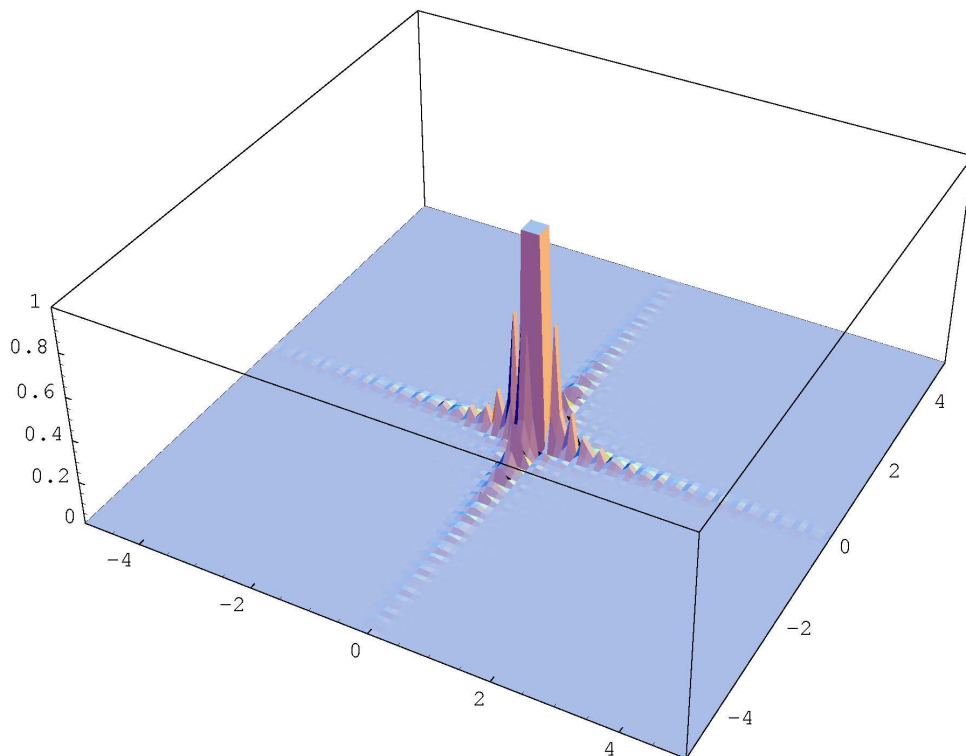


TIEN THEOREMA'S OVER QUANTUMMECHANISCHE MEETPROCESSEN



AUTEURS

Wout Hammerstein
Peter Hofman
Fleur Zeldenrust

BEGELEIDERS

Prof. dr ir F.A. Bais
bais@science.uva.nl
Drs G.G.A. Bäuerle
bauerle@science.uva.nl

INSTITUUT VOOR THEORETISCHE FYSICA
FACULTEIT DER NATUURWETENSCHAPPEN, WISKUNDE & INFORMATICA
UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

TIEN THEOREMA'S OVER QUANTUMMECHANISCHE MEETPROCESSEN

Project Natuurkunde II

Een quantummechanisch meetapparaat bestaat uit een macroscopisch systeem in een metastabiele toestand. Een macroscopisch systeem kan zich klassiek gedragen ondanks dat het beschreven wordt door de wetten van de quantummechanica. Bij een plaatsmeting aan een elektron volgt het ineenstorten van de golffunctie uit de beschrijving van het meetapparaat en elektron samen. De entropie van het totale systeem is altijd nul, maar de entropie van de deelsystemen neemt met dezelfde hoeveelheid toe.

Amsterdam, 12 juni 2002

AUTEURS

Wout Hammerstein
Peter Hofman
Fleur Zeldenrust

BEGELEIDERS

Prof. dr ir F.A. Bais
bais@science.uva.nl
Drs G.G.A. Bäuerle
bauerle@science.uva.nl

INSTITUUT VOOR THEORETISCHE FYSICA
FACULTEIT DER NATUURWETENSCHAPPEN, WISKUNDE & INFORMATICA
UNIVERSITEIT VAN AMSTERDAM

Inhoudsopgave

Inleiding	iii
1 Het meetproces volgens Van Kampen	1
1.1 Meting aan macroscopische systemen	1
1.1.1 Een schatting van $\frac{\Delta E}{\delta E}$	2
1.1.2 Decoherentie	3
1.2 Meting aan microscopische systemen	4
2 Een meetproces in detail	5
2.1 De fysische achtergrond	5
2.2 De Hilbertruimte	5
2.3 De Hamiltoniaan	6
2.4 De Schrödinger-vergelijking	7
2.4.1 Het ongestoorde systeem	7
2.4.2 Eerste-orde storingsrekening	7
2.4.3 Tweede-orde storingsrekening	8
3 Entropie en metingen	13
3.1 Waarschijnlijkheid en dichtheidsmatrices	13
3.1.1 Dichtheidsoperator	14
3.2 Klassieke en quantummechanische entropie	15
3.3 Entropieproductie ten gevolge van een meetproces	15
A Grafische weergave van (2.7)	19
Conclusie	21
Bibliografie	23

Inleiding

Al decennia lang bestaat er een levendige, soms filosofisch getinte discussie over het quantummechanische meetproces. In de quantummechanica is het duidelijk dat klassieke absolute scheiding tussen objecten en subjecten, tussen waarnemer en hetgeen waargenomen wordt, niet langer houdbaar is. Steeds terugkerende en tot de verbeelding sprekende onderwerpen zijn het ineenstorten van de golffunctie bij een meting, de mogelijke beïnvloeding van het meetproces door het bewustzijn van een waarnemer en de vraag of het meetproces verantwoordelijk is voor de toename van de entropie van het heelal.

De meest geaccepteerde oplossing voor het ineenstorten van de golffunctie is het toevoegen van een **reductiepostulaat** aan de quantummechanica, zoals Dirac en Von Neumann dat hebben gedaan. Van Kampen beweert echter dat dit postulaat onjuist en bovendien overbodig is: de Schrödingervergelijking voor het samengestelde systeem meetobject-meetapparaat zorgt voor het instorten van de golffunctie van het meetobject. *The collapse of the wave function of the object system is a consequence of the Schrödinger equation for the total system (i.e., object system and measuring apparatus together).*[1]

Von Neumann en anderen geloven dat de golffunctie pas instort als zij door een waarnemer bekeken wordt. Het bewustzijn zou dus de collapse veroorzaken. Van Kampen is het hier ten zeerste mee oneens. Hij suggereert dat een deel van de verwarring wordt veroorzaakt door een verkeerde interpretatie van de dichtheidsoperator. Uit de theorie is bekend dat deze afhankelijk is van de kennis die men over een quantummechanisch systeem heeft. Sommigen zien de dichtheidsmatrix als een getrouwe representatie van een quantumtoestand en concluderen dan dat de toestand van een systeem afhankelijk is van de bewustzijnstoestand van de waarnemer.

Volgens Van Kampen is de dichtheidsmatrix een klassieke kansverdeling over quantumtoestanden: *Density matrices are classical probability distributions over quantum mechanical states; they therefore depend on available knowledge.*[1] Dus is het niet raar dat deze afhankelijk is van de kennis van een waarnemer (vgl. dobbelsteen). Sommigen vatten deze echter op als een exacte beschrijving en komen daardoor tot de incorrecte conclusie dat de quantumtoestand van het systeem verandert op het moment van waarneming.

Met behulp van deze interpretatie van de dichtheidsmatrix laat Van Kampen zien dat de entropie van het gecombineerde systeem (object plus meetapparaat) niet toeneemt tijdens het meetproces. *The total system is described throughout by the wave vector Ψ and has therefore zero entropy at all times.*[1] Echter de entropieën van de deelsystemen, het object van meting en het meetapparaat afzonderlijk, nemen wel toe. Deze toenames zijn gelijk aan elkaar. *The measurement operation increases the entropies of the object system and of the apparatus by*

equal amounts.^[1]

Van Kampen's beschrijving van het meetproces wijkt op belangrijke punten af van de bestaande paradigma's. Hij beweert stellig dat hij slechts het meetproces als elk ander fysisch proces bestudeerd heeft en dat zijn stellingen fysisch van aard zijn: *interpretationes non fingo*, en dus falsifieerbaar: *what I say is true or false*. In dit artikel zullen we dit meetproces nader onderzoeken en controleren of Van Kampen's stellingen bij dit proces inderdaad opgaan. Hij beschrijft een model voor een meetapparaat en -proces en stelt dat bovenstaande theorema's in dit model te bewijzen zijn. Dit zullen we nagaan.

Hoofdstuk 1

Het meetproces volgens Van Kampen

In dit hoofdstuk zullen we macroscopische systemen bekijken. Macroscopische systemen gedragen zich klassiek, hoewel ze toch voldoen aan de wetten van de quantummechanica. We zullen hier duidelijk maken wat dit betekent. Het zal blijken dat aangezien een systeem binnen de meetnauwkeurigheid zeer veel eigentoe-standen heeft, er sprake is van decoherentie waardoor het systeem klassiek gedrag vertoont.

1.1 Meting aan macroscopische systemen

We zullen in deze sectie aantonen dat een meting van de toestand van een macroscopisch systeem, zoals het aflezen van de wijzerstand van een voltmeter, deze toestand in het algemeen niet beïnvloedt.

Macroscopische systemen zijn systemen die bestaan uit een groot aantal deeltjes, in de orde van het getal van Avogadro. Zulke systemen hebben zeer veel vrijheidsgraden. Hierdoor liggen de energie-eigenwaarden zeer dicht op elkaar. Het energieverschil δE tussen de eigentoe-standen is veel en veel kleiner dan de meet-precisie ΔE van het beste meetapparaat dat er is. Hierdoor kan zo'n systeem nooit in één specifieke eigentoe-stand van de Hamiltoniaan gebracht worden. De golf-functie is een superpositie van de $M(= \frac{\Delta E}{\delta E})$ eigentoe-standen waarvan de eigen-waarden binnen het interval $(E, E + \Delta E)$ vallen: $\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N) = \sum_{n=1}^M c_n \varphi_n(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$ met φ_n een energie-eigenfunctie met een energie-eigenwaarde in $(E, E + \Delta E)$. Deze golf-functie beschrijft de individuele deeltjes en hun bewegingen. Dit is de microtoestand van het systeem. De ex-perimentator kan de complexe coëfficiënten c_n in het algemeen niet afzonderlijk bepalen of beïnvloeden. De microtoestand van een macroscopisch systeem is zo-doende niet experimenteel vast te stellen, noch is het mogelijk zo'n systeem in een bepaalde microtoestand te brengen. Het enige dat we kunnen bereiken is dat de golf-functie van het macroscopische systeem in een deelruimte van de Hilbertruimte van het systeem ligt. Deze deelruimte is de macrotoestand van het systeem. Zoals we in de volgende paragraaf zullen laten zien, ligt het aantal dimensies M van zo'n deelruimte in de orde van 10^{50} .

Als nu een waarnemer de toestand van dit systeem wil aflezen, bijvoorbeeld door er licht op te laten schijnen, zullen de fotonen weliswaar de microtoestand van het systeem beïnvloeden, maar de macrotoestand zal niet veranderen. De toe-standsvector zal slechts wat heen en weer bewegen binnen de deelruimte, maar de

componenten hierbuiten blijven verwaarloosbaar. Daarom worden macroscopische observaties niet beïnvloed door observatie.

1.1.1 Een schatting van $\frac{\Delta E}{\delta E}$

Om een kwantitatief idee te krijgen van het aantal dimensies van een macroscopisch systeem maken we nu een schatting van M , de dimensie van de Hilbertruimte horende bij de toestand van een macroscopisch systeem. We beschouwen daartoe een eenvoudig systeem bestaande uit een zeer groot aantal vrije elektronen in een doos, een rechthoekige driedimensionale oneindige potentiaalput met inhoud $l_x l_y l_z$. De eigentoestanden voor één deeltje zijn de oplossingen van de tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking voor één deeltje:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \sqrt{\frac{8}{l_x l_y l_z}} \sin \frac{n_x \pi x}{l_x} \sin \frac{n_y \pi y}{l_y} \sin \frac{n_z \pi z}{l_z},$$

waarin n_x , n_y en n_z elementen zijn van $\{1, 2, \dots\}$. De bijbehorende energie-eigenwaarden zijn $E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{\pi n_x}{l_x} \right)^2 + \left(\frac{\pi n_y}{l_y} \right)^2 + \left(\frac{\pi n_z}{l_z} \right)^2 \right) = \frac{(\hbar \mathbf{k})^2}{2m}$, waar bij $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ de golfvector is met $k_x = \frac{n_x \pi}{l_x}$, $k_y = \frac{n_y \pi}{l_y}$ en $k_z = \frac{n_z \pi}{l_z}$. Beschouw nu de impulsruimte, met op de assen k_x , k_y en k_z en vlakken op $k_x = \frac{\pi}{l_x}, \frac{2\pi}{l_x}, \dots$, $k_y = \dots$, enz. Dan stelt elk roosterpunt een eigentoestand voor. Elk blok in dit raster heeft een volume van $\frac{\pi^3}{l_x l_y l_z} = \frac{\pi^3}{V}$ in de impulsruimte.

Het aantal elektrontoestanden M tussen k en $k + \Delta k$ ($k = |\mathbf{k}|$) wordt gegeven door het eerste octant van een schil van de Fermi-bol:

$$\begin{aligned} M(\mathbf{k}, \Delta k) &= \frac{2 [V]_{\text{k-space}}}{[\text{eenheidsvolume}]_{\text{k-space}}} \\ &= \frac{2 \frac{1}{8} (4\pi k^2) \Delta k}{\pi^3 / V} \\ &= \frac{V}{\pi^2} k^2 \Delta k. \end{aligned}$$

De factor 2 volgt uit het feit dat er voor elke \mathbf{k} een elektrontoestand met spin-up en één met spin-down is. In dit geval zijn we geïnteresseerd in het aantal elektrontoestanden als functie van E en ΔE . Aangezien $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ en $\Delta k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (\sqrt{E + \Delta E} - \sqrt{E})$ geldt $M(E, \Delta E) = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{V}{\pi^2} \left(\sqrt{1 + \frac{\Delta E}{E}} - 1 \right)$. Aangezien $\Delta E \ll E$ volgt $\sqrt{1 + \frac{\Delta E}{E}} \approx 1 + \frac{1}{2} \frac{\Delta E}{E}$. Dus

$$M(E, \Delta E) = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{V}{\pi^2} \Delta E \sqrt{E}. \quad (1.1)$$

We kunnen bijvoorbeeld de vrije elektronen in een blokje koper met een volume van 1 cm^3 bekijken. De dichtheid van koper is 8.96 gram/cm^3 en een soortelijk

gewicht van 63.5 gram/mol. Dan bevinden er zich $8.4 \cdot 10^{22}$ atomen in het blokje. We nemen aan dat elk atoom één vrij elektron heeft. Als we verder aannemen dat $E = \frac{3}{2} N k_B T$, $T = 300 K$ en $\Delta E = 10^{-6} J$, dan is het aantal elektrontoestanden gelijk aan:

$$M = 1.1 \cdot 10^{48}. \quad (1.2)$$

1.1.2 Decoherentie

Decoherentie is het verschijnsel dat verklaart waarom macroscopische systemen zich klassiek kunnen gedragen.[3] Van Kampen heeft veel werk verricht op dit gebied [2] en concludeert: *The wave function of a system of a macroscopic number of particles gives, on measuring macroscopic quantities, results that can be described in terms of classical probabilities.*[1] We zullen dit toelichten aan de hand van een vereenvoudigd model van een macroscopisch systeem met twee macrotoestanden A en B , men moge denken aan de beruchte Schrödinger kat, waarvan de energieën E_A en E_B met een precisie ΔE bepaald zijn, zoals boven beschreven. We nemen aan dat het energieverschil ΔU tussen de toestanden A en B veel groter is dan ΔE .

De Hilbertruimte voor zo'n systeem is te schrijven als het tensorproduct van drie deelruimtes. De eerste deelruimte, \mathcal{H}_M , beschrijft de macrotoestand, en is in dit eenvoudige voorbeeld twee-dimensionaal, met energie-eigenvectoren $|A\rangle$ en $|B\rangle$, en energieën E_A en E_B . De andere twee deelruimtes, \mathcal{H}_A en \mathcal{H}_B , zijn de Hilbertruimtes met dimensie ($\mathcal{O}(10^{50})$) behorend bij de vrijheidsgraden die een macroscopisch systeem binnen een macrotoestand heeft, zoals in het voorgaande is uitgelegd. De eigenvectoren van de energie-operator in deze deelruimte zijn $|\alpha_i\rangle$ en $|\beta_j\rangle$, de bijbehorende energie-eigenwaarden ε_i en ε_j zijn klein; kleiner dan ΔE . De golffunctie voor zo'n systeem is

$$|\Phi(t)\rangle = \left(a(t)|A\rangle + b(t)|B\rangle \right) \otimes \left(\sum_i c_i(t)|\alpha_i\rangle + \sum_j d_j(t)|\beta_j\rangle \right).$$

De coëfficiënten $c_i(t)$ en $d_j(t)$ zijn alleen ongelijk aan nul als de energie van het systeem in de buurt van E_A respectievelijk E_B ligt. De golffunctie is dus te schrijven als

$$|\Phi(t)\rangle = a(t) \sum_i c_i(t) |A\rangle \otimes |\alpha_i\rangle + b(t) \sum_j d_j(t) |B\rangle \otimes |\beta_j\rangle.$$

De verwachtingswaarde $\langle G \rangle$ voor een observabele G welke alleen op de deelruimtes \mathcal{H}_A en \mathcal{H}_B werkt, en dus commuteert met $|A\rangle$ en $|B\rangle$, is

$$\begin{aligned} \langle \Phi | G | \Phi \rangle &= |a|^2 \sum_i |c_i|^2 \langle \alpha_i | G | \alpha_i \rangle + |b|^2 \sum_j |d_j|^2 \langle \beta_j | G | \beta_j \rangle + \\ &ab^* \sum_{i,j} c_i d_j^* \langle \beta_j | G | \alpha_i \rangle + a^* b \sum_{i,j} c_i^* d_j \langle \alpha_i | G | \beta_j \rangle. \end{aligned}$$

De produkten $c_i d_j^*$ en $c_i^* d_j$ zijn altijd nul omdat men nooit zowel binnen een afstand ΔE in de buurt van E_A als van E_B kan zitten. Dit betekent dat de kruistermen in de verwachtingswaarde $\langle G \rangle$ nul worden:

$$\langle \Phi | G | \Phi \rangle = |a|^2 \sum_i |c_i|^2 \langle \alpha_i | G | \alpha_i \rangle + |b|^2 \sum_j |d_j|^2 \langle \beta_j | G | \beta_j \rangle,$$

en dus zijn de uitkomsten van een meting van de toestand van een macroscopisch systeem te beschrijven in termen van klassieke waarschijnlijkheden.

1.2 Meting aan microscopische systemen

Een meetapparaat is een macroscopisch systeem. Een typische eigenschap van macroscopische systemen is het bestaan van thermodynamische evenwichtstoestanden, macrotoestanden waar het systeem zich, wanneer het niet wordt beïnvloed van buitenaf, naartoe zal bewegen. Als het meetobject een microscopisch deeltje is, bijvoorbeeld een elektron, zal dit in het algemeen weinig meetbare invloed hebben op een macroscopisch systeem in een stabiele toestand. Sommige macroscopische systemen hebben echter metastabiele toestanden, bijvoorbeeld een oververzadigde damp, een lawine die op scherp staat of een gespannen muizenval. Dit zijn macrotoestanden waarin het systeem lange tijd kan blijven, voordat het systeem overgaat in de stabiele evenwichtstoestand. Vaak kan een kleine storing, zoals een onvoorzichtige toerist, het geknabbel van een muis of zelfs een enkel elektron, de activeringsenergie leveren om deze overgang te bewerkstelligen.

Het verschil in vrije energie tussen de metastabiele en de stabiele toestand kan gebruikt worden om het (zeer kleine) effect van een enkel elementair deeltje zodanig te versterken dat de meting macroscopisch waarneembaar is. Dit is de manier waarop quantummechanische meetapparaten, zoals de Geiger-teller, de Wilson-kamer en de zilverbromide-kristallen van een fotografische plaat werken. *A quantum mechanical measuring apparatus consists of a macroscopic system prepared in a metastable state.*[1]

Hoofdstuk 2

Een meetproces in detail

In dit hoofdstuk zullen we een plaatsmeting van een elektron in detail bekijken en zien hoe de ineenstorting van de golffunctie ontstaat. We zullen een model van een meetapparaat beschrijven, dat bestaat uit een waterstofatoom in een aangeslagen (metastabiele) toestand. De overgang naar de grondtoestand is verboden, tenzij er een elektron in de buurt is, dat door zijn Coulombkracht deze overgang wel mogelijk maakt. Bij deze overgang stoot het atoom een foton uit, dat gedetecteerd kan worden. Het apparaat is macroscopisch, aangezien het elektromagnetische veld zeer veel vrijheidsgraden heeft.

2.1 De fysische achtergrond

We bekijken een elektron en een waterstofatoom in de $2S$ -toestand in het elektromagnetische veld. De $2S$ -toestand van een waterstofatoom is metastabiel. De overgang naar de $1S$ -toestand, de stabiele grondtoestand, is namelijk een verboden overgang. Echter, op het moment dat het elektron in een zekere omgeving U van het atoom komt, zullen de Coulombkrachten tussen het vrije elektron en het elektron van het atoom een rol gaan spelen. Deze krachten vervormen de golffunctie van het gebonden elektron zodanig, dat het atoom zich niet meer in de $2S$ -toestand, maar in de $2P$ -toestand zal bevinden. Vanuit deze toestand is er wel verval naar de grondtoestand mogelijk, waarbij het atoom een foton zal uitzenden. Dit foton kan gedetecteerd worden, bijvoorbeeld op een fotografische plaat. Waar het echter om gaat, is dat op het moment dat het foton is uitgezonden, de aanwezigheid van het elektron in een zeker gebied U permanent is vastgelegd. We zullen zien dat dit ook het moment is van de ineenstorting van de golffunctie. In onze beschouwing zullen we de polarisatierichting van het foton negeren.

2.2 De Hilbertruimte

De Hilbertruimte van dit systeem is het tensorproduct van drie Hilbertruimtes, die van het atoom, \mathcal{H}_a , het elektromagnetische veld, \mathcal{H}_γ , en het waar te nemen elektron, \mathcal{H}_e :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_\gamma \otimes \mathcal{H}_e.$$

Van het waterstofatoom bekijken we vijf toestanden: de $1S$ -, $2S$ - en de drie $2P$ -toestanden. Deze zullen we weergeven door middel van ketvectoren: $|1S\rangle$, $|2S\rangle$ en $|2P_n\rangle$. Van het elektromagnetische veld bekijken we de toestand zonder foton en de toestanden waarbij er één foton \mathbf{k} met energie k is; deze representeren we door

$|0\rangle$ en $|\mathbf{k}\rangle$. De toestanden van het elektron zijn door wisselwerking, gekoppeld aan de toestanden van het atoom. De toestand van het langskomende elektron, wiens aanwezigheid we door een meting willen vastleggen, met het atoom in de $|2S\rangle$ -toestand noemen we $|\varphi(t)\rangle$. De toestand van het elektron met het atoom in de $|2P_n\rangle$ -toestand noemen we $|\chi_n(t)\rangle$ en de toestand van het elektron waarbij het atoom in de $|1S\rangle$ -toestand is en er een foton \mathbf{k} is uitgezonden, noemen we $|\psi_k(t)\rangle$. De golf functie van het totale systeem ziet er als volgt uit:

$$|\Psi(t)\rangle = |2S\rangle|0\rangle|\varphi(t)\rangle + \sum_{n=1}^3 |2P_n\rangle|0\rangle|\chi_n(t)\rangle + \sum_k |1S\rangle|\mathbf{k}\rangle|\psi_k(t)\rangle.$$

2.3 De Hamiltoniaan

We gaan dit probleem oplossen met behulp van storingsrekening. We splitsen de Hamiltoniaan in twee delen: een tijdsafhankelijk deel H_0 dat het ongestoorde systeem beschrijft waarvan we de eigentoestanden en eigenwaarden bekend veronderstellen, en een in verhouding klein (eventueel tijdsafhankelijk) deel H' dat de interactie tussen de onderdelen beschrijft. We voeren een storingsparameter λ in:

$$H = H_0 + \lambda H'.$$

De Hamiltoniaan voor het vrije systeem is de som van de Hamiltoniaan voor een vrij elektron H_e , een vrij atoom H_a en een vrij elektromagnetisch veld H_γ :

$$H_0 = H_e + H_a + H_\gamma = \frac{p_e^2}{2m} + H_a + H_\gamma.$$

De eigenvectoren van H_a zijn $|1S\rangle, |2S\rangle$ en $|2P_i\rangle$. De energie van de grondtoestand van het atoom kiezen we gelijk aan nul. De $|2P_i\rangle$ en de $|2S\rangle$ toestand hebben dezelfde energie, die we zullen aanduiden met E_+ . De eigenvectoren van H_γ zijn $|0\rangle$ en $|\mathbf{k}\rangle$, met eigenwaarden 0 en $k = |\mathbf{k}|$. (We nemen eenheden zodat $\hbar = m_e = 1$.)

Er zijn twee soorten wisselwerking, de wisselwerking van het elektron met het atoom, een Coulombwisselwerking dus, en de wisselwerking van het atoom met het elektromagnetische veld. Deze eerste ziet er als volgt uit. In de oorsprong zit een positief geladen kern, een proton. De positievector van het elektron van dit atoom geven we aan met \mathbf{r}_2 . Het langsvliegende elektron heeft positievector \mathbf{r} . Dit geeft de volgende potentiële energie voor dit elektron

$$V = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \cong -\frac{e^2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}|^3}.$$

(De laatste uitdrukking is verkregen door middel van een Taylorbenadering.) Dit kan ook geschreven worden met behulp van de dipoolmomentoperator $\mathbf{d}_2 = -e\mathbf{r}_2$, namelijk

$$V = \frac{e\mathbf{r} \cdot \mathbf{d}_2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}|^3}.$$

De Hamiltoniaan van een geladen deeltje in het elektromagnetische veld is gelijk aan:

$$H_{EMW} = \frac{(\mathbf{p}_2 - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m} = \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{e}{c} \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_2}{m} + \frac{e^2}{c^2} \frac{\mathbf{A}^2}{2m},$$

met \mathbf{A} de vectorpotentiaal. De eerste term van deze Hamiltoniaan is onderdeel van H_a in H_0 . De laatste term is zeer klein en dus te verwaarlozen. De storings-Hamiltoniaan H' is de potentiaal voor de Coulombkrachten en de Hamiltoniaan voor een geladen deeltje in het elektromagnetische veld samen:

$$H' = \frac{e\mathbf{r} \cdot \mathbf{d}_2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}|^3} + \frac{e}{c} \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_2}{m} = \alpha \mathbf{r} \cdot \mathbf{d}_2 + \beta \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{A}.$$

2.4 De Schrödinger-vergelijking

2.4.1 Het ongestoorde systeem

De Schrödinger-vergelijking voor het ongestoorde systeem is

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_0 \Psi.$$

Dit kan geschreven worden als een stelsel van ongekoppelde vergelijkingen voor $\varphi(\mathbf{r}, t)$, $\chi_n(\mathbf{r}, t)$ en $\psi_k(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} i\dot{\varphi} &= (E_+ - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}}^2)\varphi \\ i\dot{\chi}_n &= (E_+ - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}}^2)\chi_n \\ i\dot{\psi}_k &= (k - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}}^2)\psi_k. \end{aligned}$$

2.4.2 Eerste-orde storingsrekening

We laten zien dat er in de eerste orde geen overgangen mogelijk zijn tussen de $|2S\rangle|0\rangle|\varphi(t)\rangle$ - en de $|1S\rangle|\mathbf{k}\rangle|\psi_k(t)\rangle$ -toestand. De tussenliggende toestanden $|2P_i\rangle|0\rangle|\chi_n(t)\rangle$ zijn niet interessant voor deze discussie. Schiff [5] laat zien dat deze vectoren als superpositie van energie-eigenvectoren $|e_i\rangle$ met eigenwaarden E_i geschreven kunnen worden. Verder maakt hij een tweede orde expansie in λ van deze coëfficiënten: $a_i = a_i^{(0)} + \lambda a_i^{(1)} + \lambda^2 a_i^{(2)} + \mathcal{O}(\lambda^3)$, met $a_i^{(0)}$ een constante. De eerste-orde storingscoëfficiënten worden gegeven door

$$\dot{a}_p^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n H'_{pn} a_n^{(0)} e^{i\omega_{pn}t}.$$

Hierin zijn a_p en a_n beide gelijk aan respectievelijk $\varphi(t)$, $\chi_n(t)$ en $\psi_k(t)$. De termen H'_{pn} zijn de matricelementen van de interactie-Hamiltoniaan. De termen

ω_{pn} zijn gelijk aan $\frac{E_p - E_n}{\hbar}$, de zogenaamde Bohr-hoekfrequenties. We sommeren over alle mogelijke eigentoestanden n van H_0 .

Het matrixelement voor de overgang van de $|2S\rangle|0\rangle|\varphi(t)\rangle$ -toestand naar de $|1S\rangle|\mathbf{k}\rangle|\psi_k(t)\rangle$ -toestand is gelijk aan

$$\alpha\langle\psi_k|\mathbf{r}|\varphi\rangle\langle 1S|\mathbf{d}_2|2S\rangle + \beta\langle\mathbf{k}|\mathbf{A}|0\rangle\langle 1S|\mathbf{p}_2|2S\rangle = 0.$$

Immers wegens bolsymmetrie gaan alle termen waar een operator die op het atoom werkt in zit, naar 0. Dit zijn immers even functies, maar de operatoren \mathbf{d}_2 en \mathbf{p}_2 maken van deze functies oneven functies. Aangezien het inproduct van een even met een oneven functie 0 is, zullen al deze termen dus verdwijnen. In laagste orde vindt er dus geen overgang plaats, maar de overgang kan nu wel plaatsvinden. In tweede orde levert het gecombineerde effect van eerste orde en tweede orde een bijdrage, zodat het atoom kan vervallen naar zijn grondtoestand.

2.4.3 Tweede-orde storingsrekening

We zullen nu aantonen dat er in tweede orde wel een overgang mogelijk is van de $|2S\rangle|0\rangle|\varphi(t)\rangle$ -toestand naar de $|1S\rangle|\mathbf{k}\rangle|\psi_k(t)\rangle$ -toestand.

Voor de tweede-orde storingscoëfficiënten geldt [5]

$$\dot{a}_p^{(2)} = \frac{i}{\hbar^2} \sum_n \frac{H'_{pn} H'_{nm} a_m^{(0)}}{\omega_{nm}} (e^{i\omega_{pmt}} - e^{i\omega_{pnt}}). \quad (2.1)$$

De toestand m correspondeert, op een normalisatiefactor na, met de toestand $|2S\rangle|0\rangle|\varphi(t)\rangle$, de toestanden n met de toestanden $|2P_n\rangle|0\rangle|\chi_n(t)\rangle$ en de toestand p met de $|1S\rangle|\mathbf{k}\rangle|\psi_k(t)\rangle$ -toestand. De matrixelementen H'_{pn} en H'_{nm} zijn respectievelijk

$$\alpha\langle\chi_n|\mathbf{r}|\varphi\rangle\langle 2P_n|\mathbf{d}_2|2S\rangle$$

en

$$\alpha\langle\psi_k|\mathbf{r}|\chi_n\rangle\langle 1S|\mathbf{d}_2|2P_n\rangle + \beta\langle\mathbf{k}|\mathbf{A}|0\rangle\langle 1S|\mathbf{p}_2|2P_n\rangle.$$

Als we dit invullen in (2.1), dan volgt de vergelijking voor het tweede-orde deel van $|\psi_k\rangle$. Bij kleine energiever schillen tussen de toestanden valt de complexe e-macht weg en met $\hbar = 1$ volgt dus

$$|\dot{\psi}_k^{(2)}\rangle = i \sum_{n=1}^3 \left(\alpha^2 \langle\chi_n|\mathbf{r}|\varphi\rangle\langle 2P_n|\mathbf{d}_2|2S\rangle\langle\psi_k|\mathbf{r}|\chi_n\rangle\langle 1S|\mathbf{d}_2|2P_n\rangle + \alpha\beta\langle\chi_n|\mathbf{r}|\varphi\rangle\langle 2P_n|\mathbf{d}_2|2S\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{A}|0\rangle\langle 1S|\mathbf{p}_2|2P_n\rangle \right) |\varphi\rangle.$$

De Schrödinger-vergelijking voor de $|\psi_k\rangle$ -component van de golffunctie is:

$$i|\dot{\psi}_k\rangle = (k - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}}^2)|\psi_k\rangle + i \sum_{n=1}^3 \alpha\beta\langle\chi_n|\mathbf{r}|\varphi\rangle\langle 2P_n|\mathbf{d}_2|2S\rangle\langle 1S|\mathbf{p}_2|2P_n\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{A}|0\rangle|\varphi\rangle.$$

We vatten dit kort samen als

$$i\dot{\psi}_k = \left(k - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}}^2\right)\psi_k + iu(\mathbf{r})v_k\varphi. \quad (2.2)$$

Op analoge wijze kunnen de $|\varphi\rangle$ -componenten bepaald worden. Deze zijn

$$i\dot{\varphi} = \left(\Omega - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}}^2\right)\varphi - iu(\mathbf{r})\sum_k v_k\psi_k.$$

Neem $u(\mathbf{r})v_k\varphi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)$, dan gaat (2.2) over in

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + ik - \frac{i}{2}\nabla_r^2\right)\psi_k(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t). \quad (2.3)$$

Stel nu dat we een functie $G(\mathbf{r}_0, t_0; \mathbf{r}, t) = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0)$ kunnen vinden die deze vergelijking kan oplossen met een delta-bron in plaats van ρ . Deze functie G heet een Greense-functie. Als er zo'n Greense-functie G is, dan gaat (2.3) over in

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + ik - \frac{i}{2}\nabla_r^2\right)G(\mathbf{r}_0, t_0; \mathbf{r}, t) = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\delta(t - t_0). \quad (2.4)$$

We kunnen dan ψ_k als integraal uitdrukken, namelijk

$$\psi_k(\mathbf{r}, t) = \int G(\mathbf{r}_0, t_0; \mathbf{r}, t)\rho(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r}_0dt_0. \quad (2.5)$$

We zijn geïnteresseerd in een getardeerde oplossing, dat wil zeggen een oplossing die voldoet aan de randvoorwaarde $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) = 0$ als $t < t_0$. Allereerst gaan we een oplossing bepalen voor (2.4). De Fourier-getransformeerde $g(\mathbf{p}, \omega)$ van $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0)$ wordt gegeven door

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} e^{-i\omega(t-t_0)} g(\mathbf{p}, \omega) d^3\mathbf{p}d\omega. \quad (2.6)$$

Als we dit invullen in (2.4), dan wordt het linkerlid gelijk aan

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial}{\partial t} + ik - \frac{i}{2}\nabla_r^2\right) \frac{1}{(2\pi)^4} \int e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} e^{-i\omega(t-t_0)} g(\mathbf{p}, \omega) d^3\mathbf{p}d\omega = \\ &\frac{1}{(2\pi)^4} \int \left(-i\omega + ik + \frac{ip^2}{2}\right) e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} e^{-i\omega(t-t_0)} g(\mathbf{p}, \omega) d^3\mathbf{p}d\omega. \end{aligned}$$

Het rechterlid van (2.4) wordt met $\delta(x) \equiv \int \frac{dw}{2\pi} e^{iwx}$ gegeven door

$$\frac{1}{(2\pi)^4} \int e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} e^{-i\omega(t-t_0)} d^3\mathbf{p}d\omega.$$

Uit gelijkstelling van het linker- en rechterlid volgt

$$g(\mathbf{p}, \omega) = \frac{i}{\omega - k - \frac{p^2}{2}}.$$

Als we dit invullen in (2.6), dan volgt

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} e^{-i\omega(t-t_0)}}{\omega - k - \frac{p^2}{2}} d^3\mathbf{p}d\omega.$$

Substitutie van $\nu = \omega - k$ geeft:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) = \frac{ie^{-ik(t-t_0)}}{(2\pi)^4} \int \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} e^{-i\nu(t-t_0)}}{\nu - \frac{p^2}{2}} d^3\mathbf{p}d\nu.$$

Om de singulariteit in de integrand weg te werken, voegen we er een infinitesimaal, imaginair deel $i\varepsilon$ toe en voeren we eerst de integratie over ν uit. Dat geeft

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) = ie^{-ik(t-t_0)} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{d\nu}{2\pi} \frac{e^{-i\nu(t-t_0)}}{\nu - \frac{p^2}{2} + i\varepsilon}.$$

Nu de singulariteit geen problemen meer geeft, dan gaat deze functie met $u = \nu - \frac{k^2}{2}$, over in

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) = e^{-ik(t-t_0)} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} e^{-i\frac{p^2}{2}(t-t_0)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int -\frac{du}{2\pi i} \frac{e^{-iu(t-t_0)}}{u + i\varepsilon}.$$

Uit

$$\theta(t) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\varepsilon} d\omega$$

volgt

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) = \theta(t - t_0) e^{-ik(t-t_0)} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} e^{-i\frac{p^2}{2}(t-t_0)}.$$

Om deze integraal uit te kunnen voeren, gaan we over op bolcoördinaten (k, φ, θ) . We kiezen de pool-as (z -as) langs \mathbf{r} . Dan is $\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} = pr \cos \theta$ en met

$$A := \theta(t - t_0) e^{-ik(t-t_0)}$$

krijgen we

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) &= \frac{A}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dp p^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta e^{ip|r-r_0|\cos\theta} \sin\theta e^{-i\frac{p^2}{2}(t-t_0)} \\ &= \frac{A}{(2\pi)^2 |r-r_0|} \int_{-\infty}^{\infty} p \sin(p|r-r_0|) e^{-i\frac{p^2}{2}(t-t_0)} dp. \end{aligned}$$

Uitvoeren van de integraal en terugtransformatie naar cartesische coördinaten levert in overeenstemming met [4]

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) = \theta(t - t_0) e^{-ik(t-t_0)} \frac{e^{-\frac{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^2}{2(t-t_0)}}}{(2\pi i(t-t_0))^{3/2}}.$$

Stel we nemen een kubusvormige bron in de ruimte, bijvoorbeeld $\theta(\frac{1}{2} - |x|)\theta(\frac{1}{2} - |y|)\theta(\frac{1}{2} - |z|)$ en een delta bron, $\delta(t)$, in de tijd. Dan krijgen we met (2.5) en benadering dat de afstand tot de bron veel groter is dan de grootte van de bron:

$$\psi_k \cong i \frac{t}{2\pi k^2} \frac{1}{xyz} e^{-i \frac{k(x+y+z)}{2t}} e^{-i \frac{x^2+y^2+z^2}{2t}} e^{-ikt} (-1 + e^{\frac{ikx}{t}}) (-1 + e^{\frac{iky}{t}}) (-1 + e^{\frac{ikz}{t}}).$$

Met

$$\sin \frac{kx}{2t} = -\frac{i}{2} e^{\frac{-ikx}{2t}} (-1 + e^{\frac{ikx}{t}})$$

wordt dit

$$\psi_k(x, y, z, t) \cong \left(\frac{2t}{\pi k^2}\right)^{3/2} \frac{1}{xyz} e^{-ikt} e^{-i \frac{x^2+y^2+z^2}{2t}} \sin \frac{kx}{2t} \sin \frac{ky}{2t} \sin \frac{kz}{2t}. \quad (2.7)$$

Deze golf functie heeft op $t = 0$ norm 0. Voor $t > 0$ wordt de norm instantaan gelijk aan één. Uit de genormeerdheid van de totale elektrontoestand volgt dat de norm van $|\phi\rangle$ naar nul gaat. De golf functie gaat dus instantaan over van $|\phi\rangle$ naar $|\psi_k\rangle$. Dit is het ineenstorten van de golf functie. Het is een gevolg van de Schrödinger-vergelijking er is dus geen reductiepostulaat nodig. Een grafische weergave van (2.7) is te zien in bijlage (A). Om te laten zien dat dit een irreversibel proces is, zullen we in het volgende hoofdstuk de entropie van het systeem tijdens de meting beschouwen.

Hoofdstuk 3

Entropie en metingen

3.1 Waarschijnlijkheid en dichtheidsmatrices

De quantummechanische waarschijnlijkheidsdichtheid behorend bij een golffunctie ψ is per definitie gelijk aan $|\psi|^2$. Quantummechanische waarschijnlijkheden zijn niet gedefiniëerd in termen van een onderliggende verzameling van mogelijke toestanden, zoals klassiek het geval is. Om een ensemble van quantumsystemen te beschrijven is er naast de quantummechanische waarschijnlijkheidsverdeling een klassieke verdeling nodig. Voor dit doel zal de dichtheidsmatrix gedefiniëerd worden. Dit stelt ons in staat om te laten zien hoe het quantummeetproces entropie produceert en dus irreversibel is.

Zuivere en gemengde toestanden. Beschouw een systeem S . Als het systeem S zich in een toestand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $|\psi\rangle \neq 0$ bevindt, dan noemen we deze toestand een *zuivere toestand*. Als daarentegen het systeem met kans $p_i (\geq 0)$ in toestand $|\psi_i\rangle$ (dus $\sum_i p_i = 1$), dan zeggen we dat het systeem in een *gemengde toestand* is. Merk op dat er niet wordt geëist dat de toestanden $|\psi_i\rangle$ orthonormaal zijn.

Om de dichtheidsmatrix in te voeren is eerst wat notatie van belang. We beginnen met een definitie. Gegeven $|\chi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}$. We definiëren de operator

$$|\varphi\rangle\langle\chi| : |\psi\rangle \in \mathcal{H} \mapsto |\varphi\rangle\langle\chi|\psi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (3.1)$$

Merk op dat bij $|\psi\rangle$ alleen hoort $|\psi\rangle\langle\psi|$. Omgekeerd geldt dat $|\psi\rangle\langle\psi|$ de zuivere toestand voorstelt, dus daarbij hoort $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, op een fasefactor na. De hierboven ingevoerde operator heeft de volgende eigenschap. Laat $|\varphi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$. Dan geldt

$$(|\varphi\rangle\langle\chi|)^\dagger = |\chi\rangle\langle\varphi|. \quad (3.2)$$

Inderdaad voor alle $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$ geldt

$$\begin{aligned} \langle\alpha| (|\varphi\rangle\langle\chi|)^\dagger |\beta\rangle &= \langle\beta| (|\varphi\rangle\langle\chi|) |\alpha\rangle^* = \langle\beta|\varphi\rangle^* \langle\chi|\alpha\rangle^* \\ &= \langle\varphi|\beta\rangle \langle\alpha|\chi\rangle = \langle\alpha| (|\chi\rangle\langle\varphi|) |\beta\rangle \end{aligned}$$

en hieruit volgt (3.2).

Laat $\mathbb{1}$ de éénheidsoperator op \mathcal{H} zijn en $|e_n\rangle$ een orthonormale basis van \mathcal{H} . Dan geldt

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = \mathbb{1}. \quad (3.3)$$

Een belangrijk gevolg van (3.3) is de spectraalvoorstelling van een hermitische operator A . We nemen gemakshalve aan dat het spectrum van A discreet en niet ontaard is. We noteren de eigenwaardevergelijking van A als $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ en

veronderstellen dat de eigenvectoren genormeerd zijn. Dan is $|a_i\rangle$ een orthonormale basis en er geldt dus $\mathbb{1} = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|$. Dit geeft met $A = A\mathbb{1}$ de spectraalvoorstelling

$$A = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|. \quad (3.4)$$

Voor een lineaire operator $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ is het spoor gedefiniëerd als

$$\text{Tr}(A) := \sum_n \langle e_n | A | e_n \rangle, \quad (3.5)$$

Met (3.3) en (3.5) is eenvoudig na te gaan dat voor alle vectoren $|\psi\rangle$ en $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ geldt

$$\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \langle\varphi|\psi\rangle. \quad (3.6)$$

Met de hierboven genoemde definities en eigenschappen voeren we nu de dichtheidsmatrix in.

3.1.1 Dichtheidsoperator

We beschouwen een gemengde toestand met toestandsvectoren $|\psi_i\rangle$ en bijbehorende kansen p_i . De gemiddelde waarde $\langle A \rangle$ van een observabele A is het ensemble gemiddelde van zijn quantummechanische verwachtingswaarden. Als we veronderstellen dat de $|\psi_i\rangle$'s genormeerd zijn, krijgen we dus

$$\langle A \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle. \quad (3.7)$$

Dit is met (3.3) te herschrijven als

$$\langle A \rangle = \sum_i \sum_n p_i \langle \psi_i | A | e_n \rangle \langle e_n | \psi_i \rangle = \sum_n \sum_i p_i \langle e_n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | A | e_n \rangle. \quad (3.8)$$

We definiëren nu de *dichtheidsoperator* of *dichtheidsmatrix* als

$$\rho := \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1). \quad (3.9)$$

Hiermee is (3.8) te schrijven als $\langle A \rangle = \sum_n \langle e_n | \rho A | e_n \rangle$, en met (3.5) wordt dit

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A). \quad (3.10)$$

We bespreken nu een aantal eigenschappen van de dichtheidsoperator. Met (3.2) en p_i reëel volgt uit (3.9) dat de dichtheidsoperator ρ hermitisch is, dat wil zeggen $\rho^\dagger = \rho$. Het spoor van de dichtheidsmatrix is gelijk aan één, want $\text{Tr}(\rho) = \sum_n \langle e_n | \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| e_n \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | (\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|) | \psi_i \rangle$. Met (3.3) en $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$ volgt nu $\text{Tr}(\rho) = \sum_i p_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle = \sum_i p_i = 1$.

Voor het spoor van ρ^2 geldt dat $0 < \text{Tr}(\rho^2) \leq 1$, omdat uit de definitie van de dichtheidsoperator (3.9) volgt $\text{Tr}(\rho^2) = \sum_n \langle e_n | (\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^2 | e_n \rangle$. Omdat

ρ hermitisch is, kunnen we ρ schrijven ten opzichte van een eigenbasis $\{|\chi_i\rangle\}$. Dan $\sum_n \langle e_n | \sum_i p_i^2 |\chi_i\rangle \langle \chi_i | e_n \rangle = \sum_i p_i^2 \langle \chi_i | (\sum_n |e_n\rangle \langle e_n|) |\chi_i\rangle = \sum_i p_i^2 \langle \chi_i | \chi_i \rangle = \sum_i p_i^2$. Dus $\text{Tr}(\rho^2) = \sum_i p_i^2$ omdat $\sum_i p_i^2 \leq \sum_i p_i = 1$ volgt $0 < \text{Tr}(\rho^2) \leq 1$.

Een zuivere toestand van een systeem is een toestand met alle p_i gelijk nul op één na, ofwel $p_j = 1$ en $p_i = 0$ voor alle $i \neq j$. De dichtheidsoperator van deze zuivere toestand is dus gelijk aan $|\psi_j\rangle \langle \psi_j|$. Als het systeem zich in een zuivere toestand bevindt, dan geldt $\rho^2 = \rho$. Immers $\rho^2 = |\psi_j\rangle \langle \psi_j | \psi_j \rangle \langle \psi_j| = |\psi_j\rangle \langle \psi_j| = \rho$. Omgekeerd geldt dat als $\rho^2 = \rho$, dat het systeem dan in een zuivere toestand is. Door de dichtheidsoperator in te voeren is er een klassieke waarschijnlijkheid in de beschrijving van het systeem gebracht. *Density matrices are classical probability distributions over quantum mechanical states; they therefore depend on the available knowledge.*[1]

3.2 Klassieke en quantummechanische entropie

Klassieke waarschijnlijkheidstheorie koppelt aan een waarschijnlijkheidsdistributie p_n het getal

$$S = - \sum_n p_n \log p_n \quad (3.11)$$

welke de *entropie* van de distributie wordt genoemd. In de quantummechanica is de entropie in de dichtheidsoperator uit te drukken, namelijk

$$S = -\text{Tr}(\rho \log \rho). \quad (3.12)$$

Omdat de dichtheidsoperator ρ hermitisch is, volgt dit met (3.4). Dus als de dichtheidsoperator van de vorm (3.9) is, dan zijn (3.12) en (3.11) gelijk. Als een systeem in een zuivere toestand is, dan wordt dit systeem volledig beschreven door een golfvector ψ . Uit (3.12) volgt dat de entropie dan gelijk aan nul is. Er is immers maar één p_k gelijk aan één en alle andere p_i zijn nul.

3.3 Entropieproductie ten gevolge van een meetproces

De toestandsvector $|\Psi(t)\rangle = |\varphi(t)\rangle |2S\rangle |0\rangle + \sum_k |\psi_k(t)\rangle |1S\rangle |k\rangle$ is een volledige representatie van het totale systeem van meetapparaat en meetobject dat door Van Kampen wordt beschreven. Dit is een zuivere toestand, daarom is de entropie van het totale systeem gelijk aan nul. *The total system is described throughout by the wave vector Ψ and has therefore zero entropy at all times.*

De entropie voor de meting. Voor de meting is de toestandsvector van het elektron $|\varphi\rangle$, een zuivere toestand. Dus de bijbehorende entropie is gelijk aan nul. De toestandsvector van het meetapparaat is voor de meting $|2S\rangle |0\rangle$. Dus hiervan is de entropie ook gelijk aan nul. Kortom de entropie van het totale systeem, het object en het meetapparaat zijn in dit geval dus alle gelijk aan nul.

De entropie na de meting. We zullen nu laten zien dat het elektron na de meting niet meer is te representeren door een enkele golffunctie. Beschouw voor

dit doel een operator A die alleen op het elektron werkt. Dan is de verwachtingswaarde van A in de toestand $|\Psi(t)\rangle$ gelijk aan

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle + \sum_k \langle \psi_k | A | \psi_k \rangle. \quad (3.13)$$

Immers

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \left\{ \langle \varphi | \langle 2S | \langle 0 | + \sum_k \langle \psi_k | \langle 1S | \langle \mathbf{k} | \right\} A \left\{ |\varphi\rangle |2S\rangle |0\rangle + \sum_k |\psi_k\rangle |1S\rangle | \mathbf{k} \rangle \right\}.$$

Uitwerken geeft

$$\begin{aligned} \langle \Psi | A | \Psi \rangle &= \langle \varphi | A | \varphi \rangle + \sum_k \langle \varphi | A | \psi_k \rangle \langle 2S | 1S \rangle \langle 0 | \mathbf{k} \rangle \\ &+ \sum_k \langle \psi_k | A | \varphi \rangle \langle 1S | 2S \rangle \langle \mathbf{k} | 0 \rangle \\ &+ \sum_{kk'} \langle \psi_k | A | \psi_{k'} \rangle \langle 1S | 1S \rangle \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle. \end{aligned}$$

Uit de normering van de atoomtoestanden en de orthonormaliteit van de fotontoestanden volgt

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle + \sum_{kk'} \langle \psi_k | A | \psi_{k'} \rangle \delta_{kk'}.$$

Dit geeft (3.13). Deze expressie kan niet worden geschreven als de verwachtingswaarde van A in een enkele golfvector in de elektronruimte, maar alleen in termen van een dichtheidsoperator in de elektronruimte. Schrijf deze dichtheidsoperator in de vorm

$$\rho_1 = |\varphi\rangle \langle \varphi| + \sum_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (3.14)$$

Hieruit volgt dat $\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \text{Tr } \rho_1 A$. Na een meting wordt de toestand van het object beschreven door de dichtheidsoperator ρ .

De entropie van het elektron na uitzending van een foton. Als er na de meting naar het foton gekeken wordt en er is een zekere foton \mathbf{k} gevonden, dan is de dichtheidsoperator van het elektron gelijk aan

$$\rho_k = P_k^{-1} |\psi_k\rangle \langle \psi_k|.$$

De meting bestaat echter uit het bepalen van de positie van het elektron. Dit wordt gedaan door te bepalen of er wel of geen foton is uitgezonden, ongeacht wat \mathbf{k} is. Als er een ongespecificeerd foton uitgezonden is, dan is met $\sum_k P_k = 1 - P_0$ de dichtheidsoperator van het elektron

$$\rho_2 = (1 - P_0)^{-1} \sum_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|.$$

De entropie die geassocieerd is met deze dichtheidsoperator luidt in termen van eigenwaarden μ_ν van ρ_2 . De entropie welke bij ρ_2 hoort, is dus te schrijven als

$$S = - \sum_{\nu} \mu_\nu \log \mu_\nu. \quad (3.15)$$

De vergelijking voor de eigenwaarden μ en de corresponderende eigenfuncties $|\xi\rangle$ is

$$\mu|\xi\rangle = \rho_2|\xi\rangle = (1 - P_0)^{-1} \sum_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|\xi\rangle. \quad (3.16)$$

Linksvermenigvuldigen met $\langle \psi_{k'}|$ levert

$$\mu \langle \psi_{k'}|\xi\rangle = (1 - P_0)^{-1} \sum_k \langle \psi_{k'}|\psi_k\rangle \langle \psi_k|\xi\rangle.$$

Met $\alpha_k = \langle \psi_k|\xi\rangle$ en

$$M_{k'k} = (1 - P_0)^{-1} \langle \psi_{k'}|\psi_k\rangle \quad (3.17)$$

gaat de eigenwaardevergelijking (3.16) over in de matrixvorm

$$\mu \alpha_{k'} = \sum_k M_{k'k} \alpha_k. \quad (3.18)$$

Dus de eigenwaarden van (3.15) zijn ook de eigenwaarden van $M_{k'k}$. Merk op dat dit argument niet geldt voor de eigenfuncties waarvoor α_k gelijk aan nul is, maar uit (3.16) volgt dat voor deze functies de bijbehorende eigenwaarde nul is en dus geen bijdrage leveren aan de entropie. Expressie (3.15) is dus equivalent met

$$S = -\text{Tr}(M \log M). \quad (3.19)$$

We zullen nu laten zien dat deze uitdrukking gelijk is aan de toename van de entropie van het meetapparaat.

De entropie van het meetapparaat na uitzending van een foton. Als er een foton is uitgezonden is, dan is de toestandsvector van het totale systeem gelijk aan

$$(1 - P_0)^{-1} \sum_k |1S\rangle |\mathbf{k}\rangle |\psi_k\rangle.$$

De met deze toestandsvector geassocieerde dichtheidsoperator is

$$\rho_s = (1 - P_0)^{-1} \left\{ \sum_k |1S\rangle |\mathbf{k}\rangle |\psi_k\rangle \right\} \left\{ \sum_{k'} \langle \psi_{k'}| \langle 1S| \langle \mathbf{k}'| \right\}.$$

Door nu het spoor over de elektrontoestanden te nemen, houden we de dichtheidsoperator voor het meetapparaat over:

$$\begin{aligned} \rho_m &= (1 - P_0)^{-1} \sum_{k,k'} |1S\rangle |\mathbf{k}\rangle \text{Tr}(|\psi_k\rangle \langle \psi_{k'}|) \langle 1S| \langle \mathbf{k}'| \\ &= (1 - P_0)^{-1} \sum_{kk'} |1S\rangle |\mathbf{k}\rangle \langle \psi_{k'}|\psi_k\rangle \langle 1S| \langle \mathbf{k}'| \\ &= \sum_{k,k'} \left\{ (1 - P_0)^{-1} \langle \psi_{k'}|\psi_k\rangle \right\} |1S\rangle |\mathbf{k}\rangle \langle 1S| \langle \mathbf{k}'|. \end{aligned}$$

Hieruit volgt met (3.17) dat

$$\rho_m = \sum_{kk'} M_{k'k} |1S\rangle |\mathbf{k}\rangle \langle 1S| \langle \mathbf{k}'|.$$

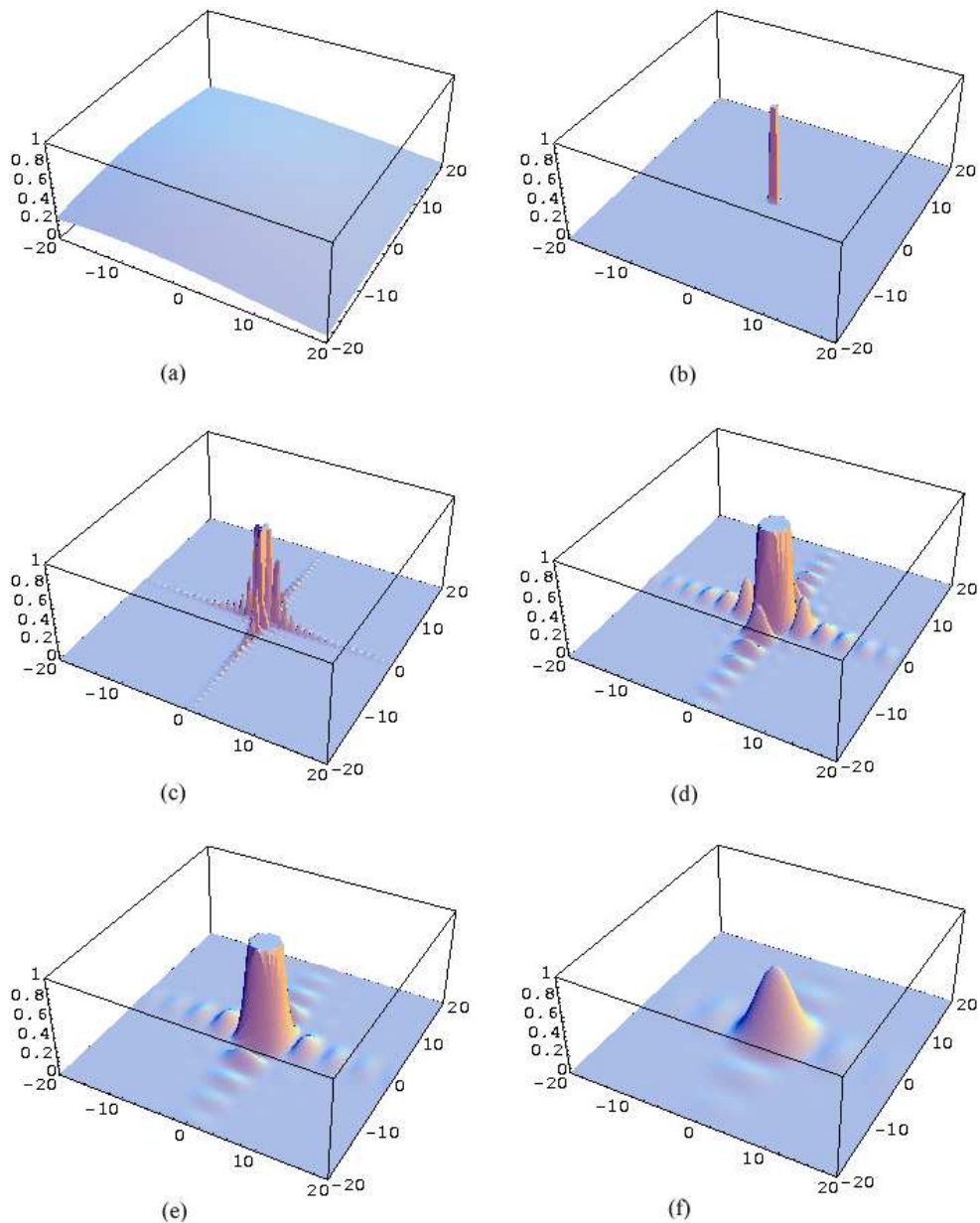
De vergelijking voor de eigenwaarden en de bijbehorende eigenfuncties van deze dichtheidsoperator is:

$$\rho_m |1S\rangle |\mathbf{k}''\rangle = \sum_{k,k'} M_{k'k} |1S\rangle |\mathbf{k}\rangle \langle 1S| 1S\rangle \langle \mathbf{k}'| \mathbf{k}''\rangle = \sum_k M_{k''k} |1S\rangle |\mathbf{k}\rangle,$$

waarbij met gebruik is gemaakt van de orthonormaliteit van de fotontoestanden en de normering van de $|1S\rangle$ toestand. Dus de eigenwaarden van de dichtheidsoperator van het meetapparaat zijn hetzelfde als de eigenwaarden van (3.17). Hieruit volgt dat de entropie van het meetapparaat gelijk is aan (3.19). Dus de entropie van het meetobject en meetapparaat zijn door de meting met dezelfde hoeveelheid toegenomen. Van Kampen vat dit samen in zijn laatste theorema. *The measurement operation increases the entropies of the object system and of the apparatus by equal amounts.*[1] Door deze entropietoename is de irreversibiliteit van het meetproces aangetoond.

Bijlage A

Grafische weergave van (2.7)



Figuur A.1: De originele golf functie op een bepaald tijdstip (a). Het ineenstorten van de golf functie ten gevolge van de meting (b). Het uitwaaiieren van de ineengestorte golf functie (c) tot (f).

Conclusie

We hebben in dit artikel het quantummechanische meetproces onderzocht. We vonden dat een meetapparaat een macroscopisch systeem in een metastabiele toestand is. Aangezien een macroscopisch systeem zich in zeer veel microtoestanden binnen de te meten macrotoestand kan bevinden, treedt er decoherentie op waardoor het systeem zich klassiek kan gedragen. Katten, mensen en andere macroscopische systemen bezitten geen kruistermen tussen klassieke toestanden, zoals leven en dood. Een meting beïnvloedt wel de microtoestand van het systeem, maar niet de macrotoestand. Bovendien is het onmogelijk de microtoestand van een macroscopisch systeem te bepalen.

Vervolgens bekeken we een meetproces in detail. We onderzochten een plaatsmeting van een elektron door middel van het verval van een waterstofatoom van de $2S$ - naar de $1S$ -toestand. We vonden dat het ineenstorten van de golffunctie volgt uit de Schrödinger-vergelijking van het meetapparaat en het elektron samen. De projectie van de totale golffunctie Ψ op de elektron-deelruimte leek op miraculeuse wijze over te gaan van φ naar ψ_k . Dit is de ineenstorting van de golffunctie.

Tot slot bekeken we de dichtheidsmatrix van het systeem. We concludeerden dat ondanks dat het totale systeem op elk tijdstip een entropie gelijk aan nul heeft, de meting de entropie van zowel het gemeten elektron als van het meetapparaat met dezelfde hoeveelheid laat toenemen. Dit komt voort uit de incomplete beschrijving van de toestanden na de meting, omdat het onmogelijk is de microtoestand van het elektromagnetische veld te bepalen. Hiermee is bewezen dat het meetproces irreversibel is. Dit is noodzakelijk, aangezien een meetproces dat niet irreversibel is nooit kennis zou kunnen opleveren die permanent vastgelegd kan worden.

We zijn in staat een gefundeerd antwoord te geven, zonder gefilosofeer, op basis van zuiver natuurkundige argumenten. In het door ons onderzocht meetproces volgt de ineenstorting van de golffunctie uit de beschrijving van het meetapparaat en het te meten object samen en hoeft dus niet als extra postulaat toegevoegd te worden aan de quantummechanica. Von Neumann heeft in dit geval ongelijk. Bovendien volgt hieruit dat het bewustzijn van een waarnemer het meetproces op geen enkele wijze beïnvloedt (tenzij natuurlijk dit bewustzijn de experimentator tot zekere daden aanzet). We kunnen nu ook inzien dat het meetproces niet verantwoordelijk is voor entropietoename in het heelal. Immers, de entropie van het totale systeem is altijd nul. Alleen de entropie van de deelsystemen neemt toe door een gebrek aan kennis.

In een mogelijk vervolgonderzoek zal de beschrijving van het meetproces verder uitgewerkt kunnen worden. In het bijzonder kan de φ -component uit paragraaf (2.4.3) worden bestudeerd om de collapse beter te beschrijven. De discussie over decoherentie is nog steeds actueel en verre van afgerond. Onderzoek kan gedaan worden naar de toepassing van decoherentie op macroscopische meetsystemen.

Bibliografie

- [1] van Kampen, N. G. [1988]. Ten Theorems about Quantum Mechanical Measurements, *Physica A* **153**, 97-113.
- [2] van Kampen, N. G. [1954]. Quantum Statistics of Irreversible processes, *Physica* **20**: 603-622.
- [3] Omnès, R. [1994]. *The Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, chap. 7.
- [4] Bjorken, J.D., & Drell, S.D. [1964]. *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, chap. 6.
- [5] Schiff, L.I. [1955]. *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, chap. 8.