan is immers een functie van t en kan vele vormen aannemen.

Stel dat het klassieke pad wordt gegeven door de functie $\bar{x}(t)$. Alle andere paden zijn variaties op dit pad. Deze representeren we met een functie $\delta x(t)$, zodat een willekeurig pad te schrijven is als de som van het klassieke pad en de variaties daarop:

$$x(t) := \bar{x}(t) + \delta x(t). \tag{1.3}$$

Van deze afwijking weten we dat

$$\delta x(t_\mathrm{b}) = \delta x(t_\mathrm{e}) = 0, \tag{1.4}$$

aangezien de begin- en eindpunten niet veranderen. Wanneer we willen dat de actie een minimum[1] heeft, wil dat zeggen dat S niet verandert wanneer we het pad waarover we hem berekenen een klein beetje verandert. Dit heet het *Variatieprincipe van Hamilton*. Op eerste orde geldt dan

$$\delta S = S(\bar{x} + \delta x) - S(\bar{x}) = 0. \tag{1.5}$$

Met andere woorden: de variatie in de actie, gegeven door de actie bij een alternatief pad minus de actie bij een klassiek pad, is nul. Voor de actie over een alternatief pad krijgen we

$$S(\bar{x} + \delta x) = \int_{t_\mathrm{b}}^{t_\mathrm{e}} L(x + \delta x, \dot{x} + \delta\dot{x}, t)\,\mathrm{d}t.$$

En wanneer we dit expanderen tot op eerste orde

$$\begin{aligned} S(\bar{x} + \delta x) &= \int_{t_\mathrm{b}}^{t_\mathrm{e}} \left(L(x,\dot{x},t) + \delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) \mathrm{d}t \\ &= S(x) + \int_{t_\mathrm{b}}^{t_\mathrm{e}} \left(\delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) \mathrm{d}t \end{aligned}$$

1 Of eigenlijk een extremum.

Dus voor de variatie in S zoals gegeven in (1.5) geldt

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_{t_b}^{t_e} \left(\delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) \mathrm{d}t \\ &= \delta x \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_{t_b}^{t_e} - \int_{t_b}^{t_e} \delta x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} \right) \mathrm{d}t = 0.\end{aligned}$$

Hierbij hebben we gebruik gemaakt van partiële integratie. De eerste term valt weg door de restrictie die we aan $\delta x(t)$ hebben opgelegd in (1.4). Om de integraal nul te krijgen, moet de integrand nul zijn zodat:

$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \\ \Rightarrow \qquad &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x} \end{aligned} \tag{1.6}$$

Deze differentiaalvergelijking levert ons een beweging op wanneer de Lagrangiaan van een deeltje bekend is. Hij staat bekend als de *Euler-Lagrange vergelijking*.

Bij de berekening van deze bewegingsvergelijking is de actie S zelf niet zozeer interessant. Wat een veel grotere rol speelt is de manier waarop we deze uitrekenen. Om S te berekenen hebben we namelijk de naburige paden nodig om *dat* pad uit te zoeken dat de kleinste actie heeft. We hebben immers variaties $\delta x(t)$ op het klassieke pad $\bar{x}(t)$ bekeken en hiervan de minst afwijkende gekozen. Iets om in ons achterhoofd te houden.

1.2 Kwantummechanische paden

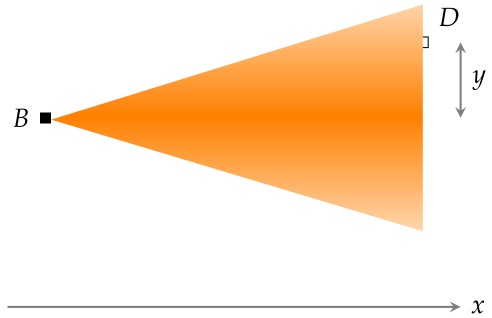
In de vorige sectie produceerde de bron alleen klassieke deeltjes. We noemen een deeltje klassiek als zijn afmetingen groot zijn ten opzichte van een kwantummechanische lengteschaal. Hiervoor hanteren we de De Broglie golflengte

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{1.7}$$

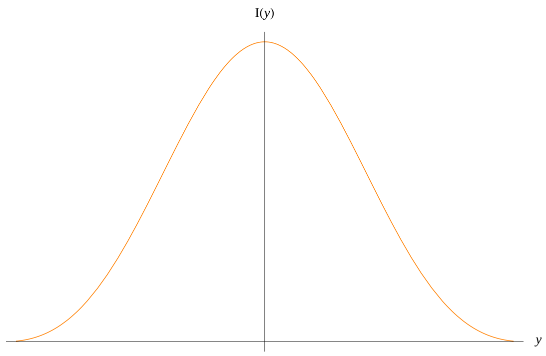
Wanneer een deeltje een grootte heeft in de orde van een De Broglie golflengte, mogen we kwantummechanische effecten *niet* verwaarlozen. Laten we eens kijken wat er gebeurt wanneer we een bron gebruiken die kwantummechanische deeltjes maakt, zoals elektronen. Wanneer we nu de detector aanzetten, merken we dat we niet meer alle deeltjes meten die door B zijn uitgezonden. Om een poging te wagen de 'verloren' deeltjes terug te vinden passen we de detector dusdanig aan dat we D in verticale richting kunnen bewegen over een afstand y ten opzichte van de horizontale as door B (zie figuur 1.2). Nu kunnen we de *intensiteit* I verkrijgen door het signaal van de detector op verschillende hoogtes te integreren over de tijd. Wanneer we dit uitzetten tegen de hoogte y ontstaat een patroon zoals weergegeven in figuur 1.3.

Het patroon in figuur 1.3 lijkt op het diffractiepatroon van een golf door één spleet. Toch kunnen we te weten komen of we echt met deeltjes te maken hebben. Bij een zwakke elektronenbron geeft de detector af en toe een signaal, niet continu. Dit wijst er op dat we losse objecten meten. Ook is de sterkte van het signaal altijd even groot (we gaan uit van een zeer gevoelige detector). We meten dus telkens één elektron en niet een halve of een andere breuk.

We moeten concluderen dat we niet meer kunnen spreken van *het* pad dat een deeltje aflegt: een elektron heeft de mogelijkheid om meerdere paden af te leggen. Daarnaast



Figuur 1.2 In plaats van klassieke deeltjes produceert bron B nu elektronen. Niet alle elektronen komen in detector D terecht, ze waaieren uit. We passen de detector zo aan dat deze verticaal kan bewegen over een afstand y ten opzichte van de horizontale as door B.

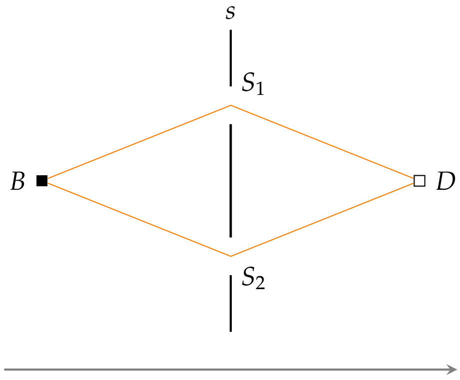


Figuur 1.3 Spreiding zoals gemeten door de detector na integratie over de tijd. Dit komt overeen met een diffractiepatroon van een golf door een spleet.

kunnen we niet meer bepalen op welke plek een elektron aan komt. We kunnen alleen spreken over de *waarschijnlijkheid* P waarmee we een elektron op hoogte y kunnen detecteren. Uit figuur 1.3 blijkt dat het nog steeds het meest waarschijnlijk is om een deeltje recht tegenover de bron aan te treffen, maar er zijn ook deeltjes die verder weg van deze as terecht komen. De kans hierop wordt wel steeds kleiner naarmate we ons verder van deze as begeven.

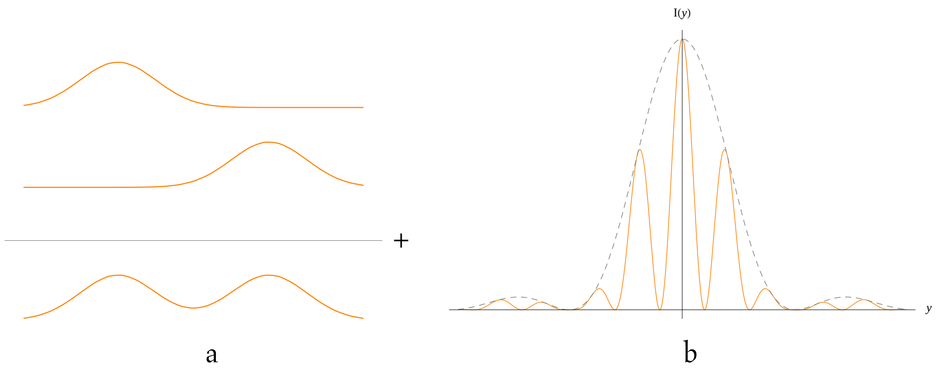
1.3 Twee spleten

Om het de elektronen moeilijker te maken om direct van B naar D te reizen, plaatsen we tussen de bron en de detector een scherm s met daarin twee spleten S_1 en S_2 zoals weergegeven in figuur 1.4. We hebben net al gezien dat een elektron over verschillende paden kan reizen. De vraag is nu of een elektron uit B zal 'kiezen' om via S_1 naar D te reizen, of via S_2. Dit is het welbekende twee-spleten experiment van Young. We zullen hier de uitkomsten kort herhalen en koppelen aan de postulaten waarmee Feynman de kwantummechanica opbouwt.



FIGUUR 1.4 Het twee-spleten experiment. Tussen bron B en detector D plaatsen we een scherm s met daarin twee spleten S_1 en S_2. Deeltjes uit B kunnen twee paden afleggen om in D aan te komen.

De spleten S_1 en S_2 kunnen we beschouwen als afzonderlijke bronnen. De elektronen uit S_1 zullen een spreiding vertonen zoals we hebben gezien in figuur 1.3. Hetzelfde geldt voor elektronen uit S_2. Wanneer we beide spreidingen optellen ontstaat een patroon zoals te zien in figuur 1.5a. Klaar! Of toch niet…



FIGUUR 1.5 a. Spreiding door optellen van de losse spreidingen behorende bij spleet S_1 en spleet S_2. b. Spreiding zoals gemeten door de detector bij het twee-spleten experiment. De grijs gestreepte lijn geeft het diffractiepatroon weer bij twee spleten.

Wanneer we het experiment uitvoeren en de intensiteit uitzetten tegen de plaats van de detector blijkt er een veel ingewikkelder patroon te ontstaan (zie figuur 1.5b). We zien een combinatie van een interferentie- en een diffractiepatroon. Het moge duidelijk zijn dat bovenstaande redenatie niet klopt. Blijkbaar kunnen we niet zomaar de waarschijnlijkheden van S_1 en S_2 bij elkaar optellen, met andere woorden:

$$P \neq P_1 + P_2.$$

In plaats van direct de waarschijnlijkheid te bekijken stellen we dat P is uit te rekenen met de modulus kwadraat van een complex getal ψ, de *waarschijnlijkheidsamplitude*:

$$P = |\psi|^2. \tag{1.8}$$

Dit geeft het eerste postulaat van Feynman weer.

Postulaat 1 De waarschijnlijkheid van een gebeurtenis wordt gegeven door de modulus kwadraat van een complex getal, genaamd de *waarschijnlijkheidsamplitude*.

Voor de afzonderlijke waarschijnlijkheidsamplitudes van S_1 en S_2 geldt nog steeds

$$P_1 = |\psi_1|^2 \qquad \text{en} \qquad P_2 = |\psi_2|^2.$$

Het verschil komt pas bij het uitrekenen van de ψ voor het *totale* experiment. We stellen nu dat we de waarschijnlijkheidsamplitudes wel mogen sommeren:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2. \tag{1.9}$$

Zodat voor de waarschijnlijkheid van het totale experiment geldt

$$P = |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2.$$

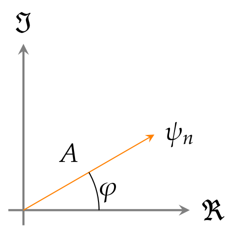
Dit levert ons het tweede postulaat.

Postulaat 2 De waarschijnlijkheidsamplitude van een gebeurtenis is de som van de *bijdragen* behorende bij de verschillende paden tussen begin en eindpunt.

1.4 Fases en acties

Om inzicht te krijgen in wat de waarschijnlijkheidsamplitude eigenlijk is, maken we een uitstapje naar de golfmechanica van Schrödinger. De Schrödingervergelijking geeft ons een beschrijving van de beweging van een kwantummechanisch deeltje in de vorm van een golfvergelijking. De oplossingen van de Schrödingervergelijking zijn golven. Een superpositie van deze golven geeft ons een beschrijving van de evolutie van een deeltje. Voor een deeltje met gegeven impuls p en totale energie E heeft zo een golf de vorm

$$\Psi(x,t) = A\,\mathrm{e}^{i(px-Et)/\hbar}\,. \tag{1.10}$$



Figuur 1.6 Een vector met lengte A onder hoek φ in het complexe vlak. Dit komt overeen met een fasor $A\,\mathrm{e}^{i\varphi}$.

Dit is een *vlakke golf* met amplitude A en complexe fase

$$\varphi := (px - Et)/\hbar.$$

Uitdrukkingen van de vorm $A\,\mathrm{e}^{i\varphi}$ noemen we een *fasor*. Een fasor kunnen we weergeven in het complexe vlak als een vector met lengte A onder een hoek φ (zie figuur 1.6). Wanneer we met een deeltje meereizen over zijn pad zal φ veranderen met een snelheid van

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} &= (pv - E)\,/\hbar\\ &= \left(mv^2 - \frac{1}{2}mv^2 - V\right)/\hbar\\ &= \left(\frac{1}{2}mv^2 - V\right)/\hbar\\ &= L/\hbar.\end{aligned} \tag{1.11}$$

Het faseverschil tussen twee tijdstippen t_1 en t_2 wordt dan grof gezegd

$$\varphi_2 - \varphi_1 = \int_{t_1}^{t_2} L(t)/\hbar \,\mathrm{d}t = S(t_2, t_1)/\hbar. \tag{1.12}$$

Wat we hebben gedaan is het *faseverschil* op twee tijdstippen uitdrukken in de bijbehorende (klassieke) actie gewogen met $\hbar$. Merk op dat de constante van Planck precies de dimensie heeft van energie maal tijd, zodat de fase dimensieloos is. Wanneer we dit antwoord combineren met de golf in (1.10) komen we op het laatste postulaat van Feynman.

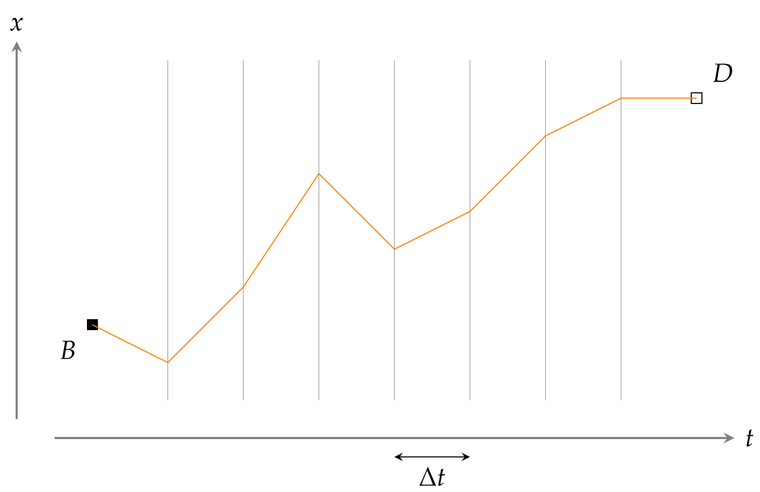
Postulaat 3 De bijdrage van een pad aan de waarschijnlijkheidsamplitude is proportioneel met $\mathrm{e}^{iS/\hbar}$ waarbij de *actie* S wordt berekend over dit specifieke pad.

1.5 Nog meer spleten

We hebben genoeg informatie over padintegralen verzameld om een concrete afleiding te geven. Hiervoor keren we weer terug naar de spleten-experimenten. In voorgaande secties vonden onze experimenten plaats in een twee dimensionale ruimte. Nu doen we een stapje terug en beschouwen een pad van een bron B naar een detector D in slechts één dimensie. Ons deeltje bevind zich op tijdstip t_B in x_B en op tijdstip t_D in x_D. Om een pad te kunnen karakteriseren splitsen we de tijd op in N *snedes* van grootte Δt zodat

$$\Delta t := \frac{t_D - t_B}{N}. \tag{1.13}$$

In figuur 1.7 is een mogelijk pad getekend van bron naar detector. Het pad is in de tijd uitgerekt, zodat we op ieder tijdstip t_n kunnen aangeven waar het deeltje zich bevindt. Zo een positie is op te vatten als een *spleet* in een scherm op tijdsnede n. Het is natuurlijk goed mogelijk dat het deeltje op een tijdsnede een *andere* spleet had gekozen, met als gevolg dat het een ander pad aflegt. Hier komen we later op terug. Merk op dat het deeltje niet terug kan in de tijd. Wel kan het heen en weer bewegen in de plaats en hoeft dus niet met constante snelheid van B naar D te reizen.



Figuur 1.7

Om de padintegraal af te leiden lopen we effectief de postulaten uit §1.3 in omgekeerde volgorde af. Uit het derde postulaat weten we dat de *bijdrage* aan een pad proportioneel is met de actie. Wanneer we van tijdsnede n naar snede $n+1$ gaan kunnen we de bijdrage $\psi_{n\to n+1}$ uitrekenen met

$$\psi_{n\to n+1} = A\,\mathrm{e}^{iS/\hbar}\,. \tag{1.14}$$

Wel moeten we de actie voor dit korte pad kunnen uitrekenen. Dit kan met een benadering van de Lagrangiaan tot op eerste orde, zodat

$$S \approx L\left(\frac{x_{n+1}+x_n}{2}, \frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}, \frac{t_{n+1}+t_n}{2}\right)\Delta t. \tag{1.15}$$

De bijdrage voor een stukje pad tussen tijdstippen t_n en t_{n+1} is dan bij benadering

$$\psi_{n\to n+1} \approx A\exp\left[\frac{i}{\hbar}L\left(\frac{x_{n+1}+x_n}{2}, \frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}, \frac{t_{n+1}+t_n}{2}\right)\Delta t\right].$$

Maar we willen de bijdrage van het *volledige* pad. Hier komen de fasoren weer om de hoek kijken. De gebeurtenissen $t_0, t_1, \dots, t_N$ vinden na elkaar plaats op hetzelfde pad. Stel je op tijdstip t_0 een fasor voor die langs de reële as ligt ($\varphi_0 = 0$). We laten de fasor nu meereizen over het pad. Ondertussen draait hij rond met een snelheid die we in (1.11) hebben afgeleid. Wanneer hij is aangekomen op tijdstip t_1 is hij gedraaid met een hoek

$$\varphi_1 = \left(L\left(\frac{x_1+x_0}{2}, \frac{x_1-x_0}{\Delta t}, \frac{t_1+t_0}{2}\right)\Delta t\right)/\hbar.$$

Vervolgens draait hij weer verder wanneer hij naar t_2 beweegt. We moeten de *fases* die bij iedere tijdsnede horen dus bij elkaar *optellen*. Dit staat gelijk aan het *vermenigvuldigen* van de bijbehorende *fasoren*. De totale bijdrage van t_0 naar t_N wordt dan

$$\begin{aligned}\psi_{0\to N} &\approx \prod_{n=0}^{N-1}\psi_{n\to n+1}\\ &= A^N\prod_{n=0}^{N-1}\exp\left[\frac{i}{\hbar}L\left(\frac{x_{n+1}+x_n}{2}, \frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}, \frac{t_{n+1}+t_n}{2}\right)\Delta t\right]. \end{aligned}\tag{1.16}$$

Om de *waarschijnlijkheidsamplitude* uit te rekenen bij de overgang van B naar D moeten we, volgens het tweede postulaat, de som nemen over *alle mogelijke paden* van x_B naar x_D. Tot nu toe hebben we alleen maar één pad uitgerekend. Daarbij zijn we er van uit gegaan dat ons pad op ieder tijdstip t_n over vastgelegde punten x_n loopt. (Met andere woorden: we laten het deeltje door specifieke spleten gaan.) Deze plaats is natuurlijk willekeurig te kiezen uit *alle mogelijke waarden* van x. Om elk mogelijk pad van B naar D te krijgen, moeten we dus integreren over alle mogelijke tussenpunten voor elke tijdsnede t_n. In figuur 1.7 kunnen we zien dat t_0 en t_N hierop een uitzondering zijn, de bijbehorende x-waarden liggen immers vast. We krijgen dus $N-1$ keer een integraal over x_n waarbij n loopt van 1 tot $N-1$. Dit leid tot

$$\psi \approx \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{0\to N}\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\,\cdots\,\mathrm{d}x_{N-1}.$$

Hier hebben we nog steeds te maken met een benadering. Door onze tijdsnedes smaller te maken, krijgen we de correcte uitdrukking voor de waarschijnlijkheidsamplitude. We nemen dus de limiet van N naar oneindig zodat Δt naar nul gaat volgens de definitie in (1.13). We krijgen

$$\psi = \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{0\to N} \, \mathrm{d}x_1 \, \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_{N-1}$$
$$=: \int_{x_B}^{x_D} \mathrm{e}^{iS/\hbar} \, \mathcal{D}x. \tag{1.17}$$

Hierbij is de uitdrukking

$$\int_{x_B}^{x_D} \mathcal{D}x := \lim_{N\to\infty} A^N \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \, \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_{N-1} \tag{1.18}$$

de *maat* van de padintegraal.

1.6 Waar alles om draait

Tot nu toe beschouwden we ψ als een waarschijnlijkheidsamplitude. Wanneer we hier de modulus kwadraat van nemen, komen we achter de waarschijnlijkheid om een deeltje dat zich bevond in x' op tijdstip t' aan te treffen in x op tijdstip t. Deze waarschijnlijkheidsamplitude kunnen we ook noteren als

$$K(x,t;x',t') := \psi$$

en wordt ook wel de *kernel* genoemd. Deze kernel is voor één dimensie en wordt volgens (1.17) uitgerekend door

$$K(x,t;x',t') = \int_{x=x(t)}^{x'=x(t')} \mathrm{e}^{iS/\hbar} \, \mathcal{D}x.$$

Maar hoe rekenen we zo een padintegraal nu uit? Laten we deze keer een concrete Lagrangiaan nemen

$$L := \frac{1}{2} m\dot{x}^2,$$

een vrij deeltje. Wanneer we de maat uit (1.18) gebruiken en onze benaderingsmethode uit (1.16) invullen krijgen we een lange reeks integralen. Effectief splitsen we de integraal over alle paden op in integralen over alle mogelijke tussenpunten:

$$K(x,t;x',t')$$
$$= \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A^N \prod_{n=0}^{N-1} \exp\left[\frac{i}{\hbar} L\left(\frac{x_{n+1}+x_n}{2}, \frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}, \frac{t_{n+1}+t_n}{2}\right)\Delta t\right] \mathrm{d}x_1 \, \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_{N-1}$$
$$= \lim_{N\to\infty} A^N \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=0}^{N-1} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2} m \left(\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t}\right)^2 \Delta t\right] \mathrm{d}x_1 \, \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_{N-1}$$
$$= \lim_{N\to\infty} A^N \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\Delta t} \sum_{n=0}^{N-1} (x_{n+1}-x_n)^2\right]. \, \mathrm{d}x_1 \, \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_{N-1}$$

Hierbij hebben we het product vervangen door een som in de exponent.[2] Deze reeks integralen zijn stuk voor stuk op te lossen. Bekijk eerst de exponentiële factoren die x_1 bevatten. Deze komt voor in combinatie met x_0 en x_2:

2 Niet geheel onzinnig als je bedenkt dat we in §1.5 hebben beredeneerd dat we fases moeten optellen.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[k\left((x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2\right)\right] \, \mathrm{d}x_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[k\left(2x_1^2 - 2(x_2 + x_0)x_1 + (x_2^2 + x_0^2)\right)\right] \, \mathrm{d}x_1.$$

Voor ons gemak hebben we de contstante $k := \frac{im}{2\hbar\Delta t}$ gedefinieerd. We hebben een integraal over een Gaussische functie die weer een Gaussische functie oplevert (zie ook appendix a). Met (a.6) krijgen we

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2k}} \exp\left[k\left(x_2^2 + x_0^2 - \frac{4(x_2 + x_0)^2}{4 \cdot 2}\right)\right] \sim \exp\left[\frac{k}{2}(x_2 - x_0)^2\right].$$

De constante factor kunnen we buiten beschouwing laten, aangezien we die kunnen absorberen in de constante A. De volgende exponentiële factor heeft de vorm

$$\exp\left[k(x_3 - x_2)^2\right].$$

We vermenigvuldigen ons resultaat met bovenstaande en integreren over x_2:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{k}{2}(x_2 - x_0)^2\right] \exp\left[k(x_3 - x_2)^2\right] \, \mathrm{d}x_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{k}{2}(x_2 - x_0)^2 + k(x_3 - x_2)^2\right] \, \mathrm{d}x_2$$

$$\sim \exp\left[\frac{k}{3}(x_3 - x_0)^2\right].$$

We zien een recursief patroon ontstaan. Na in totaal $N - 1$ keer integreren krijgen we een exponent in de vorm

$$\exp\left[\frac{k}{N}(x_N - x_0)^2\right] = \exp\left[\frac{im}{2\hbar N\Delta t}(x_N - x_0)^2\right].$$

We weten dat x_0 en x_N respectievelijk onze begin- en eindpositie zijn, x en x' dus. Daarnaast volgt uit de definitie van Δt in (1.13) dat $N\Delta t = t - t'$. De kernel voor een vrij deeltje in één dimensie wordt dus

$$K(x, t; x', t') = A^N \exp\left[\frac{im}{2\hbar(t - t')}(x - x')^2\right]. \tag{1.19}$$

Wat ons nu nog rest is het berekenen van de normalisatie constante A. Stel nu dat we de *toestand* van het deeltje op positie x' en tijdstip t' al weten: hij is gegeven door de *toestandsfunctie* $\Psi(x', t')$. Wat we willen is de toestandsfunctie Ψ berekenen voor x op t. Dit kunnen we doen met de formule

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, t; x', t')\Psi(x', t') \, \mathrm{d}x'. \tag{1.20}$$

We splitsen als het ware het pad op in tweeën: een pad naar x' en vervolgens naar x.

Met het resultaat uit (1.19) kunnen we de toestandsfunctie uitrekenen om in een tijdsinterval Δt van x' naar x te komen:

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} A \exp\left[\frac{im}{2\hbar\Delta t}(x - x')^2\right] \Psi(x', t) \, \mathrm{d}x'$$

We zien dat wanneer x' veel verschilt van x, de exponent sterk oscilleert. De integraal levert in deze gevallen een kleine waarde op. Pas als x' in de buurt komt van x ontstaan wel significante contributies. Hierop gebaseerd maken we de substitutie

$$x' := x + \Delta x$$

waarbij Δx kleine variaties zijn op x. Belangrijke contributies komen dus alleen voor wanneer Δx klein is. Voor onze overgangsamplitude volgt dat

$$\Psi(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} A \exp\left[\frac{im}{2\hbar\Delta t}\Delta x^2\right] \Psi(x + \Delta x, t)\, \mathrm{d}(\Delta x). \tag{1.21}$$

We zien dat de exponent varieert op eerste orde, wanneer

$$\Delta x \sim \sqrt{\frac{2\hbar}{m}\Delta t}.$$

Wanneer we (1.21) willen expanderen tot op eerste orde in Δx (deze was immers klein ten opzichte van x) moeten we rekening houden met een expansie van Δt tot op orde twee:

$$\Psi(x, t) + \frac{\partial \Psi}{\partial t}\Delta t = \int_{-\infty}^{\infty} A \exp\left[\frac{im}{2\hbar\Delta t}\Delta x^2\right] \left(\Psi(x, t) + \Delta x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) \mathrm{d}(\Delta x). \tag{1.22}$$

Bovenstaande uitdrukking bekijken we term voor term en we zien dat moet gelden dat

$$\Psi(x, t) = A \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\Delta t}\Delta x^2\right] \Psi(x, t)\, \mathrm{d}(\Delta x). \tag{1.23}$$

De enige mogelijkheid om hier aan te voldoen is wanneer de integraal gelijk is aan één. Hierdoor kunnen we een restrictie opleggen voor A:

$$\begin{aligned} \frac{1}{A} &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\Delta t}\Delta x^2\right] \mathrm{d}(\Delta x) \\ &= \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\Delta t}{m}} \end{aligned}$$

ofwel:

$$A = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}. \tag{1.24}$$

In de volgende hoofdstukken kunnen we hier verder mee rekenen.

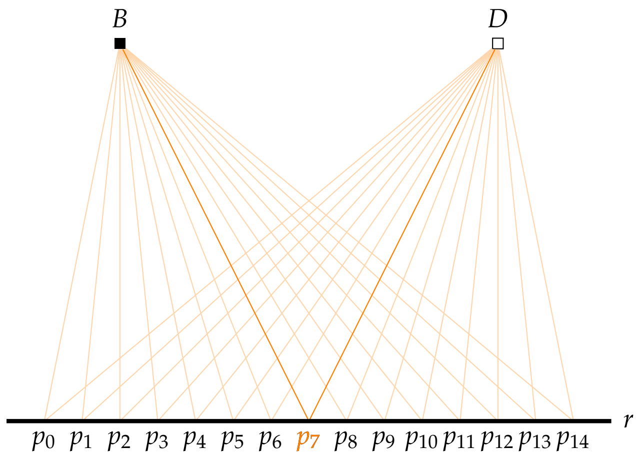
12

2 Reflecterende deeltjes

Inleiding *Todo*

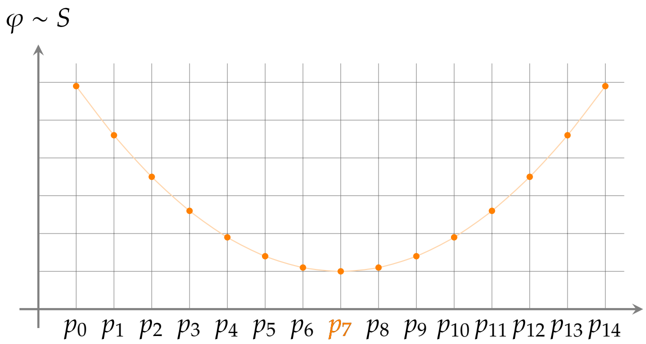
2.1 Een reflectie-experiment

We stappen even af van ons spleten-experiment en bekijken een nieuwe opstelling [4–5]. In plaats van deeltjes rechtstreeks van een bron B naar een detector D te sturen, schieten we elektronen richting een reflecterende plaat r. Klassiek gezien zou een deeltje het pad volgen waarbij de hoek van inval gelijk is aan de hoek van terugkaatsing. In hoofdstuk 1 hebben we al gezien dat er kwantummechanisch gezien veel meer paden mogelijk zijn. In figuur 2.1 zijn, naast het klassieke pad, veertien van zulke paden getekend. Voor elk pad p_i kunnen we een actie S_i uitrekenen met behulp van (1.2), deze zijn in figuur 2.2 uitgezet. Het pad waarbij de actie minimaal is, komt overeen met het klassieke pad p_7 in figuur 2.1. Dit is in overeenstemming met het variatieprincipe van Hamilton dat we in §1.1 besproken hebben.



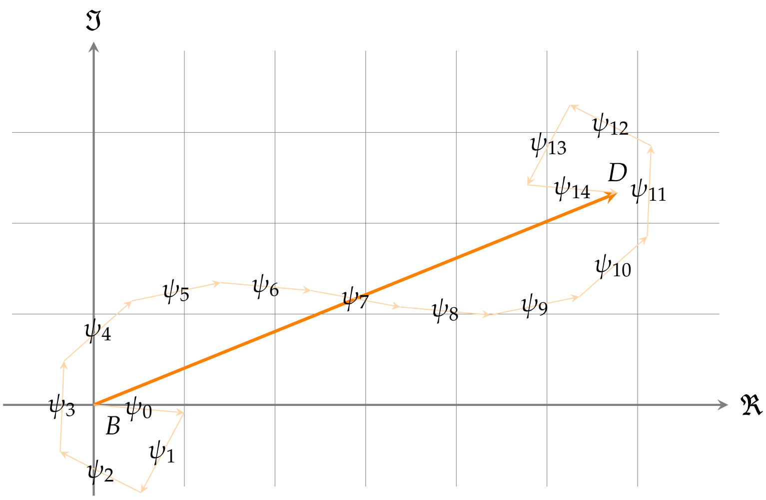
Figuur 2.1 Bron B schiet deeltjes af op een reflecterende plaat r, die vervolgens door detector D worden geregistreerd. Er zijn vijftien mogelijke paden getekend waarop een deeltje van B naar D kan komen. Het benadrukte pad is het klassieke pad.

In §1.3 hebben we gezien dat de actie een maat is voor de fase op het moment dat een deeltje zijn pad heeft doorlopen. Met behulp van de berekende acties in figuur 2.2 kunnen we aan elk pad een fase toekennen en een bijbehorende fasor opstellen. Dit zijn bijdragen voor *verschillende* paden bij de *zelfde* gebeurtenis. De fasoren moeten we dus bij elkaar *optellen*. Een fasor is weer te geven met een vector in het complexe vlak. Fasoren optellen is analoog aan het optellen van deze vectoren. Om de som over alle bijdragen grafisch weer



Figuur 2.2 Acties bij elk pad p_0 tot en met p_{14} zoals weergegeven in figuur 2.1. De actie bij p_7 is minimaal en zodoende is p_7 het klassieke pad van B naar D.

te geven kunnen we de berekende fasoren kop-staart leggen in het complexe vlak. Dit is te zien in figuur 2.3. De resulterende fasor (vector) geeft dan de waarschijnlijkheidsamplitude om van B naar D te komen. Volgens het tweede postulaat moeten we deze modulus kwadraat nemen om de waarschijnlijkheid te vinden. Dat betekend dat de *lengte* van de verkregen fasor een maat is voor de waarschijnlijkheid waarmee we een deeltje, dat uit bron B is vertrokken en gereflecteerd is op de plaat, in detector D kunnen aantreffen.



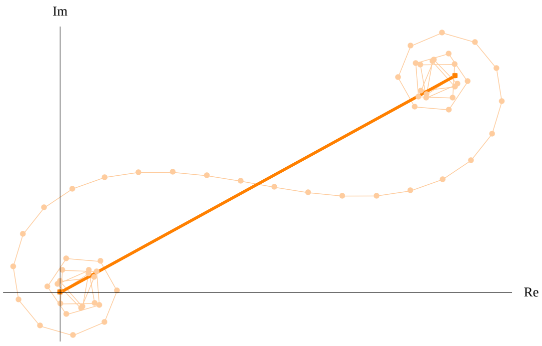
Figuur 2.3

2.2 Klassiek of niet?

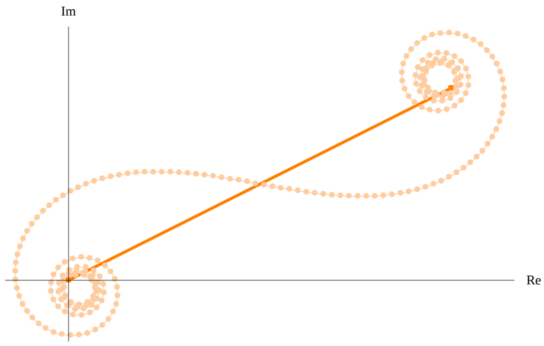
Als we figuur 2.3 bestuderen vallen een paar dingen op. Allereerst zijn alle afzonderlijke fasoren even lang: ze worden allemaal gewogen met dezelfde maat. Dat betekend dat alle paden *even zwaar* mee wegen in de som over alle paden. De paden die dichter bij het klassieke pad liggen hebben dus *geen* voorkeur ten opzichte van de paden die totaal niet klassiek zijn.

Vervolgens valt op dat niet alle fasoren even veel invloed hebben op het resultaat. We zien dat de fasoren die bij totaal niet klassieke paden horen elkaar tegenwerken. Zo draaien de fasoren ψ_0 tot en met ψ_4 bijna een rondje om het beginpunt. Hetzelfde geldt voor de fasoren ψ_{10} tot en met ψ_{14}, alleen draaien deze rond het eindpunt. Er is sprake van *destructieve interferentie* van de bijdragen van *niet* klassiek paden. Dit is ook mooi terug te zien in figuur 2.2. Hoe verder we van het klassieke pad komen, hoe sterker de fases onderling van elkaar gaan verschillen.

Dit kunnen we verder illustreren door de reflecterende plaat naar links en naar rechts uit te breiden. Terwijl we de dichtheid gelijk houden, kunnen we nu meer paden toelaten. Het resultaat voor een twee keer zo lange plaat en twee keer zoveel paden is te zien in figuur 2.4a. Er zijn nu meer paden die ver van klassiek zijn, wat er voor zorgt dat we langer rond begin en eindpunten blijven hangen. We kunnen ook de lengte van de plaat gelijk houden, en het aantal paden opschroeven. De dichtheid van de paden wordt nu groter. Dit levert ons een curve zoals weergegeven in figuur 2.4b. We zien dat de curve steeds gladder wordt naarmate we steeds meer paden nemen.



a $l = 28$ en $N = 30$



b $l = 28$ en $N = 240$

Figuur 2.4

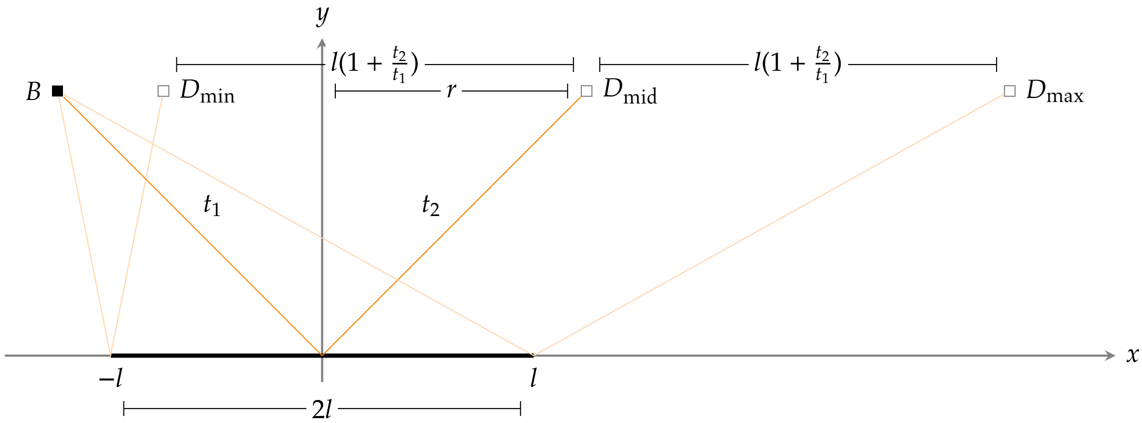
Daartegenover staan de fasoren ψ_5 tot en met ψ_9, die er juist voor zorgen dat we meer in de richting van het eindpunt komen. Hier is sprake van *constructieve interferentie* van de bijdragen van *bijna* klassieke paden. Deze fasoren wegen dus *niet* zwaarder, maar dragen *wel* meer bij aan het resultaat. In figuur 2.2 is te zien dat de grafiek rond het klassieke pad redelijk vlak is, en dat de fases dus dicht bij elkaar in de buurt zitten. Op deze manier *kiezen* we als het ware automatisch het pad met de kleinste actie, precies zoals we ook met het Variatieprincipe van Hamilton zouden doen. Merk ook op dat fasor ψ_7, die hoort bij het klassieke pad, niet dezelfde fase heeft als het resultaat. Een belangrijke gedachte hierbij is dat de resulterende fase niet belangrijk is, maar resulterende lengte. Deze is immers een maat voor de waarschijnlijkheidsamplitude. Het is deze lengte waar fasoren meer aan bijdragen naarmate ze dichter rond het klassieke pad zitten.

De klassieke limiet kunnen we aanschouwelijk maken door de Lagrangiaan, waarmee we de klassieke actie hebben uitgerekend, groter te maken. De fasoren die eerst in het midden te zien waren, schuiven op naar buiten waar ze destructief interfereren. Dat betekend dat als we de massa van een deeltje groter maken, de paden die dichter bij het klassieke geval liggen een grotere bijdrage leveren.

Ten slotte merken we op dat de klok op elk pad *vooruit* loop. Dit is impliciet gedefinieerd in (1.2), waarin L geïntegreerd wordt over de tijd in positieve richting. We hebben hier ook al gebruik van gemaakt bij de afleiding van (1.11) en (1.17). Deeltjes op een pad kunnen dus niet teruggaan in de tijd en vervolgens weer vooruit lopen.

2.3 Spreiding en snelheid

Laten we nog eens goed kijken naar de trajecten die een deeltje kan afleggen. Allereerst definiëren we onze assen. De reflecterende plaat leggen we op de x-as zodanig dat deze in het midden wordt gesneden door de y-as. Als de plaat een lengte heeft van $2l$, loopt deze dus van $-l$ tot l. Het klassieke pad gaat door het midden van de plaat. Dat betekend dat het reflectiepunt in onze opstelling precies in de oorsprong ligt. Wanneer bron B op een afstand r links van de y-as ligt, ligt detector D ook op een afstand r van de y-as, maar dan rechts ervan. Dit alles is schematisch weergegeven in figuur 2.5.



Figuur 2.5 De assen in ons experiment zijn zo gedefinieerd dat de plaat op de x-as ligt en de y-as de plaat middendoor deelt. De lengte van de plaat is $2l$ en loopt dus van $x = -l$ tot $x = l$. De afstand van bron B tot detector D is $2r$ en, aangezien onze opstelling symmetrisch is, is de afstand van beide objecten tot de y-as gelijk r. De spreiding die we dan (klassiek gezien) kunnen verwachten is $2l(1 + t_2/t_1)$. Hierin zijn t_1 en t_2 respectievelijk de tijd waarin het deeltje het traject van B naar de plaat aflegt en de tijd waarin het deeltje het traject van de plaat naar D.

Todo Deze sectie kan beter

We stellen dat het deeltje in een tijd t_1 van bron B naar de plaat reist. Dat betekend dat zijn snelheid in horizontale richting over het klassieke pad gelijk is aan

$$v_{\text{mid}} = \frac{r}{t_1}. \tag{2.1}$$

Klassiek gezien verwachten we ook dat, nadat het deeltje gereflecteerd is, deze zijn snelheid behoud. Als we t_2 seconden later kijken, heeft het deeltje in horizontale richting een afstand afgelegd van

$$v_{\text{mid}} \cdot t_2 = \frac{r}{t_1} t_2 = r\frac{t_2}{t_1}$$

Stel nu dat een deeltje uit B weerkaatst op precies het laatste punt op de plaat, dat is $x = l$. Dan had het deeltje klassiek gezien een snelheid van

$$v_{\text{max}} = \frac{r + l}{t_1}.$$

Na t_2 seconden legt het, analoog aan hierboven,

$$v_{\max} \cdot t_2 = (r+l)\frac{t_2}{t_1}$$

meter af. De plaats waar het deeltje te vinden is, is dan

$$l + (r+l)\frac{t_2}{t_1} = r\frac{t_2}{t_1} + l(1 + \frac{t_2}{t_1}).$$

Het verschil met de het deeltje dat weerkaats op het midden van de plaat is

$$l(1 + \frac{t_2}{t_1}).$$

Hetzelfde geld voor een deeltje dat op het eerste punt op de plaat is gereflecteerd. Dat betekend dat waar we eerst een spreiding van deeltjes hadden van $2l$, we nu, klassiek gezien, een spreiding hebben van $2l(1 + \frac{t_2}{t_1})$. Dit zullen we in hoofdstuk 3 nog tegenkomen.

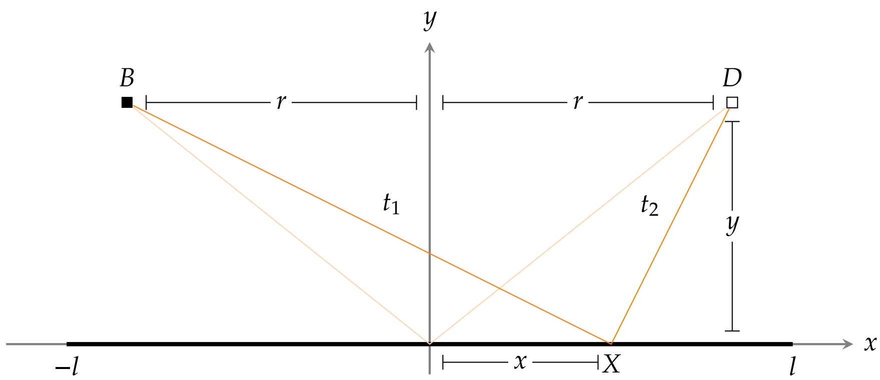
18

3 Maten en integralen

<u>*Inleiding*</u> *Todo*

3.1 Begin van het begin

We beginnen weer met de opzet van het reflectie-experiment uit hoofdstuk 2. We nemen een bron B. Op afstand $2r$ zetten we een detector D. Onder de bron en de detector plaatsen we een reflecterende plaat van lengte $2l$ op afstand y. Het geheel centreren we rond de y-as zodat het klassieke pad door de oorsprong gaat. Een deeltje dat door B uitgezonden wordt, reflecteert in punt X op de plaat en komt vervolgens in D terecht.



Figuur 3.1 Het reflectie-experiment met alle gebruikte afstanden. Bron B staat op een afstand r links van de y-as. Rechts van de y-as staat detector D, ook op afstand r. De plaat staat op afstand y van de bron en de detector. De plaat loopt van $-l$ tot l op de x-as en heeft dus een lengte van $2l$. Het reflectiepunt X ligt op de x-as op een afstand x. Een deeltje legt eerst een traject af van B naar X in t_1 seconden, vervolgens legt het het traject van X naar D af in t_2 seconden. Het klassieke pad is licht weergegeven en loop door de oorsprong.

Allereerst bekijken we het traject van B naar X. Op $t = 0$ vertrekt een deeltje uit B, dat is de positie $(-r, y)$. We nemen aan dat na een tijd t_1 het deeltje te vinden is op de plaat, dus op $y = 0$ en x tussen $-l$ en l. Dit noemen we het *reflectiepunt* X. Hierna vervolgt het deeltje zijn weg naar D op (r, y) waar het t_2 later aankomt. Wij vragen ons af:

> *'Wat is de kans om een deeltje in D aan te treffen op tijdstip $t_1 + t_2$ als het zich op t_1 op de plaat bevond.'*

We hebben al eerder de overgangsamplitude voor een vrij deeltje berekend in (1.19). Deze kunnen we eenvoudig generaliseren naar twee dimensies:

$$K(x,y,t;x',y',t') = \frac{m}{2\pi i\hbar(t-t')} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(x-x')^2+(y-y')^2}{t-t'}\right]. \tag{3.1}$$

Merk op dat we in de voorfactor de wortel kwijt zijn aangezien we twee vrijheidsgraden hebben en we de voorfactor moeten kwadrateren. De overgangsamplitude voor de overgang van B naar X wordt dan

$$\begin{aligned} K(X,B) &= K(x,0,t_1;-r,y,0) \\ &= \frac{m}{2\pi i\hbar t_1} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(x+r)^2+y^2}{t_1}\right]. \end{aligned} \tag{3.2}$$

En voor de overgang van X naar D

$$\begin{aligned} K(D,X) &= K(r,y,t_1+t_2;x,0,t_1) \\ &= \frac{m}{2\pi i\hbar t_2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{(r-x)^2+y^2}{t_2}\right]. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Dit zijn twee gebeurtenissen die na elkaar plaatsvinden op hetzelfde pad. Net zoals in §1.5 moeten we de overgangsamplitudes met elkaar vermenigvuldigen. Daarnaast moeten we nog integreren over alle mogelijke reflectiepunten X. Dat wil zeggen, alle mogelijke waarden van x, en die lag tussen $-l$ en l.

$$\begin{aligned} \psi(r) &= \int_{-l}^{l} K(D,X)\cdot K(X,B)\,\mathrm{d}x \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^2 \frac{1}{t_1t_2}\int_{-l}^{l} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{(x+r)^2+y^2}{t_1}+\frac{(r-x)^2+y^2}{t_2}\right)\right]\mathrm{d}x \end{aligned} \tag{3.4}$$

We hebben nu een formule voor de *waarschijnlijkheidsamplitude* van een deeltje om van de bron, via de plaat, naar de detector te komen. Deze is afhankelijk van r, de plaats waar de detector staat.

3.2 Einde van het begin

De volgende stap is natuurlijk het uitrekenen van deze integraal. Helaas is hij niet snel op te lossen. Na enig herschijf werk volgt

$$\begin{aligned} \psi(r) &= -\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{1}{t_1t_2}\int_{-l}^{l} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{1}{t_1t_2}\left(\left((x+r)^2+y^2\right)t_2+\left((r-x)^2+y^2\right)t_1\right)\right]\mathrm{d}x \\ &= -\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{1}{t_1t_2}\int_{-l}^{l} \exp\left[\frac{im}{2\hbar t_1t_2}\left((t_1+t_2)x^2+2r(t_2-t_1)x+(r^2+y^2)(t_1+t_2)\right)\right]\mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{3.5}$$

We zien dat we te maken hebben met een kwadratische functie in een exponent. Met behulp van een standaardintegraal kunnen we bovenstaande uitdrukken in *Fresnelintegralen* (zie ook appendix a achterin):

$$\begin{aligned} \psi(r) = &-\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^2 \frac{1}{t_1t_2}\frac{1-i}{2}\sqrt{\frac{2\pi\hbar t_1t_2}{im(t_1+t_2)}} \\ &\cdot\exp\left[\frac{im}{2\hbar t_1t_2}\left((r^2+y^2)(t_1+t_2)-\frac{4r^2(t_2-t_1)^2}{4(t_1+t_2)}\right)\right] \\ &\cdot\Big(\mathrm{frec}[u(x)]-i\,\mathrm{fres}[u(x)]\Big)\Big|_{-l}^{l} \end{aligned} \tag{3.6}$$

Waarbij onze integratievariabele alleen nog te vinden is in $u(x)$:

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{1+i}{2}\sqrt{\frac{im}{2\hbar t_1 t_2}}\frac{2r(t_2-t_1)+2(t_1+t_2)x}{\sqrt{\pi(t_1+t_2)}} \\ &= i\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}}\frac{(x+r)t_1+(x-r)t_2}{\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}} \end{aligned} \tag{3.7}$$

Merk op dat deze uitdrukking dimensieloos is. Na het invullen van de grenzen vinden we

$$u(\pm l) = i\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}}\frac{(\pm l+r)t_1+(\pm l-r)t_2}{\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}}. \tag{3.8}$$

We definiëren twee nieuwe variabelen u_+ en u_- aan de hand van bovenstaande uitdrukking, maar *zonder* de imaginaire eenheid i. Door gebruik te maken van de eigenschappen van Fresnelintegralen (zoals beschreven in §a.1) kunnen we deze later uit de argumenten halen.

$$u_\pm := \frac{u(\pm l)}{i} = \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}}\frac{(\pm l+r)t_1+(\pm l-r)t_2}{\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}} \tag{3.9}$$

Wanneer we nu de grenzen invullen krijgen we namelijk

$$\begin{aligned} \Big(\mathrm{frec}[u(x)] - i\,\mathrm{fres}[u(x)]\Big)\Big|_{-l}^{l} &= \mathrm{frec}[u(l)] - i\,\mathrm{fres}[u(l)] - \mathrm{frec}[u(-l)] + i\,\mathrm{fres}[u(-l)] \\ &= i\,\mathrm{frec}[u_+] + i^2\,\mathrm{fres}[u_+] - i\,\mathrm{frec}[u_-] - i^2\,\mathrm{fres}[u_-l] \\ &= i\Big(\mathrm{frec}[u_+] - \mathrm{frec}[u_-] + i(\mathrm{fres}[u_+] - \mathrm{fres}[u_-])\Big) \end{aligned} \tag{3.10}$$

Laten we ook de voorfactor op de eerste regel vereenvoudigen:

$$\begin{aligned} -\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^2\frac{1}{t_1t_2}\frac{1-i}{2}\sqrt{\frac{2\pi\hbar t_1t_2}{im(t_1+t_2)}} &= -\frac{1}{8}\frac{m^2}{\pi^2\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m}}(1-i)(1-i)\frac{1}{\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}} \\ &= \frac{i}{4}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}} \end{aligned} \tag{3.11}$$

De exponent van de tweede regel vereenvoudigt tot

$$\begin{aligned} &\exp\left[\frac{im}{2\hbar t_1t_2}\left((r^2+y^2)(t_1+t_2) - \frac{4r^2(t_2-t_1)^2}{4(t_1+t_2)}\right)\right] \\ &= \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{1}{t_1t_2}\left(\frac{r^2}{t_1+t_2}\Big((t_1+t_2)^2-(t_2-t_1)^2\Big) + y^2(t_1+t_2)\right)\right] \\ &= \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{r^2}{t_1+t_2} + y^2\left(\frac{1}{t_1}+\frac{1}{t_2}\right)\right)\right]. \end{aligned} \tag{3.12}$$

Na deze vereenvoudigingen vinden we voor de waarschijnlijkheidsamplitude

$$\begin{aligned} \psi(r) = &-\frac{1}{4}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}} \\ &\cdot\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{r^2}{t_1+t_2} + y^2\left(\frac{1}{t_1}+\frac{1}{t_2}\right)\right)\right] \\ &\cdot\Big(\mathrm{frec}[u_+] - \mathrm{frec}[u_-] + i(\mathrm{fres}[u_+] - \mathrm{fres}[u_-])\Big). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Waarbij de min ontstaat door vermenigvuldiging van de imaginaire eenheden uit de voorfactor in (3.11) en de ingevulde grenzen in (3.10).

3.3 Begin van het einde

De waarschijnlijkheidsdichtheid dat een deeltje door de plaat wordt gereflecteerd, is de modulus kwadraat van de amplitude berekend in (3.13):

$$\begin{aligned} p(r) &= |\psi(r)|^2 \\ &= \left(-\frac{1}{4}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}}\right)^2\left((\mathrm{frec}[u_+]-\mathrm{frec}[u_-])^2+(\mathrm{fres}[u_+]-\mathrm{fres}[u_-])^2\right) \\ &= \frac{1}{16}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^3\frac{1}{t_1t_2(t_1+t_2)}\left((\mathrm{frec}[u_+]-\mathrm{frec}[u_-])^2+(\mathrm{fres}[u_+]-\mathrm{fres}[u_-])^2\right). \end{aligned} \tag{3.14}$$

We raken de exponent kwijt, aangezien deze alleen een complexe fase bevat.

De Fresnelintegralen kunnen we samenvoegen door de definitie uit (a.1). Door de overgang van min naar plus voor de tweede term klappen de grenzen om:

$$\begin{aligned} \mathrm{frec}[u_+]-\mathrm{frec}[u_-] &= \int_0^{u_+}\cos\left[\frac{\pi}{2}p^2\right]\,\mathrm{d}p+\int_{u_-}^{0}\cos\left[\frac{\pi}{2}p^2\right]\,\mathrm{d}p \\ &= \int_{u_-}^{u_+}\cos\left[\frac{\pi}{2}p^2\right]\,\mathrm{d}p. \end{aligned} \tag{3.15}$$

Wanneer we dit kwadrateren ontstaat een dubbele integraal

$$(\mathrm{frec}[u_+]-\mathrm{frec}[u_-])^2 = \int_{u_-}^{u_+}\int_{u_-}^{u_+}\cos\left[\frac{\pi}{2}p^2\right]\cos\left[\frac{\pi}{2}q^2\right]\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q. \tag{3.16}$$

De stappen in (3.15) en (3.16) kunnen we herhalen voor de sinus:

$$(\mathrm{fres}[u_+]-\mathrm{fres}[u_-])^2 = \int_{u_-}^{u_+}\int_{u_-}^{u_+}\sin\left[\frac{\pi}{2}p^2\right]\sin\left[\frac{\pi}{2}q^2\right]\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q. \tag{3.17}$$

Beide integralen gaan over dezelfde variabelen. Wanneer we we ze optellen kunnen we met behulp van goniometrische identiteiten de uitdrukking verder vereenvoudigen:

$$\begin{aligned} &\int_{u_-}^{u_+}\int_{u_-}^{u_+}\left(\cos\left[\frac{\pi}{2}p^2\right]\cos\left[\frac{\pi}{2}q^2\right]+\sin\left[\frac{\pi}{2}p^2\right]\sin\left[\frac{\pi}{2}q^2\right]\right)\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q \\ &= \int_{u_-}^{u_+}\int_{u_-}^{u_+}\cos\left[\frac{\pi}{2}(p^2-q^2)\right]\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q \\ &= \int_{u_-}^{u_+}\int_{u_-}^{u_+}\cos\left[\frac{\pi}{2}(p-q)(p+q)\right]\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q. \end{aligned} \tag{3.18}$$

De waarschijnlijkheidsdichtheid wordt dan

$$p(r) = \frac{1}{16}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^3\frac{1}{t_1t_2(t_1+t_2)}\int_{u_-}^{u_+}\int_{u_-}^{u_+}\cos\left[\frac{\pi}{2}(p-q)(p+q)\right]\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q. \tag{3.19}$$

3.4 Einde van het einde

We hebben nu een dichtheid, maar we willen de kans zelf weten. Hiervoor moeten we alle mogelijke posities van de detector meenemen. Dat wil zeggen: we moeten integreren over r:

$$
\begin{aligned}
P &= 2\int_0^\infty p(r)\,\mathrm{d}r \\
&= \frac{1}{8}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^3 \frac{1}{t_1 t_2(t_1+t_2)} \int_0^\infty \int_{u_-}^{u_+} \int_{u_-}^{u_+} \cos\left[\frac{\pi}{2}(p-q)(p+q)\right] \mathrm{d}p\,\mathrm{d}q\,\mathrm{d}r
\end{aligned} \tag{3.20}
$$

De detector stond op afstand r van de y-as. De oplettende lezer merkt op dat we, door r als integratievariabele te nemen, ook de positie van de bron verplaatsen. Dit levert ons echter geen problemen op. We hadden de bron immers ook op een (andere) positie kunnen vastzetten, en de variabele r kunnen hernoemen zodat we alleen de detector verplaatsen. Dit levert echter dezelfde berekening op, maar met extra variabelen om het klassieke pad bij te houden.

Als we (3.20) goed bestuderen zien we een uitdaging. De integratievariabele r komt alleen voor in de *grenzen*! Laten we hiervoor $u_\pm$ uit (3.9) nog eens bekijken:

$$
\begin{aligned}
u_\pm &= \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{(\pm l + r)t_1 + (\pm l - r)t_2}{\sqrt{t_1 t_2(t_1+t_2)}} \\
&= \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{(\pm l + r)t_1 + (\pm l - r)t_2}{t_1\sqrt{t_2(1+t_2/t_1)}} \\
&= \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{\pm l + r + (\pm l/t_1 - r/t_1)t_2}{\sqrt{t_2(1+t_2/t_1)}}
\end{aligned} \tag{3.21}
$$

We hebben de vergelijking zo aangepast dat de term r/t_1 te voorschijn komt. Bekijk nog eens het klassieke pad in figuur 3.1. Tijdens het eerste traject legt het deeltje een horizontale afstand af van r in tijd t_1. De x-component van de snelheid is klassiek gezien dus

$$
v = \frac{r}{t_1} \tag{3.22}
$$

Dat betekend dat de term r/t_1 de klassieke, horizontale snelheid representeert waarmee het deeltje van de bron naar de detector beweegt. Deze vullen we in, in de grenzen

$$
\begin{aligned}
u_\pm &= \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{\pm l + r + (\pm l/t_1 - v)t_2}{\sqrt{t_2(1+t_2/t_1)}} \\
&= \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{r - vt_2 \pm l(1+t_2/t_1)}{\sqrt{t_2(1+t_2/t_1)}} \\
&= \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{r - vt_2 \pm l(1+t_2/t_1)}{\sqrt{t_2(1+t_2/t_1)}}
\end{aligned}
$$

De term $r - vt_2$ is de afgelegde afstand ten opzichte van het gemiddelde. En, zoals we hebben gezien in §2.3, representeert de term $l(1 + t_2/t_1)$ de spreiding ten opzichte van het gemiddelde. We voeren twee nieuwe variabelen in om deze twee delen te representeren:

$$
r' := \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{r - vt_2}{\sqrt{t_2(1+t_2/t_1)}} \qquad l' := \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}} \frac{l(1+t_2/t_1)}{\sqrt{t_2(1+t_2/t_1)}}. \tag{3.23}
$$

Hiermee kunnen we de grenzen herschrijven naar

$$
u_\pm = r' \pm l'. \tag{3.24}
$$

Terug naar de waarschijnlijkheid. We vullen onze aangepaste grenzen in en stappen over van r op r' met de substitutie

$$dr \to \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m}}\sqrt{t_2(1+t_2/t_2)}\,dr'. \tag{3.25}$$

Zodat

$$\begin{aligned}P &= \frac{1}{8}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^3 \frac{1}{t_1t_2(t_1+t_2)}\cdot 2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m}}\sqrt{t_2(1+t_2/t_2)}\\ &\quad\cdot\int_0^\infty\int_{r'-l'}^{r'+l'}\int_{r'-l'}^{r'+l'}\cos\left[\frac{\pi}{2}(p-q)(p+q)\right]\,dp\,dq\,dr'\\ &= \frac{1}{4}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{5/2}\frac{1}{t_1\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}}\int_0^\infty\int_{r'-l'}^{r'+l'}\int_{r'-l'}^{r'+l'}\cos\left[\frac{\pi}{2}(p-q)(p+q)\right]\,dp\,dq\,dr' \end{aligned}\tag{3.26}$$

Heeft dit ons geholpen? Wel als we nog een substitutie toepassen, we transleren over r':

$$\begin{aligned} & p' := p - r' & & q' := q - r' \\ \Rightarrow\quad & dp \to dp' & \Rightarrow\quad & dq \to dq' \\ \Rightarrow\quad & \pm l \to \pm l' & \Rightarrow\quad & \pm l \to \pm l' \end{aligned}$$

Onze integraal wordt dan

$$P = \frac{1}{4}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{5/2}\frac{1}{t_1\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}}\int_0^\infty\int_{-l'}^{l'}\int_{-l'}^{l'}\cos\left[\frac{\pi}{2}(p'-q')(p'+q'+2r')\right]\,dp'\,dq'\,dr' \tag{3.27}$$

Nu kunnen we de integraal over r' over de andere integralen trekken. Hiervoor moeten we de cosinus integreren over r'. Dit doen we door te realiseren dat dit het reële deel is van een complexe integraal:

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty\cos\left[\frac{\pi}{2}(p'-q')(p'+q'+2r')\right]\,dr'\\ &= \Re\left(\int_0^\infty\exp\left[i\frac{\pi}{2}(p'-q')(p'+q'+2r')\right]\,dr'\right)\\ &= \Re\left(\exp\left[i\frac{\pi}{2}(p'-q')(p'+q')\right]\int_0^\infty\exp\left[i\frac{\pi}{2}(p'-q')2r'\right]\,dr'\right)\\ &= \Re\left(\exp\left[i\frac{\pi}{2}(p'-q')(p'+q')\right]\pi\delta\left(\pi(p'-q')\right)\right)\\ &= \pi\cos\left[\frac{\pi}{2}(p'-q')(p'+q')\right]\delta\left(\pi(p'-q')\right).\end{aligned}\tag{3.28}$$

Wanneer we dit invullen in (3.27) krijgen we

$$P = \pi\frac{1}{4}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{5/2}\frac{1}{t_1\sqrt{t_1t_2(t_1+t_2)}}\int_{-l'}^{l'}\int_{-l'}^{l'}\cos\left[\frac{\pi}{2}(p'-q')(p'+q')\right]\delta\left(\pi(p'-q')\right)\,dp'\,dq'. \tag{3.29}$$

We maken nog een laatste substitutie om er voor te zorgen dat we de deltafunctie kunnen uitintegreren:

$$\begin{aligned} & p'' := \frac{p'}{\pi} & & q'' := \frac{q'}{\pi} \\ \Rightarrow\quad & dp' \to \frac{1}{\pi}\,dp'' & \Rightarrow\quad & dq' \to \frac{1}{\pi}\,dq'' \\ \Rightarrow\quad & \pm l' \to \pm l'\pi & \Rightarrow\quad & \pm l' \to \pm l'\pi \end{aligned}$$

Zodat

$$P = \pi \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{4} \left(\frac{m}{\pi\hbar} \right)^{5/2} \frac{1}{t_1 \sqrt{t_1 t_2 (t_1 + t_2)}} \int_{-l'\pi}^{l'\pi} \int_{-l'\pi}^{l'\pi} \cos \left[\frac{1}{2} (p'' - q'')(p'' + q'') \right] \delta \left((p'' - q'') \right) \, \mathrm{d}p'' \, \mathrm{d}q''$$

Met de eigenschappen van de deltafunctie, zoals beschreven in §a.2, krijgen we na lang werken een antwoord voor onze waarschijnlijkheid:

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{4} \left(\frac{m}{\pi\hbar} \right)^{5/2} \frac{1}{t_1 \sqrt{t_1 t_2 (t_1 + t_2)}} \int_{-l'\pi}^{l'\pi} \cos [0] \, \mathrm{d}q'' \\ &= \frac{1}{4\pi} \left(\frac{m}{\pi\hbar} \right)^{5/2} \frac{1}{t_1 \sqrt{t_1 t_2 (t_1 + t_2)}}. \end{aligned} \tag{3.30}$$

Conclusie *Todo*

A Gebruikte standaardfuncties

A.1 Fresnelintegralen

Bij de berekeningen in hoofdstuk hoofdstuk 3 maken we gebruik van *Fesnelintegralen*. Dit zijn de functies fres[z] en frec[z]. Ze zijn gedefinieerd als een integraal over respectievelijk de sinus en de cosinus van $\frac{\pi}{2}t^2$. De integratiegrenzen lopen van nul tot aan het argument z.

$$\operatorname{fres}[z] := \int_0^z \sin\left[\frac{\pi}{2}t^2\right] \mathrm{d}t \qquad \operatorname{frec}[z] := \int_0^z \cos\left[\frac{\pi}{2}t^2\right] \mathrm{d}t. \tag{A.1}$$

Door hun definitie als integraal, erven ze ook de eigenschappen hiervan. Zo kunnen we een min-teken uit het argument trekken.

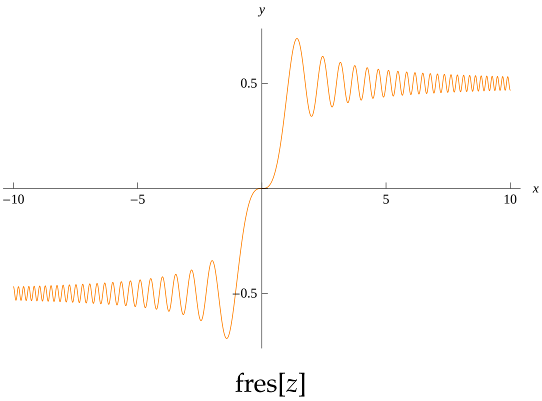
$$\operatorname{fres}[-z] = -\operatorname{fres}[z] \qquad \operatorname{frec}[-z] = -\operatorname{frec}[z] \tag{A.2}$$

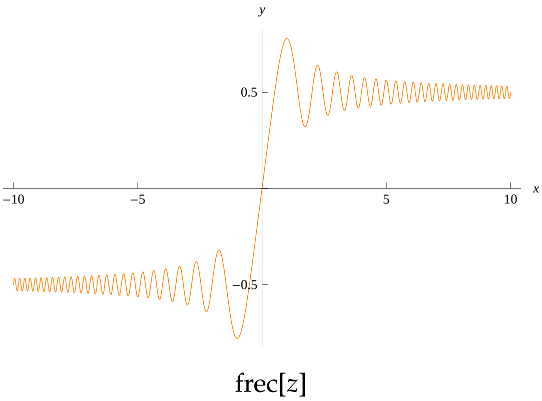
Als argument kunnen we ook een complex getal opgeven. In het geval dat het argument volledig imaginair is, kunnen we de complexe eenheid i uit het argument trekken. In het geval van de sinus levert ons dat een *extra min* op.

$$\operatorname{fres}[iz] = -i\operatorname{fres}[z] \qquad \operatorname{frec}[iz] = i\operatorname{frec}[z] \tag{A.3}$$

Verder kunnen we in figuur a.1 zien dat beide functies in het oneindige convergeren naar een half.

$$\operatorname{fres}[\infty] = \frac{1}{2} \qquad \operatorname{frec}[\infty] = \frac{1}{2}\operatorname{frec}[z] \tag{A.4}$$





Figuur A.1 Fresnelintegralen, links de sinus, rechts de cosinus.

Fresnelintegralen kunnen we gebruiken bij het integreren van niet triviale exponenten. Zo komen we in §3.2 een kwadratische functie tegen in een exponent. Deze Gaussische functie is op te lossen met de identiteit

$$\int \exp[\alpha z^2 + \beta z + \gamma]\,\mathrm{d}z = \frac{1-i}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\exp\left[\gamma - \frac{\beta^2}{4\alpha}\right] \cdot \left(\operatorname{frec}\left[\frac{1+i}{2}\frac{\beta + 2\alpha z}{\sqrt{\pi\alpha}}\right] - i\operatorname{fres}\left[\frac{1+i}{2}\frac{\beta + 2\alpha z}{\sqrt{\pi\alpha}}\right]\right). \tag{A.5}$$

Wanneer we bovenstaande willen uitrekenen met grenzen $\pm\infty$ wordt de integraal gegeven door

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[\alpha z^2 + \beta z + \gamma]\,\mathrm{d}z = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\alpha}}\exp\left[\gamma - \frac{\beta^2}{4\alpha}\right]. \tag{A.6}$$

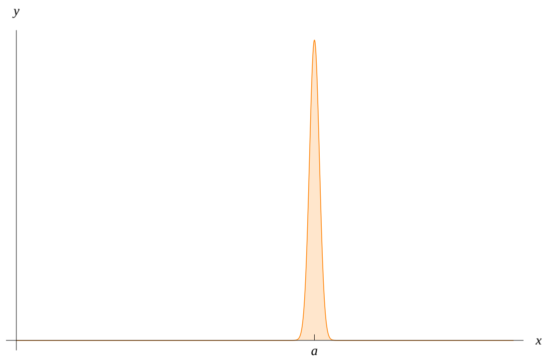
A.2 Dirac deltafunctie

De *een-dimensionale Dirac deltafunctie* $\delta(x)$ is een oneindig hoge, oneindig dunne piek met oppervlakte één. We definiëren hem stuksgewijs.

$$\delta(x) := \begin{cases} \infty & \text{als } x = 0 \\ 0 & \text{als } x \neq 0 \end{cases} \tag{A.7}$$

Met extra kanttekening dat wanneer we over de deltafunctie integreren, er één uit moet komen.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1 \tag{A.8}$$



FIGUUR A.2 Dirac deltadistributie

Het product van een nette functie $f(x)$ en de deltafunctie $\delta(x)$ levert overal nul op, *behalve* op $x = 0$. We *selecteren* als het ware de waarde van $f(x)$ op $x = 0$. Met behulp van bovenstaande definitie geldt

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)\,\mathrm{d}x = f(0)\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = f(0).$$

Hierbij hoeven de grenzen niet van $-\infty$ tot $+\infty$ te lopen. Een klein gebeid rond $x = 0$ is al voldoende. Bovenstaande kunnen we generaliseren tot

$$\delta(x-a) := \begin{cases} \infty & \text{als } x = a \\ 0 & \text{als } x \neq a \end{cases} \qquad \text{waarbij} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)\,\mathrm{d}x = 1 \tag{A.9}$$

Er zijn verschillende integralen die een Dirac deltafunctie opleveren. Een waarvan wij gebruik maken is

$$\int_0^\infty \exp[ixz]\,\mathrm{d}z = \pi\delta(x). \tag{A.10}$$

B Mathematicacode

```
(* ::Title:: *)
(*Reflecties*)

(* ::Section:: *)
(*Invoer*)

(* ::Subsection:: *)
(*Variabelen*)

detectorDistance = 10
plateDistance = 5
plateLength = 14
numberOfPaths = 15
time = 93459

(* ::Subsection:: *)
(*Constanten*)

ElectronMass = 9.10938 10^-31;
hBar = 1.05457 10^-34;
mass = ElectronMass

(* ::Section:: *)
(*Berekening*)

(* ::Subsection:: *)
(*Positie van bron en detector*)

sourcePosition = {-(detectorDistance/2), plateDistance}
detectorPosition = { + (detectorDistance/2), plateDistance}

(* ::Subsection:: *)
(*Maat*)

measure = 1

(* ::Subsection:: *)
(*Reflectiepunten*)
```

```
pointDistance = plateLength/numberOfPaths
reflectionPoints = Table[{-(plateLength/2) + n* pointDistance, 0}, {n, 0, numberOfPaths}];

(* ::Subsection:: *)
(*Paden*)

paths = {sourcePosition, #, detectorPosition}& /@ reflectionPoints;
pathLengths = EuclideanDistance[sourcePosition, #]  +  EuclideanDistance[#, detectorPosition]& /@ reflectionPoints;

(* ::Subsection:: *)
(*Actie*)

velocities = pathLengths/time;
actions = 1/2*mass*velocities^2*time;
phases = actions/hBar;

(* ::Subsection:: *)
(*Fasoren*)

phasors = measure*Exp[I*phases];
phasorSums = FoldList[Plus, 0, phasors];
phasorPoints = {Re[#], Im[#]}& /@ phasorSums;
result = Last[phasorSums]
resultPoints = {{0, 0}, {Re[result], Im[result]}};

(* ::Section:: *)
(*Uitvoer*)

ListLinePlot[paths]
ListPlot[actions]
ListLinePlot[{phasorPoints, resultPoints},
  PlotStyle -> {RGBColor[0.996, 0.800, 0.620], Directive[Orange, Thick]},
  PlotMarkers -> {Automatic, Tiny},
  AxesLabel -> {Re, Im},
  Ticks -> None]

Abs[result]
Arg[result]
```

Literatuur

[1] W. J. Beenakker Dictaat bij het college Analytische Mechanica. (2007).
[2] H. Goldstein, C. Poole, and J. L. Safko, *Classical mechanics*. (2002).
[3] J. R. Taylor, *Classical mechanics*. (2005).
[4] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*. (McGraw-Hill, New York, NY, 1965).
[5] R. D. Klauber Path Integrals in Quantum Theories: A Pedagogic First Step. (2010).
[6]