

ENIGE VRAAGSTUKKEN
UIT DE GOLFMECHANIKA DER ELEKTRONEN



kast dissertaties

Enige Vraagstukken uit de Golfmechanika der Elektronen

PROEFSCHRIFT TER VERKRIJGING
VAN DEN GRAAD VAN DOCTOR IN
DE WIS- EN NATUURKUNDE AAN
DE RIJKSUNIVERSITEIT TE LEIDEN
OP GEZAG VAN DEN RECTOR-
MAGNIFICUS Dr. J. J. BLANKSMA,
HOOGLEERAAR IN DE FACULTEIT
DER WIS- EN NATUURKUNDE
VOOR DE FACULTEIT DER WIS- EN
NATUURKUNDE TE VERDEDIGEN
OP DINSDAG 1 DECEMBER 1931,
DES NAMIDDAGS TE 4 UUR,

DOOR

ROELF LUPPO KRANS

GEBOREN TE KAMPEN.



N.V. BOEK- EN STEENDRUKKERIJ EDUARD IJDO. — LEIDEN.

N.V. BOEK- EN STEENDRUKKERIJ EDUARD IJDO — LEIDEN



AAN DE NAGEDACHTENIS
VAN MIJN VADER
AAN MIJNE MOEDER

[Op verzoek van mijn promotor, Prof. Dr. P. Ehrenfest, komt in plaats van de gebruikelijke voorrede een korte levensschets.]

Ik, Roelf Luppo Krans, ben 7 December 1905 te Kampen geboren. Van 1911 tot 1917 bezocht ik aldaar de school voor kristelik M.U.L.O. (hoofd de heer H. J. Offers). In laatstgenoemd jaar kwam ik op het Gereformeerd Gymnasium in mijn geboorteplaats. In mijn gymnasiale tijd zijn van speciale betekenis voor mij geweest de persoon van de rektor Dr. J. J. Esser — vrijwel al zijn oud-leerlingen zullen hierin overeenstemmen — en het onderwijs in de natuurwetenschappelijke vakken van Dr. W. J. A. Schouten; dit heeft voor een groot deel de keuze van mijn studie bepaald.

15 Oktober 1919 overleed mijn Vader; het is mij later duidelijk geworden hoeveel ik daardoor verloren heb.

In 1923 ging ik in Amsterdam wis- en natuurkunde studeren. Hier volgde ik de kolleges en practica voor het kandidaatsexamen van wijlen Prof. Dr. R. Sissingh, van Prof. Dr. Hk. de Vries, Prof. G. Mannoury, Dr. E. H. Büchner, Prof. Dr. J. P. Wibaut en Prof. Dr. E. Dubois. 9 Junie 1926 legde ik het kandidaatsexamen af.

Behalve bovengenoemde kolleges bezocht ik een inleidend kollege in de filosofie van Prof. Dr. Tj. de Boer, een avondkollege van Prof. Dr. F. J. J. Buytendijk over natuurfilosofische onderwerpen, en een colloquium van Prof. Mannoury over formalisme en kennis-theorie. Vooral deze laatste heeft een blijvende invloed op mij uitgeoefend.

In Oktober 1926 ging ik naar Leiden om teoretiese natuurkunde te studeren. Hier volgde ik de kolleges van wijlen Prof. Dr. H. A. Lorentz, Prof. Dr. P. Ehrenfest, Prof. Dr. A. D. Fokker, Prof. Dr. J. C. Kluyver, Prof. Dr. W. van der Woude, Dr. J. Droste, Prof. Dr. J. A. Schouten, Prof. Dr.

W. H. Keesom, Prof. Dr. W. de Sitter, Dr. J. Woltjer, en tevens een kollege, dat door Prof. Dr. H. A. Kramers over kwantenmechanika te Leiden gegeven is. In Maart 1929 deed ik mijn doktoraal examen.

Mijn grootste voorrecht was echter om — tegelijk met H. B. J. Florin en J. Spier — door Prof. Ehrenfest in de atoomtheorie en de daarmee samenhangende problemen ingeleid te worden. Tevens bezocht ik het natuurkundig colloquium met zijn vaak boeiende discussies. In April 1928 werd ik, te zamen met A. J. Rutgers, assistent van Prof. Ehrenfest. Met grote dankbaarheid zie ik terug op al hetgeen ik van Prof. Ehrenfest geleerd heb, ook buiten het terrein van mijn eigenlijke studie.

Aan de gesprekken over natuurkundige onderwerpen met A. J. Rutgers en H. B. G. Casimir heb ik een aangename herinnering.

In het bijzonder wil ik hier nog vermelden Prof. Dr. A. Eekhof en Mevrouw G. Eekhof—Bos, te wier huize ik steeds zo gastvrij ontvangen werd.

Ook de afdelingen van de kalvinistische studentenvereniging S. S. R. te Amsterdam en te Leiden met hunne disputeren A. Π. Ε. Δ. Α. Σ. en T. Α. Ε. Ν. Ι. Α. zullen een plaats in mijn herinnering behouden.

Met ingang van 1 September van dit jaar werd ik benoemd tot leraar aan het Christelijk Lyceum te Arnhem.

Aan allen, die tot mijn geestelijke vorming hebben bijgedragen, betuig ik hierbij mijn hartelijke dank, voor allen aan mijn promotor, Prof. Dr. P. Ehrenfest.

In dit proefschrift zijn enige onderwerpen samengevat, waarover ik dit jaar te Leiden gewerkt heb.

Ik dank H. B. J. Florin zeer voor zijn hulp bij het nazien der drukproeven en voor de vriendschap, die ik steeds van hem ondervonden heb.

INHOUD.

Blz.

HOOFDSTUK I.

Inleiding	1
---------------------	---

HOOFDSTUK II.

Klassieke bewegingsvergelijkingen voor een elektrisch geladen deeltje	5
§ 1. Functie van Hamilton bij aanwezigheid van magneetvelden	5
§ 2. Relativistische uitdrukking voor de functies van Lagrange en van Hamilton.	8
§ 3. Elektrisch geladen deeltje in een homogeen magneetveld	10
§ 4. Berekening met behulp van een roterend coördinatenstelsel	11
§ 5. Magnetisch moment	14

HOOFDSTUK III.

Golfvergelijking voor een elektrisch geladen deeltje	15
§ 1. Niet-relativistische uitdrukking	15
§ 2. Relativistische golfvergelijking van Schroedinger-Gordon-Klein	20
§ 3. Vergelijking van Dirac	22

HOOFDSTUK IV.

De vergelijkingen van Dirac en de energie-impulstensor van materieveld en elektromagnetisch veld	26
§ 1. Afleiding der vergelijkingen van Dirac en der elektromagnetische vergelijkingen uit één variatieprincipe. Stroomuitdrukking	26
§ 2. Energie-impulstensor voor materie- en elektromagnetisch veld	29

HOOFDSTUK V.

Zwaartepuntsstelling	32
§ 1. Bewijs met behulp van Diracs vergelijking	32
§ 2. Bewijs met behulp van Schroedingers vergelijking	36
§ 3. Opmerking	38

HOOFDSTUK VI.

Transformatie van de elektromagnetische potentialen. IJk-invariantie	40
§ 1. IJkinvariantie	40
§ 2. Gevolgtrekkingen	42
§ 3. Voorbeeld	44

HOOFDSTUK VII.

Het „verkeerd” lopen der elektronen in een periodiek krachtveld onder invloed van een magneetveld	48
§ 1. Elektronen in een kristalrooster	48
§ 2. Kristalelektronen bij aanwezigheid van een homogeen uitwendig magnetisch veld. Afleiding der snelheidsuitdrukking	51
§ 3. Bewegingsvergelijking voor een kristalelektron in een magneetveld	54
§ 4. Opmerkingen	56

HOOFDSTUK VIII.

Diamagnetisme van vrije elektronen	60
§ 1. Magnetisch moment van een elektronengas	60
§ 2. Berekening van het moment in klassieke theorie en kwantentheorie	62
§ 3. Eenvoudig model	65
Aanhangsel	69

HOOFDSTUK I

INLEIDING

De moderne theoretische en experimentele natuurkunde hebben een grote verandering gebracht in onze voorstelling over de elementen, waartoe we de natuur analyses kunnen.

Zo worden b.v. de elementen der materie (elektronen, protonen) tans geheel anders beschouwd dan vroeger, toen men hen uitsluitend dacht als heel kleine deeltjes van een bepaald volume, waaraan men op ieder tijdstip een plaats en hoeveelheid van beweging toekeenden kan.

Het moderne onderzoek heeft nu geleerd: 1°. bij een elektron kan een golflengte optreden, hetgeen niet te verenigen is met bovengenoemde „deeltjesopvatting”; 2°. deze golflengte hangt nauw samen met de hoeveelheid van beweging van het elektron¹⁾.

Daar aan de andere kant de experimenten ten gunste van de deeltjesopvatting onverzwakt hun geldigheid handhaafden, kon men niet volstaan met een zich volkomen afwenden van de oorspronkelijke opvatting en een undulatietheorie voor de elektronen aanvaarden, ofschoon alle proeven, die in het begin der vorige eeuw de natuurkundigen van de golfnatuur van het licht overtuigden hadden, eveneens bij elektronen een soortgelijk resultaat opleverden. (Interferentie zowel bij licht, als ook bij katodestralen).

Het tegenwoordig meest gebruikte beeld voor het gedrag der elektronen, dat beide groepen van gegevens tot hun recht laat komen, is het „golfpakket”, dat ontstaan gedacht is als superpositie van samenstellende golven, welke laatste door „kwantengetallen” ge-

¹⁾ Voor een uitvoerige behandeling van alle kwesties, die hiermede samenhangen, zie W. Heisenberg, Die Physikalischen Prinzipien der Quantentheorie, Berlin 1930.

karacteriseerd zijn. Deze superpositie kan men zo nemen, dat de golven door interferentie elkaar binnen een klein gebied versterken en overal daarbuiten elkaar opheffen, zodat men zeggen kan: het golfpakket ligt binnen dat gebied. Op deze wijze gebruikt is het dus mogelijk de lokaliseerbaarheid van het elektron af te beelden. Aan de samenstelling van zo'n gelokaliseerd pakket moeten echter golven van verschillende golflengte meehelpen, zodat er geen bepaalde golflengte aan toe te schrijven is. Daar nu, gelijk reeds gezegd is, de golflengte nauw verbonden is met de hoeveelheid van beweging, mogen we aan een sterk gelokaliseerd pakket, m.a.w. aan een elektron, waaraan we een plaats kunnen toekennen, niet tegelijk een hoeveelheid van beweging toeschrijven.

Aan de andere kant kan men een golfpakket nemen, dat slechts uit één golf of uit meer golven, die bijna alle dezelfde golflengte hebben, opgebouwd is; dan kan men de hoeveelheid van beweging wel een bepaalde waarde geven. Opdat echter een golfbeweging sterk monochromaties zij, moet men een zeer lange golftrein hebben, m.a.w. dit pakket kan niet sterk gelokaliseerd zijn. Van de plaats van het elektron kan men dus niet spreken, nu de hoeveelheid van beweging goed bekend is.

Heisenberg heeft met behulp van de betrekking tussen golflengte en hoeveelheid van beweging afgeleid, dat er een verband bestaat tussen de onbepaaldheid in de plaats van het elektron (Δx) en de gelijktijdige onbepaaldheid van het moment (Δp) en wel:

$$(1) \quad \Delta p \cdot \Delta x \gtrsim h,$$

dus: het product van deze twee onbepaaldheden is op zijn minst van de orde van grootte van de konstante van Planck, bijna steeds is ze groter.

Matematies stellen we het golfpakket voor door een funktie van x, y, z en t , n.l. $\psi(x, y, z, t)$, welker verloop men in de golfmechanika nagaat. In de begintoestand is ψ bepaald door de opstelling van de instrumenten voor de waarneming. (Dirac gebruikt hiervoor de term: the method of preparation¹⁾). Onze waarneming kan er dan b.v. op gericht zijn om na te gaan, hoe

in dit gegeven golfpakket de amplitudes van de verschillende samenstellende golven zich verhouden, dus om iets over het moment van het elektron te weten te komen, of ook om het pakket sterker te lokaliseren, dus om onderzoeken over de plaats van het elektron te doen.

De golfmechanika geeft ons de mogelijkheid bij gegeven begin- ψ een verwachting voor het resultaat der proef uit te spreken.

Het doel van dit proefschrift is nu om op enige eenvoudige vraagstukken de golfmechanische behandelingswijze toe te passen, en op eventueel verband of onderscheid met de klassieke methode te wijzen. De spin van het elektron wordt hierbij buiten beschouwing gelaten.

In het tweede hoofdstuk zullen we eerst een rekapitulatie van de klassieke behandeling van de beweging van een elektrisch geladen deeltje geven.

In het derde hoofdstuk zijn met het oog op latere verwijzingen de belangrijkste formules van de golfmechanika herhaald, zowel de relativistische van Dirac als die van Schroedinger.

In het vierde hoofdstuk wordt een energie-impulstensor voor materieveld en elektromagnetisch veld tezamen afgeleid, behorende bij Diracs golfvergelijking. Toepassingen zijn hiervan nog niet te verwachten wegens het ontbreken van aanknopingspunten tussen kwantentheorie en algemene relativiteitstheorie¹⁾.

Het vijfde hoofdstuk geeft het bewijs voor de stelling: het zwaartepunt van het golfpakket beweegt zich in de loop van de tijd in de ruimte, zoals volgens de wetten der klassieke elektrodynamika een deeltje zich bewegen moet, dat onderworpen is aan een kracht gelijk aan het gemiddelde der krachten, genomen over het golfpakket. Prof. Ehrenfest heeft haar indertijd voor een elektrostatisch veld met behulp van Schroedingers vergelijking afgeleid; hier wordt zij bewezen voor de vergelijking van Dirac en voor algemenere elektromagnetische velden. Deze stelling legt een nauw verband tussen de klassieke mechanica en de golfmechanica; zij laat ons direkt zien hoe de golfmechanica in het

¹⁾ Verg. H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, 2e Aufl., Leipzig, 1931, S. 195.

¹⁾ P. A. M. Dirac, Quantum Mechanics, Oxford 1930, p. 7.

geval van sterk gekoncentreerde golfpakketten kan overgaan in de klassieke partikelmechanika.

Het zesde hoofdstuk bespreekt de transformatiemogelijkheid in de golfmechanika, die het gevolg is van het niet volkomen bepaald zijn der elektromagnetische potentialen.

Het zevende en achtste hoofdstuk behandelen twee toepassingen, waarvoor de golfmechanische behandeling van onze gewone voorstelling totaal afwijkende resultaten geeft.

N.B. Wanneer verwezen wordt naar een formule op een andere bladzijde, dan waarop de verwijzing geschiedt, wordt deze formule door twee cijfers, door een punt gescheiden, aangeduid; het eerste cijfer geeft de bladzijde aan, waarop de formule voorkomt, het tweede geeft het nummer, dat deze formule op die bladzijde draagt. Voorbeeld:

(14.7) wil zeggen: formule 7 op bladzijde 14.

HOOFDSTUK II

KLASSIEKE BEWEGINGSVERGELIJKINGEN VOOR EEN ELEKTRISCH GELADEN DEELTJE

§ 1. *Functie van Hamilton bij aanwezigheid van magneetvelden.*

Een gemeenschappelijk uitgangspunt voor de klassieke en kwantummechanische behandelingswijze van fysische problemen is de functie van Hamilton, d.i. de energie geschreven als functie van de coördinaten q_k en de momenten p_k , waarbij deze laatste gedefinieerd zijn door

$$(1) \quad p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}.$$

Hierin is L de functie van Lagrange. Indien alle krachten voor te stellen zijn als gradient van een potentiaal, die alleen een functie van de coördinaten is, is:

$$(2) \quad L = T - U,$$

d.i. het verschil van kinetische en potentiële energie.

Dan is:

$$(3) \quad p_k = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k}.$$

Gebruiken we kartesische coördinaten, zo is

$$(4) \quad T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2),$$

dus

$$(5) \quad p_x = m \dot{x}; \quad p_y = m \dot{y}; \quad p_z = m \dot{z}.$$

De bewegingsvergelijkingen laten zich met behulp van de functie

van Hamilton, die wij steeds door de letter K zullen voorstellen, schrijven:

$$(1) \quad q_k = \frac{\partial K(p, q)}{\partial \dot{p}}; \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial K(p, q)}{\partial q_k}.$$

In een algemeen elektrisch en magnetisch veld kunnen de componenten der magnetische krachten niet als de afgeleiden van een alleen van de coördinaten afhankende potentiaal geschreven worden.

Schwarzschild¹⁾ heeft nu een algemenere funktie van Lagrange ingevoerd, die in dit geval gebruikt kan worden, door n.l. aan (5.2) nog toe te voegen het verschil van magnetische en elektrische energie, welke zich in verschillende opzichten analoog t.o.v. elkaar gedragen als kinetische en potentiële energie.

Met behulp van de skalare potentiaal V en vektorpotentiaal A_x, A_y, A_z kunnen we zo als totale Lagrange-funktie voor een deeltje met een elektrische lading: e , opschrijven:

$$(2) \quad L = T - U + \frac{e}{c} (A_x \dot{x} + A_y \dot{y} + A_z \dot{z}) - eV.$$

Zonder schade voor de algemeenheid kunnen we de term $-eV$ in $-U$ opgenomen denken. We zullen ons trouwens alleen met elektrische en magnetische krachten bezig houden, waarbij we de potentiële energie van ons deeltje door U voorstellen.

Bij (8) behoort

$$(3) \quad p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + \frac{e}{c} A_x; \quad p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} + \frac{e}{c} A_y; \\ p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} + \frac{e}{c} A_z.$$

Men ziet dus, dat het eenvoudige verband, dat bij afwezigheid van een magnetisch veld (dus $A_x = 0, A_y = 0, A_z = 0$) tussen snelheid en moment bestaat, vgl. (5.5), verloren is gegaan.

De energie is

$$(4) \quad \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + U(x, y, z),$$

¹⁾ Gött. Nachrichten, Mathem.-Naturw. Klasse, 1903, S. 126, 245.

dus de funktie van Hamilton wordt:

$$(1) \quad K(x, y, z; p_x, p_y, p_z) = U(x, y, z) + \\ + \frac{1}{2} m \left[\left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \left(p_y - \frac{e}{c} A_y \right)^2 + \left(p_z - \frac{e}{c} A_z \right)^2 \right].$$

De bewegingsvergelijkingen (6.1) leveren:

$$(2) \quad \dot{x} = \frac{1}{m} \left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right),$$

in overeenstemming met (6.3), en

$$(3) \quad \dot{p}_x = -\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{e}{mc} \left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right) \frac{\partial A_x}{\partial x} + \\ + \frac{e}{mc} \left(p_y - \frac{e}{c} A_y \right) \frac{\partial A_y}{\partial x} + \frac{e}{mc} \left(p_z - \frac{e}{c} A_z \right) \frac{\partial A_z}{\partial x},$$

enz. voor p_y en p_z .

Uit (2) en (3) volgt voor $\ddot{x}$.

$$(4) \quad \ddot{x} = \frac{1}{m} \left(\dot{p}_x - \frac{e}{c} \dot{A}_x \right) = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{e}{mc} \sum_1^3 \left(\dot{x}_k \frac{\partial A_k}{\partial x} \right) - \\ - \frac{e}{mc} \left(\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \dot{z} \right) = -\frac{1}{m} \frac{\partial U}{\partial x} - \\ - \frac{e}{mc} \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{e}{mc} \left[\dot{y} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \dot{z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right].$$

Stelt U alleen de energie tengevolge van een elektrische potentiaal voor, dan kunnen we hiervoor schrijven:

$$(5) \quad \ddot{x} = \frac{e}{m} E_x + \frac{e}{mc} (\dot{y} H_z - \dot{z} H_y)$$

en eveneens voor de andere componenten:

$$\ddot{y} = \frac{e}{m} E_y + \frac{e}{mc} (\dot{z} H_x - \dot{x} H_z)$$

$$\ddot{z} = \frac{e}{m} E_z + \frac{e}{mc} (\dot{x} H_y - \dot{y} H_x),$$

waar E_x, E_y, E_z en H_x, H_y en H_z de componenten der elektrische, resp. magnetische veldsterkte voorstellen. Hiermede is dus de vergelijking van Lorentz voor de beweging van een geladen deeltje (elektron) in een elektromagnetisch veld verkregen. Zijn er behalve de elektrische nog andere konservatieve krachten werkzaam, splits dan $U = U' + eV$, waar V de elektrische potentiaal voorstelt, en voeg bij de drie vergelijkingen (7.5) resp.

$$-\frac{\partial U'}{\partial x}, \quad -\frac{\partial U'}{\partial y}, \quad -\frac{\partial U'}{\partial z}.$$

§ 2. Relativistische uitdrukking voor de funkties van Lagrange en van Hamilton.

In de relativistische mechanica heeft men voor een deeltje de betrekking:

$$(1) \quad \frac{W'^2}{c^2} - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = m^2 c^2,$$

waar resp.

$$(2) \quad W' = mc^2 + W, \quad p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}, \quad L = -mc^2 \sqrt{1 - \beta^2}$$

de (relativistische) energie, impuls en funktie van Lagrange zijn.

Voor een algemeen elektrisch en magnetisch veld kunnen we een analoge relatie vinden door een uitbreiding van (1), door een formele kunstgreep, die ons ook in de niet-relativistische mechanica aan de goede formules voor een elektromagnetisch veld geholpen zouden hebben, toe te passen: vervang in (1)

$$p_x \text{ door } p_x - \frac{e}{c} A_x,$$

evenzoo voor p_y en p_z , en verder W' door $W' - eV$.

Dit geeft ons:

$$(3) \quad \left(\frac{W'}{c} - \frac{eV}{c}\right)^2 - \left(p_x - \frac{e}{c} A_x\right)^2 - \left(p_y - \frac{e}{c} A_y\right)^2 - \left(p_z - \frac{e}{c} A_z\right)^2 = m^2 c^2.$$

De overgang van (8.3) naar de niet-relativistische vergelijking:

$$(1) \quad W = K(p, x),$$

waar $K(p, x)$ gegeven is door vgl. (7.1) gaat als volgt:

$$(2) \quad \frac{1}{c^2} (W'^2 - 2eV W' + e^2 V^2) = \sum_1^3 \left(p_k - \frac{e}{c} A_k\right)^2 + m^2 c^2.$$

Substitutie van (8.2) in (2) geeft:

$$(3) \quad 2m(W - eV) + \left(\frac{1}{c}\right)^2 (W^2 - 2WeV + e^2 V^2) = \sum_1^3 \left(p_k - \frac{e}{c} A_k\right)^2.$$

Laat nu in het linkerlid c oneindig worden, rechts gebeurt dit niet, omdat c daar ingevoerd is als de verhouding tussen elektrostatische en elektromagnetische eenheden. Dit geeft ons dan juist de vergelijking (1).

We kunnen uit (8.1), resp. (8.3) ook wel een vergelijking voor W' afleiden, die ons hetzelfde verschaft als (1), door n.l. de term

$$\frac{W'^2}{c^2}, \text{ resp. } \frac{(W' - eV)^2}{c^2}$$

aan de ene kant, de rest van de uitdrukking aan de andere kant van het gelijkteken te zetten en dan de wortel te nemen. Inderdaad gelden dan ook hier de kanonieke vergelijkingen (6.1)

$$(4) \quad \dot{x}_k = \frac{\partial K'}{\partial p_k}; \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial K'}{\partial x_k}$$

met

$$(5) \quad K' = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{m^2 c^2}}$$

resp.

$$(6) \quad K' = eV + mc^2 \sqrt{1 + \frac{\left(p_x - \frac{e}{c} A_x\right)^2 + \left(p_y - \frac{e}{c} A_y\right)^2 + \left(p_z - \frac{e}{c} A_z\right)^2}{m^2 c^2}}$$

§ 3. Elektrisch geladen deeltje in een homogeen magnetisch veld.

Denk een magnetisch veld van de sterkte H aangelegd in de richting van de positieve Z -as. Voor de vektorpotentiaal kunnen we dan nemen:

$$(1) \quad A_x = -\frac{1}{2} H y; \quad A_y = \frac{1}{2} H x; \quad A_z = 0.$$

(Bij de vektorpotentiaal mogen we een willekeurige gradient optellen, nemen we b.v. de gradient van $\frac{1}{2}(aHy - bHx)$, dan ontstaat:

$$(2) \quad A'_x = -\frac{1}{2} H (y + b); \quad A'_y = \frac{1}{2} H (x + a); \quad A'_z = 0,$$

dit komt dus neer op een verschuiving van de oorsprong naar het punt $x = -a$, $y = -b$.)

De funktie van Hamilton wordt met (1) en met een potentiële energie U

$$(3) \quad K = U + \frac{1}{m} \left[\left(p_x + \frac{1}{2} \frac{e}{c} H y \right)^2 + \left(p_y - \frac{1}{2} \frac{e}{c} H x \right)^2 + p_z^2 \right].$$

De bewegingsvergelijkingen (6.1) worden:

$$(4) \quad \dot{x} = \frac{1}{m} \left(p_x + \frac{eH}{2c} y \right); \quad \dot{y} = \frac{1}{m} \left(p_y - \frac{eH}{2c} x \right); \quad \dot{z} = \frac{p_z}{m}.$$

$$(5) \quad \dot{p}_x = \frac{+eHy}{2c} - \frac{\partial U}{\partial x}; \quad \dot{p}_y = \frac{-eHx}{2c} - \frac{\partial U}{\partial y}; \quad \dot{p}_z = -\frac{\partial U}{\partial z}$$

Deze geven:

$$(6) \quad \ddot{x} = -\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{eH\dot{y}}{mc}; \quad \ddot{y} = -\frac{\partial U}{\partial y} - \frac{eH\dot{x}}{mc}; \quad \ddot{z} = -\frac{\partial U}{\partial z}.$$

Voor het geval $U = 0$ is dus de verandering der p 's door de magnetische krachten de helft van de versnelling, die deze aan het deeltje geven. Integratie van (6) geeft:

$$(7) \quad \begin{aligned} x &= x_0 + B \sin \left(\frac{eH}{mc} \cdot t + \beta \right) \\ y &= y_0 + B \cos \left(\frac{eH}{mc} \cdot t + \beta \right) \\ z &= z_0 + v_{z0} t, \end{aligned}$$

waarbij x_0 , y_0 , z_0 , B , β en v_{z0} uit de begintoestand bekend zijn. Het elektron voert dus een spiraalbeweging uit in een magnetisch veld, de projectie ervan op het x - y -vlak is een cirkel, die met een hoeksnelheid $\frac{eH}{mc}$ doorlopen wordt. Het kwadraat van de straal B volgt uit de beginsnelheden:

$$(1) \quad \dot{x}^2 + \dot{y}^2 = \left(\frac{eH}{mc} \right)^2 B^2, \quad \text{dus } B = \left(\frac{mc}{eH} \right) \sqrt{\dot{x}_0^2 + \dot{y}_0^2}.$$

§ 4. Berekening met behulp van een roterend koördinatenstelsel.

De beweging van het deeltje wordt ook vaak berekend met behulp van een roterend koördinatenstelsel, dat met een hoeksnelheid

$$(2) \quad \omega = \frac{1}{2} \frac{eH}{mc}, \quad \text{draait om de veldrichting, i. c. de } z\text{-as.}$$

Noem x' , y' , z' , p'_x , p'_y , p'_z de koördinaten en momenten in het draaiende stelsel, dan

$$(3) \quad x' = x \cos \omega t - y \sin \omega t; \quad y' = x \sin \omega t + y \cos \omega t; \quad z' = z;$$

$$(4)$$

$$p_x = p'_x \cos \omega t + p'_y \sin \omega t; \quad p_y = -p'_x \sin \omega t + p'_y \cos \omega t; \quad p_z = p'_z.$$

immers de koördinaten en momenten transformeren zich contragredient. Men kan de punttransformatie (10), (11) ook als een kontakttransformatie opvatten met de „Erzeugende“:

$$(5)$$

$$S = x \cdot p'_x \cdot \cos \omega t - y \cdot p'_x \cdot \sin \omega t + x \cdot p'_y \cdot \sin \omega t + y \cdot p'_y \cdot \cos \omega t.$$

(3) en (4) kunnen dan geschreven worden als:

$$(6) \quad x'_k = \frac{\partial S(x, p')}{\partial p'_k} \quad p_k = \frac{\partial S(x, p')}{\partial x_k}.$$

Bij deze transformatie moet in de kanonieke vergelijkingen (6.1) $K(x, p)$ vervangen worden door:

$$(7) \quad \bar{K}(x', p') = K'(x', p') + \frac{\partial S}{\partial t},$$

waar $K'(x', p')$ verkregen wordt door in $K(x, p)$ x en p als functies van x' en p' te substitueren.

Het stuk, dat betrekking heeft op de beweging in de z -richting, laten we weg, ons interesseert alleen de beweging // x - y -vlak. Dit geeft dus voor $\bar{K}$, als we de afkorting (11.2) gebruiken:

$$(1) \quad \bar{K}(x', p') = \frac{1}{2m} (p_{x'}^2 + p_{y'}^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x'^2 + y'^2) + U(x', y').$$

Is de potentiaal zodanig, dat het deeltje zich nooit ver van de oorsprong verwijdt, dan kunnen we vaak de middelste term weglaten vanwege de kleinheid van de faktor ω^2 , welke dan niet door grote waarden van x', y' gecompenseerd kan worden. Maken we deze verwaarlozing, dan krijgen we de vorm terug, die de funktie van H a m i l t o n bij afwezigheid van enig magneetveld hebben zou, alleen met $x', y', p'_{x'}, p'_{y'}$ in de plaats van x, y, p_x, p_y .

In dit geval geldt dus de eigenschap (teorema van L a r m o r):

De beweging van een geladen deeltje in een homogeen magneetveld is dezelfde als de veldvrije beweging ten opzichte van een koördinatenstelsel, dat om de veldas roteert met een hoeksnelheid

$$(2) \quad \omega = \frac{eH}{2mc}.$$

Mag men de kwadratische term niet verwaarlozen, dan heeft men voor het geval $U=0$, dus geheel vrije deeltjes, de beweging van een isotroop gebonden twee-dimensionale oscillator.

Uit (6.1) volgen dan de vergelijkingen:

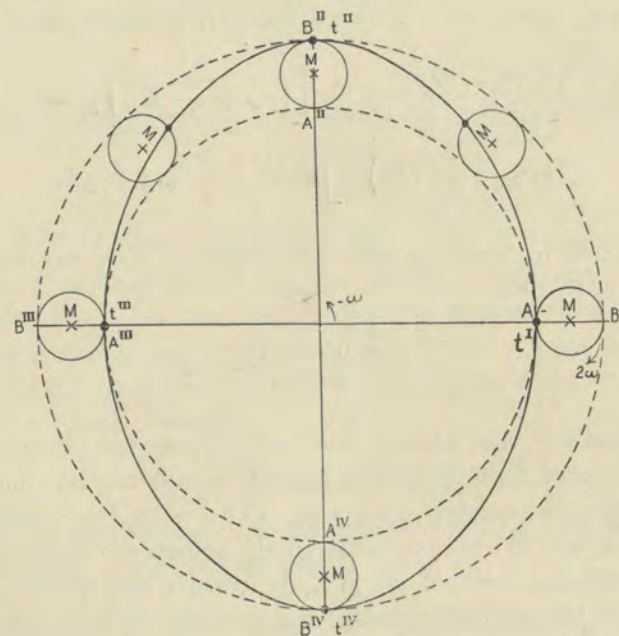
$$(3) \quad \ddot{x}' = -\omega^2 x'; \quad \ddot{y}' = -\omega^2 y',$$

dus:

$$(4) \quad \begin{aligned} x' &= B_1 \sin(\omega t + \beta_1), \\ y' &= B_2 \sin(\omega t + \beta_2), \end{aligned}$$

de baan van het deeltje in het roterend koördinatenstelsel is dus een ellips. Dit was ook wel te verwachten, want voor $U=0$ is de baan van het deeltje in een rustend koördinatenstelsel een cirkel

(zie 10.7), die met een hoeksnelheid 2ω doorlopen wordt. Om nu de baan in het roterende stelsel (II) te vinden, denken we ons dit in rust en het oorspronkelijk rustend stelsel (I) roterend met



een hoeksnelheid $-\omega$. Stel nu op tijdstip t^I is het deeltje in A; na $\frac{\pi}{2\omega}$ sek. is het in het stelsel I in B gekomen, het punt van I heeft echter intussen in II reeds een kwart cirkel doorlopen, het deeltje is dus in het door t^{II} aangegeven punt van II aangekomen. Na $\frac{\pi}{\omega}$ sek. is het deeltje in I weer in punt A teruggekomen, in II heeft A echter nog maar een halve cirkel afgelegd, dus het deeltje is in punt t^{III} gekomen in het stelsel II. Enz. We zien het deeltje beschrijft in II een ellips; de grote as ervan wordt gegeven door de som van de afstand van het middelpunt van de door dit punt in I doorlopen cirkel tot de oorsprong en de straal van deze cirkel, de kleine as door het verschil van die twee.

§ 5. *Magnetisch moment.*

We hebben gezien: partiële differentiatie van (10.3), $K(x, p, H)$ naar een momentkomponent geeft ons de snelheid in een van de coördinatenrichtingen, naar een coördinaat de verandering van een p , wat geeft ons nu de partiële differentiatie naar H ?

$$(1) \quad \frac{\partial K(x, p, H)}{\partial H} = \frac{1}{2} \frac{e}{mc} \left[\left(p_x + \frac{e}{2c} Hy \right) y - \left(p_y - \frac{e}{2c} Hx \right) x \right] = -\frac{1}{2} \frac{e}{c} (xy - yx).$$

Deze laatste uitdrukking stelt het negatieve van het magnetisch moment voor, dus:

$$(2) \quad -\frac{\partial K(x, p, H)}{\partial H} = \mu.$$

De afgeleide van energie als functie van de coördinaten en momenten naar de magnetische veldsterkte geeft ons dus het tegengestelde van het magnetisch moment. Dit is weer een voordeel van de functie van Hamilton boven de andere uitdrukkingwijzen van de energie. Nemen we b.v. de energie als functie van de coördinaten en snelheden, zo krijgen we voor de kinetische energie $\frac{1}{2}mv^2$; dus in de energieuitdrukking:

$$(1) \quad U(x, y) + \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2)$$

komt H niet expliciet voor, zodat men hier niet zeggen kan, dat het tegengestelde van het moment gegeven wordt door de partiële afgeleide van de energie naar H .

¹⁾ Voor andere afleidingen van het magnetische moment verg. C. J. Gorter, Diss. Leiden (verschijnt binnenkort).

HOOFDSTUK III

GOLFVERGELIJKING VOOR EEN ELEKTRISCH
GELADEN DEELTJE§ 1. *Niet-relativistische uitdrukking.*

In dit hoofdstuk zullen we de grondformules van de golfmechanica opsommen om er later naar te kunnen verwijzen¹⁾.

De vergelijking van Schrödinger wordt, gelijk bekend is, uit de functie van Hamilton verkregen door de kunstgreep:

Vervang in de klassieke vergelijking:

$$(1) \quad K(x, y, z, t, p_x, p_y, p_z) - W = 0$$

waar W de getalwaarde van de energie en $K(x, t, p)$ de functie van Hamilton is, respectievelijk:

$$(2) \quad p_x, p_y, p_z \text{ en } W \text{ door de differentiaaloperatoren:}$$

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}, \quad -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t},$$

en oefen de zo verkregen operator uit op een „golf-functie” of „golfpakket” $\Psi(x, y, z, t)$. We krijgen zo de vergelijking:

$$(3) \quad \left[K\left(x, y, z, t, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}\right) - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi = 0.$$

Behalve deze hebben we in de golfmechanica ook nog de toegevoegde golfvergelijking, welke verkregen wordt door in (1) de

¹⁾ Voor afleidingen en verdere gegevens zij verwezen naar E. Schrödinger, Abhandlungen zur Wellenmechanik, Leipzig 1926; en P. A. M. Dirac, Quantum Mechanics, Oxford 1930.

vervanging toe te passen:

$$(1) \quad p_x = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z},$$

$$W = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}.$$

De oplossing van de hierdoor verkregen vergelijking duiden we aan door de letter Φ . In navolging van Dirac¹⁾ schrijven wij deze toegevoegde funktie Φ voor de operator, die erop wordt uitgeoefend, zodat Φp_x in de golfmechanika betekent:

$$-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Phi}{\partial x}.$$

De toegevoegde Schroedingervergelijking wordt dus:

$$(2) \quad \Phi \left[K \left(x, y, z, t, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right] = 0.$$

Bevat K de tijd niet expliciet, dan kunnen we door de substitutie:

$$(3) \quad \Psi(x, y, z, t) = e^{\frac{-2\pi i W t}{h}} \cdot \psi(x, y, z)$$

in (15.3), en

$$(4) \quad \Phi(x, y, z, t) = e^{\frac{2\pi i W t}{h}} \cdot \varphi(x, y, z)$$

in (2) overgaan tot de „eigenwaarde-vergelijkingen” van Schrödinger:

$$(5) \quad K \left(x, y, z, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi - W \psi = 0$$

en de hierbij behorende toegevoegde vergelijking voor φ .

¹⁾ P. A. M. Dirac, l.c., Hoofdstuk II, vooral § 9, § 36, § 37 en § 74.

Behalve aan deze vergelijking moet $\psi(x, y, z)$ nog aan zekere randvoorwaarden voldoen, die door de aard van het probleem gesteld worden. Slechts bij bepaalde waarden van de konstante W („eigenwaarden”, of minder germanisties, „karakteristieke waarden”) heeft deze vergelijking een of meer oplossingen („eigenfunkties” of „karakteristieke funkties”). De eigenwaarden en eigenfunkties worden onderscheiden door een of meer indices, „kwantengedallen”, welke in de kwantenmechanika de toestand karakteriseren, waarin zich het fiesiese systeem bevindt. De eigenwaarden voor de beide toegevoegde vergelijkingen zijn dezelfde.

De ψ 's vormen een volledig orthogonaal systeem, dus ten eerste¹⁾: iedere funktie van de koördinaten, die aan de randvoorwaarden voldoet en waarvan de eerste afgeleide kontinu en de tweede bij gedeelten kontinu is, kan naar deze eigenfunkties ontwikkeld worden; is $F(x)$ een dergelijke funktie en zijn $\psi_n(x)$, $\varphi_n(x)$ de genormeerde eigenfunkties, dan is:

$$(1) \quad F(x) = \sum_{(n)} c_n \cdot \psi_n(x),$$

waarbij c_n bepaald is door $\int dx \cdot \varphi_n F = c_n$; ten tweede: als ψ_k en ψ_n twee verschillende eigenfunkties voorstellen, geldt:

$$(2) \quad \int dx \cdot dy \cdot dz \cdot \varphi_n \psi_k = 0,$$

indien we de integraal over de gehele ruimte, waarvoor de differentiaalvergelijking geldig is, nemen.

De vorm (15.3) moet altijd gebruikt worden, als de funktie van Hamilton expliciet van de tijd afhangt. Is dit niet het geval, dan kan men door de substitutie (16.3) (15.3) in (16.5) doen overgaan. De algemene oplossing van (15.3) kan dan steeds geschreven worden:

$$(3) \quad \Psi(x, y, z, t) = \sum_{(l)} c_l \cdot \psi_l(x, y, z) \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} W_l t},$$

waar de c 's konstant zijn.

¹⁾ Zie Courant-Hilbert, Methoden der mathematischen Physik, 1e druk, Berlin 1924, S. 277 e.v.

De oplossing van de toegevoegde vergelijking is dan:

$$(1) \quad \Phi(x, y, z, t) = \sum c_l^* \cdot \varphi_l(x, y, z) \cdot e^{\frac{2\pi i}{h} W_l t},$$

(c_l^* is de toegevoegde komplexe van c_l).

Bevat K de tijd alleen via een term $\propto V(x, y, z, t)$ die in orde van grootte kleiner is dan de overige termen, dan kunnen we ook de storingsrekening toepassen, n.l. we schrijven de oplossing ook in de vorm (17.3), waarbij de c 's ditmaal geen konstanten, maar functies van de tijd zijn, de in (17.3) voorkomende eigenwaarden en eigenfuncties zijn die van de overeenkomstige vergelijking (16.5), wanneer men de tijdsafhankelijke term weglaat. De tijdsafhankelijkheid van de c 's wordt dan bepaald door de *storingsvergelijking*¹⁾:

$$(2) \quad -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{dc_l(t)}{dt} = \sum_{(m)} V_{lm}(t) \cdot c_m(t).$$

De „matricelementen” V_{lm} , die hier optreden, zijn de ontwikkelingscoëfficiënten van

$$V(x, y, z, t) \cdot \psi_m(x, y, z) \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} W_m t}$$

naar het volledige functiesysteem

$$\psi_l(x, y, z) \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} W_l t}$$

Deze methode kan ook worden toegepast, als V de tijd niet bevat, dan heeft men

$$(3) \quad V_{lm} = v_{lm} \cdot e^{\frac{2\pi i}{h} (W_l - W_m) t}$$

waar de v_{lm} nu niet meer van de tijd afhankelijk zijn.

In dit geval kan men ook *Schroedingers* storingsrekening²⁾ toepassen, die een antwoord geeft op de vraag: Welke zijn de eigenfuncties en eigenwaarden van het gestoorde probleem?

De *fiesiese* betekenis van de golffunctie Ψ is: substitueert men in Ψ en Φ voor x, y , en z de waarden van de coördinaten van

¹⁾ P. A. M. Dirac, Proc. Royal Soc. London, A 112, p. 661, 1926.

²⁾ E. Schroedinger, Ann. der Phys. 80, S. 437, 1926.

een punt uit een klein gebied $dx \cdot dy \cdot dz$, zo geeft $\Phi \cdot \Psi \cdot dx \cdot dy \cdot dz$ de waarschijnlijkheid aan om bij een betreffende meting het beschouwde systeem in dat gebied te vinden.

De c 's, de ontwikkelingscoëfficiënten van de golffunctie naar de eigenfuncties, hebben de volgende natuurkundige betekenis: Zij de begintoestand (verg. blz. 2) gegeven door Ψ , dan stelt $c_l^* \cdot c_l$ de waarschijnlijkheid voor, dat we, bij een meting om de kwanten-toestand van het systeem te bepalen, hiervoor de toestand l vinden.

De betekenis der eigenwaarden is de volgende: bepalen wij experimenteel precies de waarde van de energie, dan zullen wij voor deze getalwaarde alleen één der eigenwaarden van (16.5) vinden, andere getalwaarden zullen niet als resultaat van onze meting optreden.

Is er behalve een elektrostatische potentiaal ook een vektorpotentiaal aanwezig, dan krijgt men de bijbehorende golfvergelijking door in de voor het algemeen elektromagnetisch veld geldende functie van Hamilton (7.1) de vervanging (15.2), toe te passen, m.a.w. door in (15.3) overal

$$(1) \quad \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k} \text{ te vervangen door } \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{e}{c} A_k.$$

Omdat echter in de functie van Hamilton voorkomt

$$\sum \left(p_k - \frac{e}{c} A_k \right)^2,$$

ontstaat bij de overgang naar

$$\sum \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right)$$

een term $(\text{div } A) \cdot \Psi(x, y, z, t)$. Zoals in de volgende paragraaf blijken zal, is het voorkomen van deze term veroorzaakt door de niet-relativistische vorm der vergelijking, waardoor een term met

$$\frac{1}{c} \frac{\partial V}{\partial t} \Psi$$

(V is de skalare potentiaal) niet optreedt, welke $\text{div } A \cdot \Psi$ opheffen kan. Daarom zullen we deze laatste term ook hier weglaten. De vergelijking heeft dan voor een systeem met de lading e de vorm:

$$(1) \quad -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta \Psi(x, y, z, t) - \frac{\hbar e}{2\pi i m c} (A \cdot \text{grad } \Psi) + eV \Psi + \\ + \frac{e^2}{c^2} A^2 \Psi = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

§ 2. Relativistische golfvergelijking van Schroedinger-Gordon-Klein.

Van verschillende kanten is getracht een golfvergelijking te vinden, die een relativistische invariante vorm heeft. In de eerste plaats¹⁾ door de vervanging (15.2) toe te passen in de klassiek relativistische betrekking (8.1) of (8.3). Dit laatste voert ons tot de vergelijking:

$$(2) \quad \left[\left(-\frac{\hbar}{2\pi i c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{eV}{c} \right)^2 - \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eA_x}{c} \right)^2 - \right. \\ \left. - \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{eA_y}{c} \right)^2 - \left(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{eA_z}{c} \right)^2 \right] \chi = m^2 c^2 \chi(x, y, z, t)$$

of

$$(3) \quad -\frac{\hbar^2}{4\pi^2} \square \chi - \frac{2\hbar e}{2\pi i c} \left[A \cdot \text{grad} + \frac{V}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right] \chi - m^2 c^2 \chi + \\ + \frac{e^2}{c^2} (V^2 - A^2) \chi = 0.$$

Bij deze herleiding is gebruikt

$$\text{div } A + \frac{1}{c} \frac{\partial V}{\partial t} = 0.$$

We kunnen uit (3) weer overgaan naar de niet-relativistische vergelijking (1) door de substitutie:

$$(4) \quad \chi(x, y, z, t) = e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} m c^2 t} \Psi(x, y, z, t)$$

¹⁾ E. Schroedinger, Ann. der Phys. 81, S. 109, 1926; W. Gordon, Zeits. f. Physik 40, S. 117, 1927.

en dan

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \text{ en } eV$$

t.o.v. mc te verwaarlozen.

Op deze wijze krijgen wij de niet-relativistische vorm (20.1) zonder divergentieterm.

De toegevoegde vergelijking van (20.3) is:

$$(1) \quad -\frac{\hbar}{4\pi^2} \square \chi^*(x, y, z, t) + \frac{2\hbar e}{2\pi i c} \left(A \cdot \text{grad } \chi^* + \frac{V}{c} \frac{\partial \chi^*}{\partial t} \right) - \\ - m^2 c^2 \chi^* + \frac{e^2}{c^2} (V^2 - A^2) \chi^* = 0.$$

Vermenigvuldiging van (20.3) met $\chi^*(x, y, z, t)$ en van (1) met $\chi(x, y, z, t)$ en aftrekking geeft tot op een konstante faktor¹⁾:

$$(2) \quad \text{div } J + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0,$$

waar $J(x, y, z, t)$ en $\rho(x, y, z, t)$ afkortingen zijn voor:

$$(3) \quad \rho(x, y, z, t) = \frac{e}{2mc} \left[-\frac{\hbar}{2\pi i} \left(\chi^* \frac{\partial \chi}{\partial t} - \frac{\partial \chi^*}{\partial t} \chi \right) - 2eV \chi^* \chi \right]$$

$$(4) \quad J_x(x, y, z, t) = \frac{e}{2m} \left[\frac{\hbar}{2\pi i} \left(\chi^* \frac{\partial \chi}{\partial x} - \frac{\partial \chi^*}{\partial x} \chi \right) - 2\frac{e}{c} A_x \chi^* \chi \right]$$

$$J_y(x, y, z, t) = \frac{e}{2m} \left[\frac{\hbar}{2\pi i} \left(\chi^* \frac{\partial \chi}{\partial y} - \frac{\partial \chi^*}{\partial y} \chi \right) - 2\frac{e}{c} A_y \chi^* \chi \right]$$

$$J_z(x, y, z, t) = \frac{e}{2m} \left[\frac{\hbar}{2\pi i} \left(\chi^* \frac{\partial \chi}{\partial z} - \frac{\partial \chi^*}{\partial z} \chi \right) - 2\frac{e}{c} A_z \chi^* \chi \right]$$

Het bestaan van het behoudingsteorema (2) voert tot de onderstelling, dat (3) en (4) de golfmechanische uitdrukkingen zijn voor de ladings- en stroomdichtheid, als e de lading van het beschouwde systeem is. Dalen we weer door de substitutie (20.4) en de hierbij behorende verwaarlozingen af naar de overeenkomstige niet-relativistische uitdrukking, zo ontstaat:

¹⁾ O. Klein, Zeits. f. Physik. 41, S. 414, 1927.

$$(1) \quad \rho(x, y, z, t) = e \cdot \Phi(x, y, z, t) \cdot \Psi(x, y, z, t).$$

$$(2) \quad J_x(x, y, z, t) = \frac{e}{2m} \left[\frac{h}{2\pi i} \left(\Phi \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Psi \right) - 2 \frac{e}{c} A_x \Phi \Psi \right]$$

enz. dus voor $\rho(x, y, z, t)$ de uitdrukking, die we ook al op blz. 19 genoemd hebben. Deze vorm heeft zich in vele opzichten als de juiste betoond.

Tegen de vorm (21.3) heeft Dirac¹⁾ ernstige bezwaren ingebracht, vooral omdat de integraal van (21.3) over de ruimte niet altijd e gaf, hetgeen verlangd moet worden. Daarom kon hij (20.3) nog niet als de goede relativistische golfvergelijking aanzien. We zullen later een tweede nadeel van deze vergelijking noemen (blz. 36).

Dirac eiste voor alles van de golfvergelijking, dat ze van de eerste orde zou zijn, wat de tijdsafgeleide betreft. Dit kunnen we b.v. ook verkrijgen door in plaats van (8.1) resp. (8.3) uit te gaan van de relativistische Hamiltonfunctie (9.5) resp. (9.6). Daar de tweede term onder het wortelteken gewoonlijk zeer klein is, kunnen we de wortelvorm ontwikkelen. Dirac heeft de op deze manier verkregen golfvergelijking enige malen gebruikt²⁾; voor het afleiden van een algemeen geldende stroomuitdrukking kan men natuurlijk niet van een benadering uitgaan, terwijl wij met het wortelteken niet werken kunnen.

§ 3. Vergelijking van Dirac.

Dirac heeft nu een andere golfvergelijking afgeleid, waarbij hij de uitdrukking (1) voor de ladingsdichtheid behouden kan. Zijn vergelijking kan volgens Breit³⁾ aldus verkregen worden: de functie van Hamilton wordt in de klassieke mechanica algemeen uit de Lagrangefunctie als volgt afgeleid:

$$(3) \quad K = \sum \dot{x}_k p_k - L.$$

¹⁾ P. A. M. Dirac, Leipsiger Vorträge 1927.

²⁾ P. A. M. Dirac, Proc. Royal Soc. London A 114, p. 710, 1927, speciaal

§ 3. Vgl. Quantum Mechanics, hoofdstuk VII.

³⁾ G. Breit, Proc. Nat. Ac. 14, p. 553, 1928.

De functie van Lagrange is hier gegeven door (8.2); substitutie ervan in (22.3) voert tot de vorm

$$(1) \quad \frac{W}{c} = \frac{\dot{x} p_x}{c} + \frac{\dot{y} p_y}{c} + \frac{\dot{z} p_z}{c} - mc(1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \left(\beta = \frac{v}{c} \right).$$

Met behulp van (9.4) is de gelijkwaardigheid van (1) met (9.5) spoedig te zien.

Van de uitdrukking (1) maken wij nu een operator door de substitutie

$$(2) \quad p_k = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad W = - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \frac{\dot{x}_k}{c} = -\alpha_k, \quad (1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}} = \alpha_4$$

waarin α_k ook operatoren (matrices) voorstellen, met de volgende eigenschappen:

$$(3) \quad \alpha_r^2 = 1; \quad \alpha_r \alpha_s + \alpha_s \alpha_r = 2 \delta_{rs}.$$

Deze operatoren α werken niet op de gewone coördinaten x, y, z, t ; maar op een vijfde coördinaat ζ , die slechts vier waarden kan aannemen. ψ wordt dus ook beschouwd als een functie van deze vijf coördinaten¹⁾. De eigenwaarden van de α 's zijn $+1$ en -1 , d.w.z. de vergelijking: $\alpha_k F(\zeta) = \lambda \cdot F(\zeta)$ heeft alleen een oplossing, als λ de waarde $+1$ of -1 aanneemt.

De toegevoegde operator wordt verkregen door de substitutie:

$$(4) \quad p = - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}; \quad W = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t},$$

en voorts dezelfde operatoren als boven voor

$$\frac{\dot{x}}{c} \text{ en } (1 - \beta^2)^{\frac{1}{2}}.$$

mits deze operatoren worden uitgeoefend op een golffunctie, die voor de operator staat. De twee vergelijkingen worden dus:

$$(5) \quad \left(- \frac{h}{2\pi i c} \frac{\partial}{\partial t} + \alpha_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} + \alpha_4 mc \right) \Psi = 0$$

¹⁾ Voor nadere gegevens zij verwezen naar P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A 117, p. 610; 118, p. 351, 1928.

De voorwaarden (3) ontstaan tengevolge van de wens, dat herhaald gebruik van de op deze wijze verkregen golfoperator weer tot de vergelijking (20.3) voert.

$$(1) \quad \Phi \left(\frac{h}{2\pi i c} \frac{\partial}{\partial t} - \alpha_1 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_2 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} - \alpha_3 \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} + \alpha_4 mc \right) = 0.$$

Behalve de operatoren in (23.2) genoemd, zullen we nog wel de operator α_0 gebruiken om meer symmetrie in de formules te verkrijgen. Ze stelt dan de eenheidsoperator maal $-i$ voor, die iedere functie in zichzelf overvoert. Tevens zullen we dan voor de coördinaten ict, x, y, z schrijven: x_0, x_1, x_2, x_3 .

De vergelijkingen voor een willekeurig elektromagnetisch veld worden uit (23.5) en (1) afgeleid, door ook hier de vervanging (19.1) toe te passen. Dit geeft de vergelijkingen:

$$(2) \quad \left[-\frac{h}{2\pi i c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{eV}{c} + \sum_1^3 \alpha_k \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{eA_k}{c} \right) + \alpha_4 m_0 c \right] \Psi = 0.$$

$$(3) \quad \Phi \left[\frac{h}{2\pi i c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{eV}{c} - \sum_1^3 \alpha_k \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{eA_k}{c} \right) + \alpha_4 m_0 c \right] = 0.$$

We kunnen nu weer een divergentievergelijking afleiden door (2) links met Φ , en (3) rechts met Ψ te vermenigvuldigen en de zo verkregen vergelijkingen van elkaar af te trekken. Dan ontstaat de vergelijking:

$$(4) \quad \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi \Psi - \sum_1^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\Phi \alpha_k \Psi) = 0.$$

We beschouwen nu weer $\Phi \Psi$ als de waarschijnlijkheidsdichtheid en $-\Phi \alpha_k \Psi$ als de componenten der waarschijnlijkheidsstroom.

Aan produkten als $\psi \Phi$, $\psi \alpha_k \Phi$ beantwoordt geen fiesiese betekenis, zij zijn „zinloos“.

Uit de substitutie (23.2) zien we, dat, zelfs in het veldvrije geval, de componenten van snelheid en moment geheel verschillend behandeld worden. Het eenvoudige verband, dat in de klassieke mechanika tussen beide bestaat, gaat in de kwantenmechanika totaal verloren. B.v. in het veldvrije geval kan de component van het moment iedere waarde aannemen, de snelheidscomponent daarentegen alleen de waarden $+c$ en $-c$. Immers de eigenwaarden van α zijn $+1$ en -1 , d.w.z. als we een meting verrichten om

de waarde van de grootte α experimenteel te bepalen, vinden we uitsluitend als resultaat de waarde $+1$ of de waarde -1 . De snelheid, $\dot{x}_k = -c \alpha_k$, kan dus alleen de waarde $+c$ of $-c$ aannemen.

Schroedinger, die het verband tussen $\dot{x}_k$ en p_k nader onderzocht heeft¹⁾, heeft aangetoond, dat we in de kwantenmechanika van twee snelheden kunnen spreken, n.l. een mikroskopische snelheid van het deeltje, die door $\dot{x}$ gegeven is en een makroskopische, die door $\frac{p}{m}$ voorgesteld wordt. Het deeltje plant zich n.l. volgens de wetten der golfmechanika niet rechtlijnig voort, maar voert een zaagvormige beweging uit met een momentane snelheid $= c$; de resulterende beweging is een voortgaan volgens een rechte lijn met een snelheid $\frac{p}{m}$. Dit laatste komt dan overeen met wat we gewoon zijn klassiek als de snelheid te beschouwen. Voor de elektrische en magnetische werkingen is de werkelijk bestaande, momentane snelheid, dus de mikroskopische, doorslaggevend. We zullen dit ook later bevestigd vinden (blz. 35).

¹⁾ E. Schroedinger, Sitzungsberichte Preuss. Akad. Berlin, S. 418, 1930.

HOOFDSTUK IV

DE VERGELIJKINGEN VAN DIRAC EN DE ENERGIE-IMPULSTENSOR VAN MATERIEVELD EN ELEKTROMAGNETIES VELD¹⁾

§ 1. *Afleiding der vergelijkingen van Dirac en der elektromagnetische vergelijkingen uit één variatieprincipe. Stroomuitdrukking.*

Evenals de golfvergelijking van de tweede orde²⁾ kan men ook de vergelijkingen van Dirac afleiden uit een variatieprincipe. De te variëren functie — „Lagrangefunctie van het materieveld” — luidt, zo we de afkortingen

$$(1) \quad \psi_\rho = \frac{\partial \Psi}{\partial x_\rho}; \quad \Phi_\rho = \frac{\partial \Phi}{\partial x_\rho} \quad [\rho = 0, 1, 2, 3]$$

gebruiken en de skalaire potentiaal voorstellen door $-iA_0$:

$$(2) \quad L = \frac{h}{4\pi i} (\Phi \alpha_\rho \Psi_\rho - \Phi_\rho \alpha_\rho \Psi) - \frac{e}{c} A_\rho \cdot \Phi \alpha_\rho \Psi + m_0 c \Phi \alpha_4 \Psi.$$

Voor later gebruik schrijven we hier de verschillende partiële afgeleiden neer:

$$(3) \quad \frac{\partial L}{\partial \Psi} = -\frac{h}{4\pi i} \Phi_\rho \alpha_\rho - \frac{e}{c} \Phi \alpha_\rho \cdot A_\rho + m_0 c \Phi \alpha_4$$

$$\frac{\partial L}{\partial \Phi} = \frac{h}{4\pi i} \alpha_\rho \Psi_\rho - \frac{e}{c} \alpha_\rho A_\rho \cdot \Psi + m_0 c \alpha_4 \Psi.$$

¹⁾ In dit hoofdstuk moet steeds over tweemaal voorkomende indices gesommeerd worden, het sommatieteken wordt weggelaten.

²⁾ W. Gordon, Zeitsch. f. Phys. 40, S. 119, 1927.

$$(1) \quad \frac{\partial L}{\partial \Psi_\rho} = \frac{h}{4\pi i} \Phi \alpha_\rho; \quad \frac{\partial L}{\partial \Phi_\rho} = -\frac{h}{4\pi i} \alpha_\rho \Psi.$$

$$(2) \quad \frac{\partial L}{\partial A_\rho} = -\frac{e}{c} \Phi \alpha_\rho \Psi.$$

Uit (1) en (2) volgt:

$$(3) \quad \Phi \frac{\partial L}{\partial \Phi_\rho} - \frac{\partial L}{\partial \Psi_\rho} \Psi = \frac{h c}{2\pi i e} \frac{\partial L}{\partial A_\rho}$$

Stellen we nu:

$$(4) \quad \delta \int L d\tau = 0; \quad d\tau = dx \cdot dy \cdot dz \cdot dt.$$

waarbij Φ en Ψ onafhankelijk te variëren zijn, zo zijn de vergelijkingen van Euler identiek met Diracs vergelijkingen:

$$(5) \quad \frac{\partial}{\partial x_\rho} \frac{\partial L}{\partial \Phi_\rho} - \frac{\partial L}{\partial \Phi} \equiv -\frac{h}{2\pi i} \alpha_\rho \frac{\partial \Psi}{\partial x_\rho} + \frac{e}{c} A_\rho \cdot \alpha_\rho \Psi - m_0 c \alpha_4 \Psi = 0.$$

$$(6) \quad \frac{\partial}{\partial x_\rho} \frac{\partial L}{\partial \Psi_\rho} - \frac{\partial L}{\partial \Psi} \equiv +\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Phi}{\partial x_\rho} \alpha_\rho + \frac{e}{c} A_\rho \Phi \alpha_\rho - \Phi m_0 c \alpha_4 = 0.$$

Uit (5) volgt:

$$(7) \quad \frac{\partial}{\partial x_\rho} \left(\Phi \frac{\partial L}{\partial \Phi_\rho} \right) = \Phi_\rho \frac{\partial L}{\partial \Phi_\rho} + \Phi \frac{\partial L}{\partial \Phi} = L,$$

daar L homogeen is in Φ en Φ_ρ

Evenzo uit (6):

$$(8) \quad \frac{\partial}{\partial x_\rho} \left(\frac{\partial L}{\partial \Psi_\rho} \psi \right) = L.$$

Aftrekking van (7) en (8) voert tot de continuïteitsvergelijking:

$$(9) \quad \frac{\partial}{\partial x_\rho} \left(\Phi \frac{\partial L}{\partial \Phi_\rho} - \frac{\partial L}{\partial \Psi_\rho} \psi \right) = 0$$

of

$$\frac{\partial}{\partial x_\rho} \frac{\partial L}{\partial A_\rho} = 0. \quad [\text{Vgl. (3)}]$$

Beschouw nu als componenten van de „Viererstrom“

$$(1) \quad J_\rho = k \cdot \frac{\partial L}{\partial A_\rho},$$

waarbij k een nader te bepalen konstante is.

Evenals Schrödinger voor het analoge probleem bij de relativistische golfvergelijking van de tweede orde¹⁾ kan men ook hier een funktie van Lagrange verkrijgen, waaruit door variatie van de potentialen en golf-funkties zowel de vergelijkingen van Maxwell voor het elektromagnetisch veld als die van Dirac voor het materieveld voortkomen. Daartoe moet bij L , zie formule (26.2), nog opgeteld worden:

$$(2) \quad L_e = -\frac{1}{4} f_{\rho\sigma} \cdot f_{\rho\sigma}$$

waar $f_{\rho\sigma}$ de componenten van de elektromagnetische veldtensor

$$(3) \quad f_{\rho\sigma} = \frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\rho} - \frac{\partial A_\rho}{\partial x_\sigma} \quad \text{is.}$$

De totale funktie van Lagrange wordt:

$$(4) \quad M = L + L_e.$$

Hierbij geeft de variatie van de golf-funkties ons als boven de vergelijkingen van Dirac; variatie van de A geeft ons

$$(5) \quad \frac{d}{dx_\sigma} \frac{\partial M}{\partial \left(\frac{\partial A_\rho}{\partial x_\sigma} \right)} - \frac{\partial M}{\partial A_\rho} = 0,$$

dus

$$\frac{\partial M}{\partial A_\rho} = \frac{\partial L}{\partial A_\rho} = \frac{d}{dx_\sigma} \frac{\partial f_{\tau\omega}}{\partial \left(\frac{\partial A_\rho}{\partial x_\sigma} \right)} \frac{\partial L_e}{\partial f_{\tau\omega}}$$

of:

$$(6) \quad \frac{J_\rho}{k} = \frac{\partial L}{\partial A_\rho} = \frac{\partial f_{\rho\sigma}}{\partial x_\sigma} = J_\rho,$$

¹⁾ E. Schrödinger, Ann. der Phys. 82, S. 265, 1927.

dus

$$(1) \quad k = +1$$

geeft het tweede stel der vergelijkingen van Maxwell.

§ 2. Energie-impulstensor voor materie- en elektromagnetisch veld.

Voor het afleiden van de behoudingsteorema's voor energie en impuls voor elektromagnetisch- en materieveld door middel van een vierdimensionale spanningstensor kunnen we, behalve de spanningstensor voor het elektromagnetische veld¹⁾

$$(2) \quad T_{\rho\sigma} = f_{\rho\tau} f_{\sigma\tau} - \frac{1}{4} \delta_{\rho\sigma} f_{\tau\omega} f_{\tau\omega},$$

waar

$$(3) \quad \frac{\partial T_{\rho\sigma}}{\partial x_\sigma} = -f_{\rho\sigma} J_\sigma,$$

Schrödingers uitdrukking voor de energietensor van het materieveld overnemen, mits we voor de funktie van Lagrange formule (26.2) substitueren:

$$(4) \quad S_{\rho\sigma} = \Phi_\rho \frac{\partial L}{\partial \Phi_\sigma} + \frac{\partial L}{\partial \Psi_\sigma} \Psi_\rho + A_\rho \frac{\partial L}{\partial A_\sigma} - \delta_{\rho\sigma} L.$$

Vorm nu:

$$(5) \quad \frac{\partial S_{\rho\sigma}}{\partial x_\sigma} = \Phi_{\rho\sigma} \frac{\partial L}{\partial \Phi_\sigma} + \frac{\partial L}{\partial \Psi_\sigma} \Psi_{\rho\sigma} + \Phi_\rho \frac{\partial}{\partial x_\sigma} \frac{\partial L}{\partial \Phi_\sigma} + \left(\frac{\partial}{\partial x_\sigma} \frac{\partial L}{\partial \Psi_\sigma} \right) \Psi_\rho + \\ + \frac{\partial A_\rho}{\partial x_\sigma} \frac{\partial L}{\partial A_\sigma} + A_\rho \left[\frac{\partial}{\partial x_\sigma} \frac{\partial L}{\partial A_\sigma} - \frac{\partial L}{\partial x_\rho} \right].$$

De voorlaatste term hiervan is nul wegens (27.9), terwijl uitrekening van de laatste term ons voert tot

$$(6) \quad \frac{\partial L}{\partial x_\rho} = \frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\rho} \frac{\partial L}{\partial A_\sigma} + \Phi_\rho \frac{\partial L}{\partial \Phi} + \frac{\partial L}{\partial \Psi} \Psi_\rho + \Phi_{\rho\sigma} \frac{\partial L}{\partial \Phi_\sigma} + \frac{\partial L}{\partial \Psi_\sigma} \Psi_{\rho\sigma}.$$

¹⁾ Zie b.v. A. D. Fokker, Relativiteitstheorie, blz. 125, Groningen 1930.

Substitutie van deze uitdrukking in (29.5) voert onder toepassing van (27.5), (27.6), (28.1) en (28.3) naar

$$(1) \quad \frac{\partial S_{\rho\sigma}}{\partial x_\sigma} = f_{\rho\sigma} \cdot J_\sigma$$

(29.3) en (1) geven:

$$(2) \quad \frac{\partial}{\partial x_\sigma} (T_{\rho\sigma} + S_{\rho\sigma}) = 0.$$

Dus ook bij Diracs golfvergelijking laat zich een gemeenschappelijk behoudingsteorema voor elektromagneties- en materie-veld afleiden. De energie-impulstensor der materie $S_{\rho\sigma}$ heeft de structuur:

$$(3) \quad 2 S_{\rho\sigma} = \Phi \alpha_\sigma \left[\frac{h}{2\pi i} \Psi_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \Psi \right] - \left[\frac{h}{2\pi i} \Phi_\rho + \frac{e}{c} A_\rho \Phi \right] \alpha_\sigma \Psi - \delta_{\rho\sigma} L.$$

De overeenkomstige uitdrukking bij Schroedinger was:

$$(4) \quad S_{\rho\sigma} = \left[-\frac{h}{2\pi i} \Phi_\sigma - \frac{e}{c} A_\sigma \Phi \right] \left[\frac{h}{2\pi i} \Psi_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \Psi \right] + \left[-\frac{h}{2\pi i} \Phi_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \Phi \right] \left[\frac{h}{2\pi i} \Psi_\sigma - \frac{e}{c} A_\sigma \Psi \right] - \delta_{\rho\sigma} L.$$

De Lagrangefuncties in beide gevallen waren:

$$(5) \quad (\text{Dirac}): 2L = \Phi \alpha_\rho \left[\frac{h}{2\pi i} \Psi_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \Psi \right] + \left[-\frac{h}{2\pi i} \Phi_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \Phi \right] \alpha_\rho \Psi + m c \Phi \alpha_4 \Psi$$

$$(6) \quad (\text{Schroed.}): L = \left[-\frac{h}{2\pi i} \Phi_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \Phi \right] \left[\frac{h}{2\pi i} \Psi_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \Psi \right] + m^2 c^2 \Phi \Psi.$$

Ook hier kan men de uitdrukkingen voor Diracs vergelijkingen krijgen, door overal, waar produkten van snelheden bij Schroedinger staan, deze te vervangen door het produkt van de mikroskopiese en makroskopiese snelheden. (Vgl. blz. 25).

Echter gaat hierbij een bevredigende eigenschap van Schroedingers uitdrukking verloren, bij Dirac is $S_{\rho\sigma}$ niet symmetries. Men kan haar echter gemakkelijk symmetriseren¹⁾.

¹⁾ Dr. Casimir wees mij op de artikelen van Tetrode, Zeits. f. Phys. 49, S. 858; 50, S. 335, 1928 en van Heisenberg en Pauli, Zeits. f. Phys. 56, S. 1, 1929, waar langs andere weg dezelfde uitdrukking voor energie-impulstensor, als (30.4) afgeleid is. Tetrode bespreekt tevens uitvoerig de symmetriseringsmogelijkheid.

HOOFDSTUK V

ZWAARTEPUNTSSTELLING

§ 1. Bewijs met behulp van Diracs vergelijking.

Prof. Ehrenfest heeft voor het geval van uitsluitend elektrostatiese krachten de belangrijke stelling afgeleid¹⁾:

In de golfmechanika beweegt zich het zwaartepunt van een golfpakket zoals een materieel punt zich in de klassieke mechanika zou bewegen, indien daarop als kracht werkte, het gemiddelde van alle krachten, genomen over het gehele golfpakket.

Voor het bewijs van deze stelling wordt gebruik gemaakt van

1°. De golfvergelijking van Schrödinger.

2°. De voorwaarde, dat Φ en Ψ aan de grenzen verdwijnen.

Met behulp van de vergelijkingen van Dirac laat zich de stelling even eenvoudig bewijzen voor geheel algemeen elektromagnetiese velden. Bij deze stelling komt ook het verschillend karakter van de makroskopiese en de mikroskopiese snelheid heel duidelijk naar voren; bovengenoemde stelling geldt voor de eerste. Daarentegen zal in de uitdrukking voor de Lorentzkracht, die in de uitkomst optreedt, de momentane, dus mikroskopiese snelheid voorkomen.²⁾

Afleiding:

De vergelijkingen van Dirac zijn:

$$(1) \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{2\pi i}{h} eV \Psi + c \sum_1^3 \alpha_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} - \frac{2\pi ie}{h} \sum_1^3 A_k \alpha_k \Psi + \frac{2\pi i}{h} mc^2 \alpha_4 \Psi.$$

¹⁾ P. Ehrenfest, Zeits. f. Phys. 45, S. 455, 1927.

²⁾ Nadat dit resultaat afgeleid was, kregen wij kennis van een artikel van N. Sen, Zeits. f. Phys. 68, S. 267, 1931, die tot eenzelfde konklusie komt.

$$(1) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} = +\frac{2\pi i}{h} eV \Phi + c \sum_1^3 \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \alpha_k + \frac{2\pi ie}{h} e \sum_1^3 A_k \Phi \alpha_k - \frac{2\pi i}{h} mc^2 \Phi \alpha_4.$$

Hieruit volgt:

$$(2) \quad \frac{d(\Phi\Psi)}{dt} = c \sum_1^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\Phi \cdot \alpha_k \cdot \Psi).$$

De x -koördinaat van het zwaartepunt van het golfpakket is gedefinieerd door

$$(3) \quad Q_1 = \int d\tau \cdot \Phi \cdot x \cdot \Psi; \quad (d\tau = d_x \cdot d_y \cdot d_z).$$

De integratie moet genomen worden over het gehele gebied, waarvoor de differentiaalvergelijking geldt.

Neem van (4) de afgeleide naar de tijd

$$(4) \quad \dot{Q}_1 = \int d\tau \cdot x \cdot \frac{d}{dt} (\Phi \cdot \Psi);$$

Substitutie van (2) en partiële integratie voeren dit over in

$$(5) \quad \dot{Q}_1 = - \int d\tau \cdot \Phi \cdot c \cdot \alpha_1 \cdot \Psi.$$

Op deze wijze krijgen we de z.g. mikroskopiese snelheid van het zwaartepunt, die de eigenwaarde c heeft. Dus het zwaartepunt van het golfpakket beweegt zich ieder ogenblik met de snelheid c = lichtsnelheid. Er kan echter bewezen worden¹⁾, dat deze beweging niet zuiver rechtlijnig is, maar een rechtlijnige, gekombineerd met een oscillatoriese beweging. Deze rechtlijnige component noemen we de makroskopiese snelheid. Voor deze geldt de klassieke betrekking tussen impuls en snelheid.

¹⁾ Schrödinger, Sitzungsberichte Preuss. Akad. Berlin, 1930, S. 418.

Voor $-c \cdot \Phi \cdot \alpha_k \cdot \Psi$ gebruiken we de afkorting v , dus:

$$\dot{Q}_k = \int d\tau \cdot v_k.$$

De x -komponent van de makroskopiese snelheid is

$$(1) \quad u_1 = \frac{1}{m} \left(P_x - \frac{e}{c} \bar{A}_x \right),$$

waar

$$(2) \quad P_x = \frac{h}{2\pi i} \int d\tau \cdot \Phi \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{h}{4\pi i} \int d\tau \left(\Phi \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Psi \right)$$

en

$$(3) \quad \bar{A}_x = \int d\tau \cdot \Phi \cdot A_x \cdot \Psi.$$

De versnelling berekenen we met behulp van $\dot{P}_x$ en $\dot{\bar{A}}_x$. Na partiële integratie is:

$$(4) \quad \begin{aligned} \dot{P}_x &= \frac{h}{2\pi i} \int d\tau \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \right) = \\ &= \int d\tau \left[e \cdot V \cdot \frac{\partial (\Phi \Psi)}{\partial x} + e \sum_1^3 A_k \frac{\partial (\Phi \cdot \alpha_k \cdot \Psi)}{\partial x} \right] = \\ &= \int d\tau \cdot \left[-e \cdot \frac{\partial V}{\partial x} \cdot \Phi \cdot \Psi - e \sum_1^3 \frac{\partial A_k}{\partial x} \cdot \Phi \cdot \alpha_k \cdot \Psi \right]. \end{aligned}$$

(5)

$$\begin{aligned} \dot{\bar{A}}_x &= \int d\tau \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\Phi \cdot A_x \cdot \Psi) = \int d\tau \left[\Phi \cdot \frac{\partial A_x}{\partial t} \cdot \Psi + A_x \cdot \sum_1^3 \frac{\partial}{\partial x} (\Phi \cdot c \alpha_k \cdot \Psi) \right] = \\ &= \int d\tau \cdot \left[\Phi \cdot \frac{\partial A_x}{\partial t} \cdot \Psi - c \sum_1^3 \frac{\partial A_x}{\partial x_k} \cdot \Phi \cdot \alpha_k \cdot \Psi \right] \end{aligned}$$

De versnelling wordt:

$$\begin{aligned} (1) \quad \frac{1}{m} \left(\dot{P}_x - \frac{e \dot{\bar{A}}_x}{c} \right) &= \frac{1}{m} \int d\tau \cdot \left[\left(-\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} \right) \Phi \Psi + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{c} \sum_1^3 \left(\frac{\partial A_x}{\partial x_k} - \frac{\partial A_k}{\partial x} \right) \cdot \Phi \cdot c \cdot \alpha_k \cdot \Psi \right] = \\ &= \frac{e}{m} \int d\tau \cdot (E \cdot \Phi \cdot \Psi + H_y \cdot \Phi \cdot \alpha_3 \cdot \Psi - H_z \cdot \Phi \cdot \alpha_2 \cdot \Psi) = \\ &= \frac{e}{m} \int d\tau \cdot \left[E_x \cdot \Phi \cdot \Psi + \frac{1}{c} (H_z \cdot v_y - H_y \cdot v_z) \right] = \\ &= \frac{e}{m} \bar{E}_x + \frac{e}{mc} (H_z \cdot v_y - H_y \cdot v_z). \end{aligned}$$

Deze vergelijking is volkomen analoog aan de klassieke vergelijking, waar de kracht op een elektron in een elektromagnetisch veld gegeven is door

$$(2) \quad K_x = e E_x + \frac{e}{c} (H_z \cdot w_y - H_y \cdot w_z),$$

waar w_y en w_x dan de componenten van de snelheid van het elektron voorstellen.

Het produkt van massa en makroskopiese versnelling wordt dus gegeven door een gemiddelde kracht, van dezelfde vorm als de klassieke, mits men in de Lorentzkracht de momentane, mikroskopiese snelheid inzet¹⁾.

¹⁾ Dr. Casimir vestigde mijn aandacht op het volgende:

De makroskopiese snelheid kan men beschouwen als het tijdgemiddelde van de mikroskopiese. Neemt men echter het tijdgemiddelde van de aan de Lorentzkracht analoge term van (1), zo is niet te verwachten, dat deze zich alleen hierin van de uitdrukking in (2) onderscheidt, dat de mikroskopiese snelheid v door de makroskopiese vervangen wordt, maar tevens zal de werking van het magnetisch moment van het elektron voor de dag komen, daar de vergelijkingen van Dirac deze steeds vanzelf leveren. (Vgl. ook Schroedinger, l.c.).

§ 2. Bewijs met behulp van Schroedingers vergelijking.

Ook bij de golfvergelijking van de tweede orde laat zich het bewijs van Prof. Ehrenfest wel doorvoeren voor het geval er vektorpotentialen zijn, wanneer men uitgaat van de vergelijking in de vorm (20.1). Evenals deze alleen goed bruikbaar is voor het geval $\text{div } A = 0$, kan het bewijs slechts in dezelfde onderstelling worden doorgevoerd.

Hier hebben we geen onderscheid in mikroskopische en makroskopische snelheid, zodat de uitkomst nog minder afwijking van het klassieke geval vertoont. De beperking $\text{div } A = 0$ is echter niet te ontgaan, deze is een gevolg van de benaderde vorm der golfvergelijking. De enige golfvergelijking van de tweede orde, die niet aan deze beperking gebonden is, is vergelijking (20.3). Hiermee is echter het bewijs niet door te voeren, vanwege het optreden van de tweede afgeleide naar de tijd. Juist dit feit, dat bij gebruik van deze vergelijking het eenvoudige verband tussen klassieke klassieke mechanica en golfmechanica verloren gaat, schijnt mij een der ernstigste bezwaren tegen de opvatting als zou (20.3) de goede relativistische veralgemening der golfvergelijking zijn; de wenselijkheid, dat zij slechts de eerste afgeleide naar de tijd bevat, treedt hier klaar voor de dag.

Het bewijs voor verg. (20.1) gaat als volgt:

$$(1) \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{2\pi ie}{h} V \Psi - \frac{h}{4\pi im} \Delta \Psi + \frac{e}{mc} A \cdot \text{grad } \Psi - \frac{\pi \cdot i \cdot e^2}{hm \cdot c^2} |A|^2 \cdot \Psi$$

$$(2) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{2\pi ie}{h} V \Phi + \frac{h}{4\pi im} \Delta \Phi + \frac{e}{mc} A \cdot \text{grad } \Phi - \frac{\pi \cdot i \cdot e^2}{h \cdot m \cdot c^2} |A|^2 \cdot \Phi$$

$$(3) \quad \frac{\partial(\Phi\Psi)}{\partial t} = \frac{h}{4\pi im} (\Delta\Phi \cdot \Psi - \Phi \cdot \Delta\Psi) + \frac{e}{mc} \sum A_k \cdot \frac{\partial(\Phi\Psi)}{\partial x_k}$$

Berekenen we nu weer $\dot{Q}_x$ [gedefinieerd door (33.3)], zo krijgen we met (3), partiële integratie en $\text{div } A = 0$:

$$(4) \quad m\dot{Q}_x = \int d\tau \left[\frac{h}{4\pi i} \left(\Phi \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Psi \right) - \frac{e}{c} A_x \cdot \Phi \cdot \Psi \right] = P_x - \frac{e}{c} \bar{A}_x$$

In tegenstelling met het vorige geval krijgen we hier weer een betrekking tussen de afgeleide van de coördinaat van het zwaartepunt naar de tijd en de gemiddelde waarden van de impuls, die overeenkomt met de klassieke tussen snelheid en impuls. Voor de versnelling van het zwaartepunt is weer nodig $\dot{P}_x$ en $\dot{\bar{A}}_x$.

$$(1) \quad \dot{P}_x = \frac{h}{2\pi i} \int d\tau \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)$$

Na enig omrekenen (substitutie van (36.1) en (36.2), partieel integreren en $\text{div } A = 0$) ontstaat:

$$(2) \quad \dot{P}_x = \int d\tau \left[-e \frac{\partial V}{\partial x} \cdot \Phi \cdot \Psi + \frac{eh}{4\pi imc} \sum_1^3 \frac{\partial A_k}{\partial x} \left(\Phi \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} - \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \Psi \right) - \frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{\partial |A|^2}{\partial x} \cdot \Phi \cdot \Psi \right]$$

$$(3) \quad \dot{\bar{A}}_x = \int d\tau \left(A_x \frac{\partial(\Phi\Psi)}{\partial t} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \cdot \Phi \cdot \Psi \right)$$

Omrekening van de eerste term geeft:

$$(4) \quad \int d\tau \cdot A_x \cdot \frac{\partial(\Phi\Psi)}{\partial t} = \frac{h}{4\pi im} \sum_1^3 \frac{\partial A_x}{\partial x_k} \left(\Phi \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} - \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \cdot \Psi \right) - \frac{e}{mc} \sum_1^3 A_k \cdot \frac{\partial A_x}{\partial x_k} \cdot \Phi \cdot \Psi.$$

Daar:

$$(5) \quad \frac{\partial |A|^2}{\partial x} = \sum_1^3 A_k \cdot \frac{\partial A_x}{\partial x_k} = \sum_1^3 A_k \left(\frac{\partial A_k}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial x_k} \right)$$

is, volgt, zo we afkorten:

$$(6) \quad v_y = \frac{h}{4\pi im} \left(\Phi \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial y} - \frac{\partial \Phi}{\partial y} \cdot \Psi \right) - \frac{e}{c} \cdot A_y \cdot \Phi \cdot \Psi.$$

$$\begin{aligned}
 (1) \quad m \ddot{Q} &= e \int d\tau \left[\left(-\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} \right) \Phi \cdot \Psi + \frac{1}{c} \sum_1^3 \left(\frac{\partial A_k}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial x_k} \right) v_k \right] = \\
 &= e \cdot \overline{E_x} + \frac{e}{c} (\overline{v_y \cdot H_z} - \overline{v_z \cdot H_y}),
 \end{aligned}$$

dus van de gedaante der klassieke bewegingsvergelijkingen.

§ 3. Opmerking.

De boven afgeleide betrekkingen gelden voor ieder golfpakket dat aan de golfvergelijking voldoet. De optredende grootheden zijn alle gemiddelden, genomen over het beschouwde golfpakket. We kunnen op deze wijze aan het golfpakket een waarde voor verschillende fiesiese grootheden toekennen en dus over de plaats, de snelheid enz. van het golfpakket spreken, waaronder we dan zulke gemiddelde waarden verstaan. Aan de andere kant kan men nu ook het pakket juist door deze gemiddelde waarde van zulk een grootheid gekarakteriseerd denken, ter onderscheiding van andere golfpakketten, die een andere gemiddelde waarde voor deze grootheid geven. Hiervoor mogen alleen zulke grootheden gebruikt worden, waarvoor de waarschijnlijkheid, dat deze grootheid een andere, nogal veel van de gemiddelde waarde afwijkende waarde aanneemt, zeer veel kleiner is, dan dat zij de gemiddelde waarde zelf aanneemt. Anders is het niet geoorloofd deze gemiddelde waarde als karakteristiek voor zo'n pakket te beschouwen. Deze grootheid is dan te onbepaald bij dit golfpakket.

Het hangt van de bouw van het golfpakket af, voor welke grootheid wij niet te veel risico nemen, als we haar waarde vervangen door de gemiddelde waarde. Hebben we een elektron, waarvan we vrij goed het moment kennen, zo moeten we, daar de kwantengetallen het moment vastleggen, het voorstellen door een golfpakket, dat maar uit „weinig” eigenfuncties opgebouwd is, die alle in de buurt van de gemiddelde waarde hun kwantengetallen hebben. Zijn er geen vektorpotentialen, dan is de snelheid ook voldoende scherp bekend. Zulke golfpakketten moeten we dus nemen bij vraagstukken, waarin de beweging van het elektron gevraagd wordt. Voor een vraagstuk over de ligging, is een sterk gekon-

centreerd golfpakket noodzakelijk, dus een, dat uit zeer vele eigenfuncties opgebouwd is, dus dan is het moment onbepaald.

Zijn er wel vektorpotentialen aanwezig, dan kunnen we de beweging van een elektron niet door een enkele eigenfunctie voorstellen, daar krachtens (37.6) de snelheid zowel van de gemiddelde waarde van het moment als van de coördinaten afhangt. We moeten er dan het beste van maken, door een golfpakket te nemen, dat een zekere uitgebreidheid geeft, zodat het moment niet geheel onbepaald behoeft te zijn, terwijl ook de onbepaaldheid in de ligging niet groot is.

HOOFDSTUK VI

TRANSFORMATIE VAN DE ELEKTROMAGNETIESE POTENTIALEN. IJKINVARIANTIE.

§ 1. Ijkinvariantie.

Weyl¹⁾ heeft erop gewezen, dat de golfvergelijking in haar relativistische gedaante tegenover een gelijktijdige transformatie van de potentiaal en eigenfunctie invariant is. Daar deze transformatie in de laatste tijd in de litteratuur meer toegepast wordt (Landau en Teller²⁾ in hun verhandelingen over het diamagnetisme van vrije elektronen; Peierls, Ann. der Phys. 10, S. 97, 1931), zullen we haar hier met de onmiddellijk eruit af te leiden gevolgen weergeven.

De ijkinvariantie legt een verbinding tussen het elektromagnetische veld en het veld der materiegolven. In het elektromagnetische veld is de Viererpotentiaal slechts bepaald tot op een gradient van een willekeurige reële funktie, want de grootheden van het elektromagnetische veld

$$f_{\rho\sigma} = \frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\rho} - \frac{\partial A_\rho}{\partial x_\sigma},$$

veranderen niet, zo we de componenten der potentiaal A_ρ vervangen door:

$$(1) \quad A'_\rho = A_\rho + \frac{c}{e} \frac{\partial \lambda(x_0, x_1, x_2, x_3)}{\partial x_\rho}.$$

(Met het oog op latere toepassing hebben we de faktor $\frac{c}{e}$ uit λ uitgenomen.)

Door deze andere keus der potentiaalkomponenten ondergaat de

¹⁾ H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, 1e dr., Leipzig 1928, S. 89.

²⁾ Zie noot 1 op blz. 62.

fiesiese toestand geen wijziging. De golfvergelijking geeft ons echter wel andere golffunkties, omdat in de golfvergelijkingen juist de potentialen, niet de veldsterkten voorkomen. De golf-funktie behorende bij deze andere potentialen, beschrijft dus dezelfde toestand als de vroegere golffunktie, behorend bij de eerste keus der potentialen.

Het verband nu tussen de oude en nieuwe golffunktie is gemakkelijk aan te geven, n.l.: bij de potentiaalkomponenten A'_ρ (zie 40.1) behoort de golffunktie

$$(1) \quad \Psi' = e^{\frac{2\pi i \lambda}{h}} \cdot \Psi$$

als Ψ de oude golffunktie voorstelt behorende bij A_ρ . Immers Ψ' moet voldoen aan

$$(2) \quad \sum_0^3 \left[\left(p_\rho - \frac{e}{c} A'_\rho \right)^2 - m^2 c^2 \right] \Psi' = 0 \quad (\text{Schroedinger})$$

of

$$(3) \quad \sum_0^3 \left[\alpha_\rho \left(p_\rho - \frac{e}{c} A'_\rho \right) - \alpha_4 \cdot m_0 c \right] \Psi' = 0; \quad (\text{Dirac})$$

Substitutie van

$$p_\rho = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_\rho}, \quad (40.1) \text{ en } (41.1)$$

voert de term

$$\left(p_\rho - \frac{e}{c} A'_\rho \right) \Psi'$$

over in

$$(4) \quad \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_\rho} - \frac{e}{c} A'_\rho - \frac{\partial \lambda}{\partial x_\rho} \right) e^{\frac{2\pi i \lambda}{h}} \cdot \Psi = e^{\frac{2\pi i \lambda}{h}} \cdot \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_\rho} + \frac{\partial \lambda}{\partial x_\rho} - \frac{e}{c} A'_\rho - \frac{\partial \lambda}{\partial x_\rho} \right) \cdot \Psi = e^{\frac{2\pi i \lambda}{h}} \cdot \left(p_\rho - \frac{e}{c} A'_\rho \right) \Psi.$$

Dit in (41.2), resp. (41.3) ingezet geeft:

$$(1) \quad e^{\frac{2\pi i \lambda}{h}} \cdot \left[\sum_0^3 \left(p_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \right)^2 - m^2 c^2 \right] \Psi = (0); \quad (\text{Schr.})$$

$$(2) \quad e^{\frac{2\pi i \lambda}{h}} \cdot \left[\sum_0^3 \left(p_\rho - \frac{e}{c} A_\rho \right) \alpha_\rho - \alpha_4 m_0 c \right] \Psi = 0; \quad (\text{Dirac})$$

dus Ψ moet aan de oude golfvergelijking voldoen, q.e.d. Men kan zeggen:

Een andere keus der Viererpotential dwingt ook tot een andere keus der golfkunties, m. a. w. alle natuurwetten moeten invariant zijn tegen gelijktijdige vervanging van

$$A_\rho \text{ door } A_\rho + \frac{c}{e} \frac{\partial \lambda}{\partial x_\rho} \quad \text{en } \Psi \text{ door } e^{\frac{2\pi i \lambda}{h}} \cdot \Psi^1).$$

§ 2. Gevolgtrekkingen.

Deze transformatie heeft de volgende eigenschappen:

$$\text{I: } p_\rho \text{ gaat over in } p_\rho + \frac{\partial \lambda}{\partial x_\rho}$$

dus als λ ook de tijd bevat, verandert de energie bij deze transformatie, hetgeen ook te verwachten was, daar de skalare potentiaal ook een verandering ondergaat, en zelfs tijdsafhankelijk worden kan.

¹⁾ Men zal zich bijna steeds beperken tot funkties λ zoodanig, dat

$$(3) \quad \sum \frac{\partial^2 \lambda}{\partial x_\rho^2} = 0,$$

opdat de divergentievoorwaarde $\sum \frac{\partial A_\rho}{\partial x_\rho} = 0 = 0$ niet teloor ga.

Prakties toegepast is vrijwel alleen het geval $\lambda = \frac{e}{c} (ay - bx)$, bij een homogeen magneetveld in de z -richting; deze transformatie geeft hetzelfde als een verschuiving van de oorsprong van het koördinatenstelsel naar $x = a$, $y = b$. (Landau, Teller, Peierls, zie boven). Verg. (10.2).

II: Is Ψ_n een eigenfunctie in het oude stelsel (A_ρ en Ψ), dan voldoet Ψ'_n aan de eigenwaarde-vergelijking in het nieuwe stelsel (A'_ρ en Ψ'). Voldoet zij ook aan de randvoorwaarden? Dat hangt van deze zelf af. Is nul worden of eindig blijven voorgescreven, dan wel; is er echter een periodiciteitseis (Bloch), b.v. $\Psi_n(x+a) = \Psi_n(x)$, dan is nog niet $\Psi'_n(x+a) = \Psi'_n(x)$. Dit is alleen het geval, zo

$$\lambda(x+a) = \lambda(x) + k \cdot 2\pi; \quad (k = \text{geheel getal}).$$

III: De matrixelementen behoeven in het oude en nieuwe stelsel niet dezelfde te zijn. Wel die van grootheden, welke een funktie van x alleen zijn. De matrixelementen van een $f(p, x)$ in het oude stelsel zijn:

$$(1) \quad f_{nm} = \int d\tau \cdot \Phi_m \cdot f(x, p_x) \Psi_n,$$

waar in f onder het integraalteken voor p de differentiaaloperator (15.2) gesubstitueerd is. In het nieuwe stelsel zijn de matrixelementen:

$$(2) \quad f'_{nm} = \int d\tau \cdot \Phi'_m \cdot f(x, p) \Psi'_n = \int d\tau \cdot \Phi_m \cdot f\left(x, p + \frac{\partial \lambda}{\partial x}\right) \Psi_n;$$

We hebben dus 2 verschillende matrices, die dezelfde „waarneembare“ (= „observable“) p_ρ representeren, n.l.:

$$(3) \quad \int d\tau \Phi_m \cdot \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_\rho} + \frac{\partial \lambda}{\partial x_\rho} \right) \Psi_n \text{ en } \int d\tau \Phi_n \cdot \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_\rho} \Psi_n$$

terwijl de matrix voor de koördinaten in beide gevallen dezelfde blijft. We hebben hier te doen met een fase-onbepaaldheid, die in de kwantenmechanika overal optreedt. (Vgl. Dirac, Quantum Mechanics, p. 34¹⁾).

¹⁾ In een onlangs verschenen artikel (Proc. Royal Soc. London, A 133, p. 60, 1931) heeft Dirac aangetoond: 1e. de fase-onbepaaldheid is gelijkwaardig met de onbepaaldheid in de keuze der potentialen; 2e. in tegenstelling met de klassieke theorie van het elektromagnetisme sluit de kwantentheorie het bestaan van vrije magneetpolen niet uit; 3e. de lading van zo'n magneetpool is steeds een veelvoud van een elementaire magnetiese lading; 4e. tussen de elementaire mag-

IV: De uitdrukkingen voor lading en stroom gaan zeer regelmatig in elkaar over, zowel bij Dirac als bij Schrödinger-Klein.

Substitutie van (40.1; 41.1) voert

$$(1) \quad J_x = \frac{e}{m} \left[\frac{h}{4\pi i} \left(\Phi \frac{\partial \Psi'}{\partial x} - \frac{\partial \Phi'}{\partial x} \Psi' \right) - \frac{e}{c} A'_x \right]$$

over in

$$(2) \quad J_x = \frac{e}{m} \left[\frac{h}{4\pi i} \left(\Phi \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Phi}{\partial x} \Psi \right) - \frac{e}{c} A_x \right].$$

Voor de stroomuitdrukking van Dirac is het bewijs eveneens eenvoudig.

§ 3. Voorbeeld.

Ter illustratie, hoe we bij verschillende keus der potentialen langs verschillende wegen toch tot hetzelfde resultaat komen, behandelen we golfmechanies het volgende geval: Een een-dimensionaal elektronengas, dat bij afwezigheid van een elektrisch veld aan de Maxwell-verdeling gehoorzaamt, wordt aan een elektrisch veld F onderworpen. De wisselwerking der elektronen wordt niet beschouwd. Ook zij er geen weerstand.

Vraag: Wat is op ieder tijdstip de resulterende stroom?

Het antwoord moet natuurlijk luiden: $\frac{Ne^2 F t}{m}$, als N het aantal elektronen is, zoals gemakkelijk af te leiden is.

Golfmechanies wordt de toestand van het gas beschreven door

$$(3) \quad \Psi = \int d\xi \cdot c(\xi, t) \cdot e^{\frac{2\pi i (\xi x - E(\xi) t)}{h}}.$$

netiese lading en de elementaire elektrische lading (lading van een elektron) bestaat het verband: $m = \frac{137}{2} e$.

Het onder 2e genoemde leidt hij af uit het feit, dat de ijkfactor $e^{\frac{2\pi i \lambda}{h}}$ (zie form. 41.1) geen verandering ondergaat, als λ met een geheel aantal malen h toeneemt, hetgeen een verdere onbepaaldheid veroorzaakt.

De c 's zijn zo genormeerd, dat $\int d\xi |c(\xi)|^2 = N$, het aantal partikels. Neem aan: op $t=0$ is de verdeling die van Boltzmann, dus:

$$(1) \quad |c(\xi, 0)|^2 = A e^{-\beta E(\xi)} \quad \left(\beta = \frac{1}{kT} \right).$$

De storingsfunctie is $-eFx$, de verandering der bezetting wordt dan gegeven (zie 18.2) door:

$$(2) \quad \dot{c}(\xi, t) = +2\pi i e \frac{F}{h} \int d\xi' x(\xi, \xi') \cdot c(\xi', t).$$

Daar $x(\xi, \xi') = \delta'(\xi - \xi') \cdot \frac{h}{2\pi i}$, waar δ' de afgeleide van Diracs deltafunctie (Dirac, l.c. § 22, § 34) is, is

$$(3) \quad \dot{c}(\xi, t) = -eF \cdot \frac{\partial c(\xi, t)}{\partial \xi}; \quad \frac{d|c(\xi, t)|^2}{dt} = -eF \cdot \frac{\partial |c(\xi, t)|^2}{\partial \xi}.$$

Voor t zeer klein mogen we in het rechterlid van (3) voor c de functie substitueren, die bij afwezigheid van de storing bestaat, dus $c(\xi, 0)$, welke tijdsafhankelijk is. Hieruit volgt:

$$(4) \quad |c(\xi, t)|^2 = |c(\xi, 0)|^2 - eF \cdot t \cdot \frac{\partial |c(\xi, 0)|^2}{\partial \xi}.$$

De stroom wordt volgens (44.1), en omdat de eerste term in het 2e lid van (4) geen bijdrage levert:

$$(5) \quad -\frac{e}{m} \int d\xi \cdot \xi \cdot Ft \cdot \frac{\partial |c(\xi, 0)|^2}{\partial \xi} = \frac{e^2 Ft}{m} \int d\xi \cdot |c(\xi, 0)|^2 = \frac{e^2 Ft N}{m}$$

zoals te verwachten was.

Is het elektrische veld afkomstig niet van de skalare potentiaal $-Fx$, maar van de vektorpotentiaal $-cFt$, zo kunnen we dit geval tot het vorige terugbrengen door gebruik te maken van de „Eichinvarianz”, waarbij

$$(6) \quad \lambda = -e \cdot F \cdot t \cdot x,$$

welke $V = -Fx$ overvoert in $A = -cFt$. Voor de stroom blijft dan de uitdrukking (5) bestaan.

Gaan we direkt van de vektorpotential uit, zo is de storings-funktie:

$$(1) \quad + \frac{1}{m} eFtp + \frac{1}{2} \frac{e^2 \cdot F^2 \cdot t^2}{m}.$$

De matrixelementen worden, afgezien van de faktor $\frac{1}{m}$:

$$eFt \cdot \xi \cdot \partial (\xi - \xi') + \frac{1}{2} e^2 \cdot F^2 \cdot t^2 \cdot \partial (\xi - \xi'),$$

dus:

$$(2) \quad \frac{\partial c(\xi, t)}{\partial t} = \frac{2\pi i}{\hbar m} \{ eFt \cdot \xi \cdot c(\xi, t) + \frac{1}{2} e \cdot F \cdot t \cdot c(\xi, t) \}$$

en:

$$(3) \quad \frac{\partial c^*(\xi, t)}{\partial t} = - \frac{2\pi i}{\hbar m} \{ eFt \cdot \xi \cdot c^*(\xi, t) + \frac{1}{2} e \cdot F \cdot t \cdot c^*(\xi, t) \}.$$

Uit (3) en (4) volgt:

$$(4) \quad \frac{\partial |c(\xi, t)|^2}{\partial t} = 0$$

dus: *bij inductie ondergaat de bezetting der verschillende kwanten-toestanden geen verandering!* Hieraan zien we duidelijk dat de kwantengetallen bij aanwezigheid van vektorpotentialen meer direkt met de momenten dan met de snelheden verbonden zijn, immers, zoals al uit het bovenstaande gebleken is, is er wel degelijk een stroom. Deze komt bij gebruik van de uitdrukking voor J (44.2) voort uit de laatste term

$$(5) \quad - \frac{e^2}{mc} A \cdot \Phi \cdot \Psi = \frac{e^2 F t}{m} \int \partial \xi \cdot |c(\xi, t)|^2 = \frac{e^2}{m} \cdot F \cdot t \cdot N,$$

terwijl de eerste term van (44.2), die bij de skalaire potentiaal de stroom leverde, hier wegens (4) geen bijdrage geeft.

In de klassieke theorie behoeften we er ons niet om te bekommeren, of het veld een gevolg was van inductie, dan wel van een skalaire potentiaal, omdat we daar direkt met de veldsterkte rekenen, terwijl

in de golfmechanika beide gevallen nogal uitleenlopen, al voeren ze ook tot hetzelfde resultaat. Door de „Eichinvarianz” kunnen we beide gevallen steeds met elkaar verbinden.

Voor vragen over elektriciteitsgeleiding is een nadeel voor het rekenen met inductie, dat de verandering der snelheidsverdeling veel gekompliceerder is dan die der c 's, welke laatste direkt uit de grondformules der golfmechanika volgt. Bij de elektrostatiese potentiaal bestaat deze moeilijkheid niet.

HOOFDSTUK VII

HET „VERKEERD” LOPEN DER ELEKTRONEN IN EEN PERIODIEK KRACHTVELD ONDER INVLOED VAN EEN MAGNEETVELD (PEIERLS)

§ 1. Elektronen in een kristalrooster.

De „Eichinvarianz” wordt ook gebruikt bij de afleiding van de beweging der elektronen in een kristalrooster bij aanwezigheid van een uitwendig magneetveld. De in dit hoofdstuk weer te geven behandeling is hoofdzakelijk afkomstig van Dr. Peierls, ze is ontstaan naar aanleiding van enige vragen, die we hem schriftelijk gesteld hadden over zijn artikel in Zeitsch. f. Physik 53, S. 255, 1929 (l.c.). We danken Dr. Peierls zeer voor de welwillendheid, waarmee hij ons voortdurend vragen beantwoord heeft.

Het resultaat is zeer opmerkelijk. In sommige gevallen is het mogelijk, dat een elektron in het kristal onder invloed van een magneetveld juist tegengesteld versneld wordt, als bij geheel vrije elektronen het geval is. Door toepassing van de Fermi-statistiek leidt Peierls (l.c.) hieruit de mogelijkheid van het anormale Hall-effekt af, waarvoor de klassieke theorie der elektriciteitsgeleiding geen verklaring geven kon.

De betrouwbaarheid van het resultaat is zeer verstevigd geworden door een onlangs verschenen artikel van Heisenberg¹⁾, welke aantoont: Het gedrag van een met negatieve elektronen gedeeltelijk bezette groep van kwantenbanen is hetzelfde als wanneer in dezelfde groep alleen de nog onbezette banen met positief geladen elektronen bezet waren.

¹⁾ W. Heisenberg, Ann. der Physik, 10, S. 888, 1931.

De hier te geven afleiding geschiedt voor een sterk gebonden elektron; één punt in de afleiding verdient nog nader onderzoek. De z -komponent wordt steeds weggelaten in de berekening.

Het kristal wordt voorgesteld door het model, dat door Bloch gebruikt is¹⁾. Het gehele, kubies symmetries gedachte, fiesiese systeem bezit een periodiciteit, m. a. w. alle eigenschappen zijn periodiek, met een periode aG , waar a de atoomafstand en G het aantal atomen in een koördinaatrichting voorstelt. Dit periodeblok herhaalt zich voortdurend. De eigenfuncties hebben alle de gedaante:

$$(1) \quad \frac{1}{S} \cdot e^{\frac{i}{a}(\xi x + \eta y)} \cdot u_{\xi\eta}(x, y),$$

waar

$$(2) \quad \xi = \frac{2\pi k}{G}; \quad \eta = \frac{2\pi l}{G};$$

k en l zijn gehele getallen, terwijl $u_{\xi\eta}(x, y)$ een funktie is, die in x en y periodiek is met de periode a ; $u_{\xi\eta}$ verandert slechts langzaam met ξ en η . S is de inhoud van één periodeblok.

Onder deze omstandigheden zijn de matrixelementen van x en p gemakkelijk te berekenen; p^x is een diagonaal matrix, met elementen $p_{\xi\eta, \xi'\eta'}^x = p_{\xi\eta}^x \delta_{\xi\xi'} \delta_{\eta\eta'}$, voor p^y geldt hetzelfde: $p_{\xi\eta, \xi'\eta'}^y = p_{\xi\eta}^y \delta_{\xi\xi'} \delta_{\eta\eta'}$, terwijl

$$(3) \quad \sum_{\xi} x_{\xi\xi'} \cdot c(\xi') = ia \frac{\partial c(\xi)}{\partial \xi}.$$

Voor G zeer groot is ξ prakties kontinu.

(Waar dit geen verschil oplevert, rekenen we eendimensionaal!)

In het geval van sterk gebonden elektronen kan men de eigenfuncties bij afwezigheid van uitwendige velden schrijven:

$$(4) \quad \psi_{\xi\eta}(x, y) = \sum_{g_1=-\infty}^{\infty} \sum_{g_2=-\infty}^{\infty} e^{i(\xi g_1 + \eta g_2)} \cdot \omega(x - ag_1, y - ag_2)$$

waar $\omega(x - ag_1, y - ag_2)$ de eigenfunctie voorstelt van het ge-

¹⁾ Bloch, Zeits. f. Physik. 52, S. 555, 1928.

²⁾ Zie voor de afleiding noot 1, blz. 69, aanhangsel.

isoleerd gedachte atoom, dat zich op de plaats $x = ag_1$, $y = ag_2$ bevindt. Verg. Bloch, l.c., form. 21. Het is gemakkelijk te zien, dat (49.4) de vorm (49.1) heeft.

De oorsprong van ons coördinatenstelsel zij in het midden van een periodeblok. De bij de toestand ξ, η , behorende snelheid is volgens (22.2):

$$(1) \quad v_{\xi\eta}^x = C' \sum_{g_1, g_2} \sum_{h_1, h_2}^{\infty} \sin \left[\xi (h_1 - g_1) + \eta (h_2 - g_2) \right] \int dx \cdot dy \cdot \omega_{g_1 g_2} \cdot \frac{\partial \omega_{h_1 h_2}}{\partial x}$$

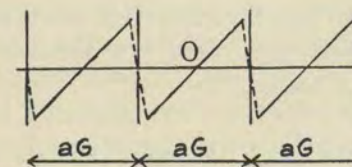
waar $\omega_{g_1 g_2} = \omega(x - ag_1, y - ag_2)$, en C' een konstante is. Uit-rekening van (2) geeft (zie Bloch, l.c.):

$$(2) \quad v_{\xi\eta}^x = C \cdot \sin \xi; \quad v_{\xi\eta}^y = C \cdot \sin \eta; \quad C \text{ is een konstante.}$$

Om golfmechanies de storing door uitwendige krachtvelden te kunnen behandelen, is het noodzakelijk, dat de storingsfunctie ontwikkelbaar is naar de eigenfuncties van het ongestoorde systeem, m.a.w. dat de storingsfunctie ook periodiek is met de periode aG . Dit is ook uit volgende grond noodzakelijk: Nemen wij als storingsfunctie b.v. de elektrostatische potentiaal $-Fx$ (homogeen elektrisch veld) of de vektorpotentiaal $A_x = -\frac{1}{2}Hy$, $A_y = \frac{1}{2}Hx$, $A_z = 0$ (homogeen magnetisch veld in de z -richting) zo wordt voor grote waarden van x of y de storingsterm in de golfvergelijking (bovenstaande potentiaal maal de golf functie) ook heel groot, zodat deze term zelfs overheersend wordt. Het nemen van een golfpakket, dat alleen in de omgeving van de oorsprong prakties van nul verschillend is (Heisenberg), is onmogelijk, daar dit golfpakket op de overeenkomstige gebieden in de andere periodeblokken eveneens van nul verschillend is, dus ook in ver verwijderde blokken, waarin de coördinaten zeer grote waarden hebben. De potentialen mogen dus niet onbegrensd aangroeien met toenemende waarden van de coördinaten. We nemen ze daarom periodiek met de periode aG , dus in het geval van:

$$(3) \quad \begin{aligned} \text{elektrostatische storing: } V &= -F(x - n_1 aG) \\ \text{magnetische storing: } A_x &= -\frac{1}{2}H(y - n_2 aG); \\ A_y &= \frac{1}{2}H(x - n_1 aG), \end{aligned}$$

waar n_1, n_2 aangeven in welk periodeblok we ons bevinden. De skalare potentiaal ziet er dus uit als getekend. Bij deze keus der potentialen is het veld niet homogeen meer, gemiddeld over de ruimte is het veld nul, de gemiddelde versnelling moet dan ook nul zijn! Voor een bevredigende behandeling van de geleiding in metalen is dit model dus *eigenlijk ongeschikt*.



Een rationele vraag, overeenkomstig de praktische verhoudingen, blijft echter: Gegeven: een elektron (golfpakket) bevindt zich op het opgaand deel van de potentiaal, hoe verandert hiervan de beweging gedurende een korte tijd? Dit elektron kunnen we nu beschouwen als zich bewegend in een homogeen veld.

§ 2. Kristalelektronen bij aanwezigheid van een homogeen uitwendig magnetisch veld. Afleiding der snelheidsuitdrukking.

De berekening van de bewegingsverandering van een elektron in een magnetisch veld bestaat uit twee stukken:

- I. Afleiding van de snelheidsuitdrukking voor het golfpakket in het veld.
- II. Afleiding der bewegingsvergelijkingen voor zo'n pakket.

Voor I gaan we weer uit van sterk gebonden elektronen. We moeten hierbij niet vergeten, dat niet alleen de snelheidsuitdrukking $\frac{p}{m}$ overgaat in $\frac{1}{m} \left(p - \frac{e}{c} A \right)$, bij aanwezigheid van de vektorpotentialen (50.3), maar ook de eigenfuncties der atomen, die niet bij de oorsprong liggen, worden gestoord. Deze storing is met behulp van de „Eichinvarianz” gemakkelijk te formuleren. De ongestoorde eigenfunctie zij voorgesteld door $\omega_{g_1 g_2}$, de gestoorde door $\Omega_{g_1 g_2}$. Ligt het atoom vlak bij de oorsprong, zo is de storing vanwege de

kleinheid der coördinaten zo gering, dat we hier voor $\Omega_{g_1 g_2}$ de ongestoorde functie $\omega_{g_1 g_2}$ nemen mogen. Voor elk ander atoom geldt dit, als we werkten in een coördinatenstelsel, dat het beschouwde atoom tot oorsprong had. Dus voor een vektorpotentiala, die in ons eerst genomen coördinatenstelsel de vorm heeft

$$(1) \quad A_x = -\frac{1}{2} H (y - ag_2); \quad A_y = \frac{1}{2} H (x - ag_1)$$

welke vektorpotentiala ons hetzelfde veld geeft als (50.3). Nu is (50.3) uit (1) te verkrijgen door een vervanging van de vorm (40.1) zo we voor λ nemen:

$$(2) \quad \lambda = \frac{1}{2} \frac{e}{c} \cdot H \cdot (y \cdot g_1 - x \cdot g_2) a;$$

Daar nu $\omega_{g_1 g_2}$ de eigenfunctie van het atoom g_1, g_2 is bij aanwezigheid van de vektorpotentiala (1), wordt krachtens (41.1) $\Omega_{g_1 g_2}$, d.i. de eigenfunctie bij de potentiala (50.3), gegeven door

$$(3) \quad e^{i\alpha a (y \cdot g_1 - x \cdot g_2)} \cdot \omega_{g_1 g_2},$$

waar α een afkorting is:

$$(4) \quad \alpha = \frac{\pi e H}{h c};$$

De eigenfunctie van een elektron in het kristal wordt nu in analogie met (49.4) gegeven door:

$$(5) \quad \psi_{\xi\eta}(x, y) = \sum_{g_1=-\infty}^{\infty} \sum_{g_2=-\infty}^{\infty} e^{i[g_1(\xi + \alpha ay) + g_2(\eta - \alpha ax)]} \cdot \omega_{g_1 g_2}.$$

Voor de snelheidsuitdrukking moeten we hebben

$$\frac{h}{2\pi im} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{2mc} Hy).$$

Iedere term van (5) levert dus voor de snelheidsuitdrukking van één eigenfunctie de bijdrage:

$$(6) \quad e^{i[g_1(\xi + \alpha ay) + g_2(\eta - \alpha ax)]} \left(\frac{h}{2\pi im} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eH}{2mc} ag_2 + \frac{eH}{2mc} y \right) \omega(x - ag_1, y - ag_2).$$

Daar de atoom-eigenfunctie $\omega_{g_1 g_2}$ prakties alleen van nul verschillend is voor $x \sim ag_1, y \sim ag_2$, maken we slechts een kleine verwaarlozing, zo we de twee laatste leden van (52.6) tegen elkaar schrappen.

Om nu over de snelheid in de golfmechanika te kunnen spreken als in de klassieke theorie, moeten we krachtens de opmerking op blz. 39 in het magneetveld een elektron voorstellen door een golfpakket, dat vrij sterk gekoncentreerd is, terwijl ook de speling der kwantengetallen gering moeten zijn, daar anders de p 's, die uitsluitend van deze afhangen, weer te onbepaald worden. In het veldvrije geval is de snelheid van het elektron dan gegeven door de formule (50.2), mits we hierin ξ , resp. η vervangen door de gemiddelde waarden $\bar{\xi}$, $\bar{\eta}$, over het pakket.

In het veld krijgen we nu de uitdrukking:

$$(1) \quad v = C' \cdot \sum_{(\xi\eta)} c_{\xi\eta} \sum c_{\xi'\eta'} \iint dx \cdot dy \cdot \sum_{g_1} \sum_{g_2} \sum_{h_1} \sum_{h_2} \sin [(\xi + \alpha ay)(h_1 - g_1) + (\eta - \alpha ax)(h_2 - g_2)] \omega_{g_1 g_2} \cdot \frac{\partial \omega_{h_1 h_2}}{\partial x}.$$

Daar het golfpakket verdwijnt voor waarden van x en y , die sterk van de gemiddelde waarden $\bar{x}, \bar{y}$ afwijken, vervangen we in de sinus x en y door $\bar{x}, \bar{y}$. (In deze stap zit een element van willekeur). We krijgen zo voor de bijdrage van één eigenfunctie tot de snelheid van ons pakket:

$$(2) \quad C' \cdot \sum_{g_1} \sum_{g_2} \sum_{h_1} \sum_{h_2} \sin [(\xi + \alpha a \bar{y})(h_1 - g_1) + (\eta - \alpha a \bar{x})(h_2 - g_2)] \iint dx \cdot dy \cdot \omega_{g_1 g_2} \cdot \frac{\partial \omega_{h_1 h_2}}{\partial x}.$$

Deze uitdrukking is echter dezelfde als (50.1), behalve dat ξ , resp. η vervangen is door $\bar{\xi} + \alpha a \bar{y}$, resp. $\bar{\eta} - \alpha a \bar{x}$. We krijgen dus voor de snelheid van het golfpakket in een magneetveld:

$$(3) \quad \begin{aligned} v_x(\bar{x}, \bar{y}, \bar{\xi}, \bar{\eta}) &= C \sin(\bar{\xi} + \alpha a \bar{y}); \\ v_y(\bar{x}, \bar{y}, \bar{\xi}, \bar{\eta}) &= C \sin(\bar{\eta} - \alpha a \bar{x}). \end{aligned}$$

Het golfpakket is dus gekarakteriseerd door de coördinaten van het zwaartepunt $\bar{x}$, $\bar{y}$ en door de gemiddelde waarden der kwantengetallen $\bar{\xi}$, $\bar{\eta}$, evenals in de klassieke theorie de toestand van een elektron gegeven was door de coördinaten en de momentcomponenten.

§ 3. *Bewegingsvergelijking voor een kristalelektron in een magneetveld.*

II: Kunnen we nu ook een bewegingsvergelijking afleiden voor het golfpakket analoog aan de klassieke (zie 7.5):

$$(1) \quad \dot{x} = + \frac{eH}{mc} v_y, \quad \dot{y} = - \frac{eH}{mc} v_x.$$

De storing van de operator van Hamilton is:

$$(2) \quad \frac{eH}{2mc} (yp_x - xp_y) + \frac{1}{2m} \left(\frac{eH}{2c} \right)^2 (x^2 + y^2).$$

Neem nu een golfpakket, dat alleen in de omgeving van de oorsprong van nul verschillend is, dan kunnen we in de golfvergelijking de termen die van het tweede stuk van (2) komen weglaten, daar voor grote waarden van x en y de golffunctie de term klein maakt en voor kleine waarden de faktor $\left(\frac{e}{c}\right)^2$ gevoegd bij het optreden van x^2 en y^2 . Wilden we ons niet beperken tot een golfpakket bij de oorsprong, zo kunnen we de kwadratische termen verwaarlozen, als we H maar klein genoeg nemen, zodat in het gehele periodeblok de tweede term van (4) tegenover de eerste te verwaarlozen is. Het bij een om de oorsprong gekoncentreerd golfpakket verkregen resultaat laat zich echter door toepassing van de „Eichinvarianz” gemakkelijker generaliseren voor een golfpakket niet bij de oorsprong door een transformatie van de vorm (25.2). Het weglaten van de kwadratische term kan wel eens een ietwat geflatteerd resultaat geven, hetgeen bij Heisenbergs artikel wel heel duidelijk blijkt. In de bovengenoemde gevallen is het echter geoorloofd.

We hebben dus als storing van de golfvergelijking de term:

$$(3) \quad - \frac{eH}{2mc} (xp_y - y \cdot p_x) \psi.$$

De storingsvergelijking (18.2) voert, als we (49.3) substitueren, tot de volgende vergelijking voor de verandering der c 's onder invloed van een magneetveld:

$$(1) \quad \frac{dc(\xi, \eta)}{dt} = \frac{\pi ea H}{hmc} \left(p_{\xi\eta}^x \frac{\partial c(\xi, \eta)}{\partial \eta} - p_{\xi\eta}^y \frac{\partial c(\xi, \eta)}{\partial \xi} \right).$$

De verandering der waarschijnlijkheidsverdeling over de verschillende kwantentoestanden voor ons beschouwde golfpakket is nu:

$$(2) \quad \frac{d|c(\xi, \eta)|^2}{dt} = \frac{2\pi eHa}{2hmc} \left(p_{\xi\eta}^x \frac{\partial |c(\xi, \eta)|^2}{\partial \eta} - p_{\xi\eta}^y \frac{\partial |c(\xi, \eta)|^2}{\partial \xi} \right).$$

Voor ons golfpakket bij de oorsprong mogen we een kleine verwaarlozing maken door $p_{\xi\eta}$ te vervangen door mv , waar v de gemiddelde snelheid van ons pakket voorstelt. Dus:

$$(3) \quad \frac{d|c(\xi, \eta)|^2}{dt} = \frac{2\pi ea H}{2hc} \left(v_{\xi\eta}^x \frac{\partial |c(\xi, \eta)|^2}{\partial \eta} - v_{\xi\eta}^y \frac{\partial |c(\xi, \eta)|^2}{\partial \xi} \right).$$

Konfrontatie van deze vergelijking met die welke klassiek de verandering der momentenverdeling $n(p_x, p_y)$ voor vrije elektronen in een magneetveld geven zou:

$$(4) \quad \frac{dn(p_x, p_y)}{dt} = \frac{eH}{2c} \left(v_x \frac{dn}{dp_y} - v_y \frac{dn}{dp_x} \right)$$

laat zien, dat voor gebonden elektronen overal de kwantengetallen ξ , η de plaats van de componenten van het moment hebben ingenomen, m.a.w. de verandering der bezetting der kwantentoestanden geschiedt alsof de kwantengetallen aan de klassieke bewegingswetten onderworpen waren (Verg. 10.6):

$$\dot{\xi} = + \frac{2\pi a}{h} \frac{eH}{2c} v_y; \quad \dot{\eta} = - \frac{2\pi a}{h} \frac{e \cdot H}{2c} v_x$$

of, als we de afkorting (52.4) gebruiken:

$$(5) \quad \dot{\xi} = + \alpha \cdot a \cdot v_y; \quad \dot{\eta} = - \alpha \cdot a \cdot v_x.$$

(Uit de berekening bij een elektrisch veld volgt een soortgelijk resultaat, n.l.:

$$\dot{\xi} = a \frac{2\pi}{h} e \cdot F,$$

als F de veldsterkte in de x -richting is ¹⁾.)

Met behulp van (55.5) kunnen we nu de verandering der snelheid (53.3) van ons golfpakket berekenen.

$$\begin{aligned} (1) \quad \frac{dv(\bar{x}, \bar{y}, \bar{\xi}, \bar{\eta})}{dt} &= C \cdot \cos(\bar{\xi} + \alpha \bar{y}) \left(\frac{d\bar{\xi}}{dt} + \alpha \frac{d\bar{y}}{dt} \right) = \\ &= C \cdot \cos(\bar{\xi} + \alpha \bar{y}) (\alpha v_y + \alpha v_y) = C \cdot \cos(\bar{\xi} + \\ &+ \alpha \bar{y}) 2 \alpha v_y = C \cdot \cos(\bar{\xi} + \alpha \bar{y}) \frac{2\pi}{h} \frac{e}{c} H \cdot v_y \end{aligned}$$

en voor de y -komponent:

$$(2) \quad \frac{dv_y(x, y, \xi, \eta)}{dt} = -C \cdot \cos(\bar{\eta} + \alpha \bar{x}) \frac{2\pi}{h} \frac{e}{c} H \cdot v_x$$

Voor ons pakket om de oorsprong is $\bar{x}, \bar{y} = 0$ dus:

$$(3) \quad v_y = D \cdot \cos \bar{\xi} \cdot \frac{e}{c} H \cdot v_y; \quad v_y = -D \cdot \cos \bar{\eta} \cdot \frac{e}{c} H \cdot v_x.$$

Daar ξ en η hunne waarden tussen $-\pi$ en $+\pi$ hebben, kan de cosinus zowel positief als negatief zijn. Hieruit volgt: De invloed van een magneetveld op sterk gebonden kristalelektronen kan tegengesteld zijn aan die, welke het op vrije elektronen pleegt te hebben, n.l. voor $\bar{\xi} > \frac{1}{2}\pi$, $\bar{\eta} > \frac{1}{2}\pi$. M.a.w. het is alsof een elektron „verkeerd”, d.i. net omgekeerd als we naar de klassieke theorie verwachten zouden, loopt.

Peierls, l.c. en Heisenberg, l.c. hebben ook het gedrag van een verzameling van kristalelektronen, onderworpen aan de Fermi-statistiek, nagegaan en komen zo tot een verklaring van het anormale Hall-effekt.

§ 4. Opmerkingen.

Opm. I: Een belemmering voor het aanschouwelijk begrijpen van dit resultaat is, dat wij in het magneetveld genoodzaakt zijn

¹⁾ Verg. Bloch, l.c.

ons steeds van sterk gekoncentreerde golfpakketten te bedienen, van welke beweging we ons zo moeilijk een voorstelling kunnen maken. Bij een elektrisch veld, waar we voor de kristalelektronen ook een anomalie hebben, n.l. dat een elektron in het veld verlangzaamd in plaats van versneld worden kan, zijn we niet aan deze sterke concentratie gebonden, zodat we cum grano salis de beweging van een elektron door één eigenfunctie kunnen voorstellen. Door het elektrische veld gaat het elektron over naar eigenfuncties met grotere kwantengetallen. Echter kan het dan gebeuren, dat het elektron in een toestand komt, waarvan de golf in verband met de periodieke structuur van het kristal sterker teruggekaatst wordt, dan in de vroegere toestand het geval was (selektieve reflectie ¹⁾), zodat de voortbeweging van het elektron inderdaad geringer worden kan.

Opm. II. Aan welke vereisten moet het gebruikte golfpakket voldoen? ²⁾

1°. De ruimtelijke uitbreiding moet zo klein zijn, dat men voor het pakket om de oorsprong steeds de tweede term van (54.2) verwaarlozen kan t.o.v. de eerste, m.a.w. $\left(\frac{eH}{2mc}\right)x < v_y$, dus de speelruimte der coördinaten moet kleiner zijn dan $\frac{2cvm}{eH}$, welke grootheid de middellijn van de volgens klassieke theorie beschreven cirkel voorstelt (zie 11.1).

2°. De speelruimte der momenten is daardoor beperkt, dat voor kinetische problemen (b.v. geleiding) de bijbehorende onbepaaldheid in de energie zeer klein moet zijn vergeleken met kT . Aan de andere kant geldt $\Delta E \sim mv \cdot \Delta v > v \frac{h}{\Delta x}$. De voorwaarde onder 1°. geeft nu: $\Delta E > \frac{ehH}{2mc}$, dus is bovenstaande afleiding alleen gerechtvaardigd, zolang $\left(\frac{eh}{2mc}\right) \cdot H \ll kT$.

¹⁾ L. Brillouin, Journal de Physique, p. 377, 1930.

²⁾ De inhoud van deze opmerking ben ik geheel aan Dr. Peierls verschuldigd. Zie het naderhand verschenen artikel: R. Peierls, Ann. der Physik, 10, S. 97, 1931.

Opm. III. Is het verkregen resultaat wel te rijmen met de klassieke bewegingswetten en met de zwaartepuntstelling van Prof. Ehrenfest?

1°. Het is absoluut niet te verwachten, dat hier de klassieke bewegingswetten zouden gelden, daar klassiek helemaal geen beweging mogelijk zijn zou, omdat de energie niet toereikend is om van de ene potentiaalkuil naar de andere over te gaan. Klassiek zouden in ieder geval in de bewegingsvergelijkingen ook de bindingskrachten moeten optreden, die in (55.5) helemaal niet voorkomen. Men mag hier dus klassiek in geen geval vergelijkingen van de vorm $\dot{p}_x = \alpha \cdot av_y$, verwachten.

2°. In de vergelijking, die de stelling van Prof. Ehrenfest weergeeft (38.1), hebben we het produkt van de krachten, d. z. de afgeleiden van de potentialen, met de golffunkties. In de potentialen moeten niet alleen die van de uitwendige velden optreden, maar ook die der kristalkrachten. Voor de golffunkties moeten we de door het uitwendige veld gestoorde nemen. Hebben we b.v. een storing door een uitwendig elektrisch veld, dan moeten we dus drie produkten beschouwen (het vierde is te verwaarlozen), n.l. 1°.: kristalkracht maal ongestoorde golffunktie, welk produkt ook bij afwezigheid van storing bestaat en ons niet interesseert; 2°.: kristalkracht maal storing van de golffunktie en 3°.: storingskracht maal ongestoorde golffunktie. Er is helemaal geen reden om aan te nemen, dat het tweede produkt hetzelfde teken zal hebben als het derde, of veel kleiner zijn zal dan dit. Ze kunnen best tegengesteld werken in verscheidene gevallen en dan hangt de resulterende versnelling daarvan af welk van de twee het sterkst is. Dus, stellen we het elektrische veld van de kristalionen voor door E_0 , het uitwendige elektrische veld door λE_1 , de storing van de golffunktie door $\lambda \chi$, die van de toegevoegde door $\lambda \chi^*$, (λ is een zeer kleine faktor, zodat we steeds termen met λ^2 kunnen verwaarlozen), zo hebben wij in de uitdrukking voor de kracht op het elektron (38.1) onder het integraalteken:

$$(1) (\Phi + \lambda \chi^*) \cdot (E_0 + \lambda E_1) \cdot (\Psi + \lambda \chi) = \Phi E_0 \Psi + \lambda (\Phi E_0 \chi + \chi^* E_0 \Psi + \Phi E_1 \Psi).$$

Over het teken van het met λ vermenigvuldigde stuk (hetgeen de

op het elektron werkende kracht tengevolge van het uitwendige veld voorstelt) valt weinig te zeggen, ze hangt niet alleen van E_1 af, zodat men uit de zwaartepuntsstelling *niet* konkluderen mag, dat het elektron in de richting van het uitwendige veld versneld worden zal. Voor berekening is deze methode te gekompliceerd.

Opm. IV. Prof. Ehrenfest vestigde mijn aandacht erop, dat voor problemen met Fermi-statistiek (Bloch, Peierls, Heisenberg) de motivering voor het weglaten van de kwadratische term in H door het nemen van een golfpakket, die sterk om de oorsprong gekoncentreerd zijn, niet doorgaat, omdat het niet met het Pauli-verbod in overeenstemming is alle elektronen in dezelfde omgeving te nemen. De weglating is hier alleen geoorloofd, als men H zo klein neemt, dat de kwadratische term in het *gehele* periodeblok te verwaarlozen is.

Voor statistische behandeling moet men dan met behulp van sterk gekoncentreerde golfpakketten, als boven beschouwd, een groot golfpakket opbouwen.

HOOFDSTUK VIII

DIAMAGNETISME VAN VRIJE ELEKTRONEN

§ 1. Magneties moment van een elektronengas.

Een van de merkwaardigste verschillen in resultaat tussen klassieke theorie en kwantentheorie geeft ons de beschouwing van het magneties gedrag van een gas van vrije elektronen.

Het magneties moment van een elektron in een homogeen magneetveld is klassiek gegeven (zie 14.2) door, als K de funktie van Hamilton is:

$$(1) \quad \mu = - \frac{\partial K}{\partial H}.$$

(H is de magnetiese veldsterkte.)

Het veld zij gericht volgens de positieve z -richting; overigens rekenen we tweedimensionaal, daar de z -komponent van de beweging voor ons doel belangloos is.

Voor een gas van vrije elektronen onderworpen aan de Boltzmann-statistiek is het gemiddelde moment per elektron gegeven door

$$(2) \quad \bar{\mu} = - \frac{\iiint \iiint dx \cdot dy \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot e^{-\beta K} \cdot \frac{\partial K}{\partial H}}{\iiint \iiint dx \cdot dy \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot e^{-\beta K}} = kT \cdot \frac{\partial}{\partial H} (\lg S),$$

waar

$$(3) \quad S = \iiint \iiint dx \cdot dy \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot e^{-\beta K}; \quad \left[\beta = \frac{1}{kT} \right],$$

S is de toestandenintegraal.

In de kwantentheorie kunnen we voor het magneties moment van een deeltje een soortgelijke uitdrukking als (60.1) afleiden. Het magneties moment is n.l. gegeven door

$$(1) \quad \mu = - \iint dx \cdot dy \cdot \Phi(x, y) \cdot \frac{\partial K(x, p, H)}{\partial H} \psi(x, y).$$

De eigenwaarde van de energie E van een geladen deeltje in een magneetveld is een funktie van de kwantengetallen l en k en van de magnetiese veldsterkte H , dus: $E(k, l, H)$.¹⁾

Daar men kan bewijzen, dat²⁾

$$(2) \quad \frac{\partial E(k, l, H)}{\partial H} = \iint dx \cdot dy \cdot \Phi(x, y) \cdot \frac{\partial K(x, p, H)}{\partial H} \cdot \psi(x, y);$$

volgt:

$$(3) \quad \mu = - \frac{\partial E(k, l, H)}{\partial H}.$$

Het magneties moment van het elektronengas (Boltzmann-statistiek) wordt nu voorgesteld door:

$$(4) \quad \bar{\mu} = - \frac{\sum_k \sum_l e^{-\beta E} \cdot \frac{\partial E}{\partial H}}{\sum_k \sum_l e^{-\beta E}} = kT \cdot \frac{\partial}{\partial H} (\lg Z)$$

waar Z de z.g. toestandensom

$$(5) \quad Z = \sum_k \sum_l e^{-\beta E}$$

is.

Met behulp van de klassieke theorie is vaak de mening verdedigd, dat het resulterende moment van een gas van vrije elektronen van nul verschillend zijn zou. Het werk van Lorentz³⁾ en Bohr⁴⁾ heeft echter overtuigend aangetoond, dat vrije elektronen dan geen magneties moment geven.

¹⁾ Zie noot II, blz. 70, aanhangsel.

²⁾ Zie noot III, blz. 72, aanhangsel.

³⁾ H. A. Lorentz, Vorlesungen ueber die Struktur der Materie und Electricitaet (Wolfskehl-Vortraege) 1913; en H. J. van Leeuwen, Dissertatie Leiden, 1919 (l.c.).

⁴⁾ N. Bohr, Dissertatie Kopenhagen 1913.

Landau nu heeft laten zien, dat de kwantenteorie een ander resultaat geeft, dank zij het feit, dat hier de energiewaarden diskontinu zijn.¹⁾

In verband met het vroeger bestaande meningsverschil is men t.o.v. dit resultaat ook licht scepties gestemd. We zullen daarom deze vraag aanschouwelijk trachten te behandelen met behulp van een sterk vereenvoudigd model, ons door Prof. Ehrenfest aan de hand gedaan.

Eerst zij in het kort de klassieke afleiding nog weergegeven.

§ 2. Berekening van het moment in klassieke theorie en kwantenteorie.

Daartoe rekenen we de toestandenintegraal S (60.3) uit. Dit gaat het gemakkelijkst zo we de integratie over de momenten vervangen door een over de snelheidskomponenten door middel van de betrekking:

$$(1) \quad v_x = \frac{p_x}{m} + \omega y; \quad v_y = \frac{p_y}{m} - \omega x,$$

waar

$$(2) \quad \omega = \frac{eH}{2mc},$$

de Larmorfrequentie voorstelt.

De funktionaaldeterminant is m^2 , S gaat dus over in

$$(3) \quad S = m^2 \iiint dx dy dv_x dv_y \cdot e^{-\beta W(x, v)},$$

waar $W(x, v)$ de energie voorstelt als funktie van de koördinaten en snelheden. De energie is alleen kinetische energie en hangt dus niet van de koördinaten af. Uit (6.4) zien we: W is alleen een funktie van de absolute snelheid en hangt niet van H af. De integratie over v_x, v_y is van $-\infty$ tot $+\infty$. Het integratieresultaat is een funktie die niet van H afhangt, diengevolge is volgens (60.2) $\bar{\mu} = 0$, dus geen resulterend magneties moment.

¹⁾ L. Landau, Zeits. f. Phys. 64, S. 629, 1930; Zie ook E. Teller, Zeits. f. Phys. 66, S. 311, 1931; C. G. Darwin, Proc. Cambridge Philos. Society 27, p. 86, 1931.

Bij een andere, aanschouwelijker, methode, die tot hetzelfde resultaat leidt (zie Mejuffrouw van Leeuwen, l.c., blz. 67), wordt eerst het tijdgemiddelde van de bijdrage van één elektron opgemaakt en dan over alle elektronen gesommeerd. Deze methode zullen we bij ons model toepassen.

Dat de kwantenteorie bij analoge berekening als bovenstaand tot een ander slot komt, leert de volgende afleiding van Pauli¹⁾. Deze rekent de toestandensom Z (zie 61.5) uit voor een elektronengas, dat zich in een cylindries vat bevindt. Straal van het grondvlak is R . Voorts zij R zeer groot t.o.v. a , de straal van de door het elektron onder invloed van het veld beschreven cirkel. Dit komt neer op lage temperaturen of grote H , dus $\beta \cdot h \cdot \omega$ is zeer groot, dus

$$(1) \quad e^{-\beta h \omega} \ll 1.$$

De energie is²⁾:

$$(2) \quad E(n, k, H) = h\omega \cdot (2n + k + |k| + 1)$$

Het kwantengetal k legt het impulsmoment P vast, daar

$$(3) \quad P = k \cdot \frac{h}{2\pi}.$$

Meetkundig is $P = -m\omega(\rho^2 - a^2)$, waar ρ de afstand van het middelpunt der baan tot de, in het middelpunt van het grondvlak gedachte, oorsprong is. Hieruit volgt, daar we a ten opzichte van R kunnen verwaarlozen, voor de kleinste waarde van k

$$(4) \quad k = -\frac{2\pi m \omega R^2}{h};$$

dus:

$$(5) \quad Z = e^{-\beta B H} \left(\sum_{k=-\frac{2\pi m \omega R^2}{h}}^{-1} 1 + \sum_{k=0}^{\infty} e^{-2\beta B H k} \right) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-2\beta B H n}.$$

¹⁾ Solvay Congres 1930.

²⁾ Zie noot II, blz. 70, aanhangsel.

waar

$$(1) \quad \frac{\omega h}{2\pi} = B \cdot H$$

($B = \text{magneton van Bohr}$).

Pauli verwaarloost in (63.5) de tweede term tegenover de eerste wegens (63.1). Uitvoering der sommaties geeft:

$$(2) \quad Z = \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{h} \right)^2 m B H R^2 \frac{1}{\sinh(\beta B H)}.$$

Hieruit volgt wegens (61.4) voor $\bar{\mu}$:

$$(3) \quad \bar{\mu} = \frac{kT}{H} - B \cdot \coth \left(\frac{BH}{kT} \right) = -B \left(\coth \frac{BH}{kT} - \frac{kT}{BH} \right).$$

We krijgen hier dus een van nul verschillend magneties moment.

Een bij deze afleiding licht opkomende vraag is: Wordt het positieve resultaat niet verkregen door het ten onrechte weglaten van randelektronen, d.z. die elektronen, die tijdens hunne beweging t tegen de wand botsen, zodat hunne banen geen gesloten cirkels zijn? Bij de klassieke afleiding volgens de tweede methode (tijdgemiddelde) spelen deze een grote rol, hun weglating zou ook daar tot een positief resultaat voeren¹⁾.

Hiertegen kan het volgende worden opgemerkt:

Het (wegens 63.4) zich beperken tot elektronen, wier banen hun middelpunt binnen het vat hebben, betekent inderdaad het weglaten van een deel der randelektronen. Uit het niet mogen verwaarlozen van hun invloed bij de tweede methode volgt echter nog niet, dat zij ook bij de eerste methode een beslissende faktor zijn. Bij de eerste methode komt alles aan op de isotropie der verdeelingsfunctie, welke door bovengenoemde weglating prakties niet verstoord wordt. Kwanteus is deze isotropie verstoord door het optreden van nulpuntsenergie, gevoegd bij het bestaan van diskrete toestanden, zoals uit ons voorbeeld blijken zal. Dat het verwaarlozen van een gedeelte der randelektronen niet de oorzaak zijn kan van het onderscheid in uitkomst, blijkt al hieruit, dat,

¹⁾ Diss. H. J. v. Leeuwen, blz. 67 en volgende; vergelijk ook Diss. Bohr, S. 105.

als we klassiek dezelfde verwaarlozing maken, we nog altijd een negatief resultaat behouden!¹⁾

Bovenstaand voorbeeld van in een vat opgesloten elektronen laat zich kwanteus niet gemakkelijk volgens de tweede methode behandelen, daar de eigenwaarden en eigenfuncties van de randelektronen niet bekend zijn.

§ 3. Eenvoudig model.

Voor een meer aanschouwelijke behandeling leent zich beter het volgende model: Alle elektronen zijn gedwongen in een ring, loodrecht op de veldrichting, rond te lopen (Rotatormodel). Hebben de elektronen nu een resulterend magneties moment? De snelheidsverdeling zij die van Maxwell. Zonder veld zijn er evenveel elektronen, die met een bepaalde snelheid in positieve als in negatieve zin rondlopen, dus dan is er geen moment. Door het inschakelen van een veld krijgt ieder elektron nog een Larmorrotatie erbij, welke voor beide groepen (n.l. positief en negatief rondlopend, met dezelfde absolute snelheid) even groot en gelijk is, dus nu heffen de momenten der beide groepen elkaar niet meer op, er komt dus een resulterend moment en wel een diamagneties. Dit is het moment tengevolge van de induktiestroom¹⁾, we hebben n.l. niet met de weerstand gerekend. Voeren we ook deze in, b.v. door botsing met in de ring geplaatste atomen, dan zal zich de Maxwell-verdeling weer herstellen, er zullen volgens de klassieke theorie weer evenveel elektronen met gelijke snelheid positief als negatief rondlopen, m.a.w. de klassieke behandeling zal geen resulterend magneties moment opleveren.

De kwanteuse behandeling daarentegen zal ons wel een moment geven. De golfvergelijking voor dit rotatormodel is, als a de straal van de ring is:

$$(1) \quad \frac{h^2}{8\pi^2 m a^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + E \psi = 0.$$

Randvoorwaarde is

$$\psi(\vartheta + n \cdot 2\pi) = \psi(\vartheta).$$

¹⁾ Zie noot IV, blz. 73, aanhangsel.

²⁾ H. J. v. Leeuwen, l.c., blz. 49—51.

Hieraan wordt voldaan door

$$\Psi(\mathfrak{S}) = e^{\pm i k \mathfrak{S}}$$

en de eigenwaarden

$$(1) \quad E_k = \frac{k^2 \hbar^2}{8 \pi^2 m a^2} \quad (k = \text{geheel getal}).$$

Onder k zullen we bij dit model voortaan de absolute waarde van het kwantengetal verstaan. De toestanden met $+k$ en $-k$ hebben gelijke energie, dus gelijke snelheid; ze onderscheiden zich in omloopszin. Zonder veld zijn beide toestanden dus gelijk bezet, hun momenten heffen zich dus ook op. In de som over alle toestanden zal men dan evenmin een resulterend moment hebben, daar behalve voor $k=0$, die van de toestanden zich twee aan twee opheffen, terwijl de enige toestand, waarbij dit niet het geval is, n.l. die met $k=0$, geen moment heeft.

In een homogeen magneetveld wordt dit anders. De golfvergelijking is dan:

$$(2) \quad \frac{\hbar^2}{8 \pi^2 m a^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathfrak{S}^2} + \frac{\hbar \omega}{2 \pi i} \frac{\partial \psi}{\partial \mathfrak{S}} + m \omega^2 a^2 \psi + E \psi = 0.$$

De eigenwaarden van deze vergelijking zijn:

$$(3) \quad E_k = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar \cdot k}{2 \pi \cdot a} + m \cdot \omega \cdot a \right)^2.$$

De toestanden met $+k$ en $-k$ hebben dus niet meer gelijke energie, en gelijke absolute snelheid. Deze twee toestanden houden elkaar niet meer in evenwicht. (We veronderstellen a is zeer klein, zodat de storing van de energie alleen een zeer kleine verschuiving is, niet reeds een door elkaar lopen der energieën). De reden hiervan is: niet de snelheid maar het moment wordt gekwantiseerd ('d.i. vervangen door de differentiaaloperator $\frac{\hbar}{2 \pi i} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$); in het magneetveld lopen beide nogal uiteen, wegens de relatie (6.3). Nu zijn wel de toestanden met gelijk, doch tegengesteld moment beide geoorloofd, niet die met gelijke, doch tegengestelde snelheid.

Het magneties moment bij de toestand k is:

$$(1) \quad \mu = - \frac{\partial E(k, H)}{\partial H} = - B \left(k + \frac{4 \pi^2 a^2 m}{\hbar^2} B \cdot H \right).$$

Een elektron in de toestand $+k$ zal dus een groter magneties moment hebben, dan een elektron in de toestand $-k$ aan tegengesteld moment heeft. Bij zeer hoge temperaturen, waarbij alle toestanden gelijk bezet zijn, zal het resulterend moment van alle groepen met $k \neq 0$ dus zeker diamagneties zijn. Bij lagere temperaturen zullen de paramagnetiese toestanden echter dichter bezet zijn, er lopen meer elektronen in negatieve zin rond, dan in positieve, tengevolge van de kwantisering der toestanden is de isotropie der verdeling verstoord geworden. Vlak bij $T=0$ zal dus de bijdrage der toestanden met $k \neq 0$ paramagneties zijn. Echter zal ook dan het resulterend moment van het gehele elektronengas nog diamagneties zijn, daar we ook de toestand $k=0$ nog moeten beschouwen, die dan verreweg het sterkst bezet zal zijn. Deze toestand heeft de energie: $\frac{1}{2} \cdot m \cdot \omega^2 \cdot a^2$, waarbij een magneties moment behoort:

$$(2) \quad - B^2 H m a^2 \left(\frac{2 \pi}{\hbar} \right)^2.$$

Zij geeft dus ook een diamagneties moment; bij $T=0$ is het gemiddelde diamagneties moment per elektron gegeven door (2). Bij stijging van temperatuur wordt het diamagneties moment van de nultoestand dus eerst verzwakt door het resulterend moment van de nivo's met $k \neq 0$, bij een bepaalde temperatuur wordt een minimum bereikt, waarna het diamagnetiese moment van het gas weer toeneemt, totdat voor $T = \text{oneindig}$ weer de waarde (2) bereikt is geworden.

Deze resultaten kunnen ook met behulp van formules afgeleid worden, hun explicite weergave voor dit gekunstelde model heeft echter weinig zin.

De oorzaak van de verschillende uitkomst volgens klassieke theorie en kwantentheorie ligt dus in het feit, dat in het magneetveld, waar snelheid en moment sterk uiteenlopen, niet de snelheid maar het moment gekwantiseerd wordt. Dit heeft tengevolge,

dat de snelheidsverdeling zo gestoord wordt, dat men niet meer zeggen kan: een rechtslopend elektron wordt gekompenseerd door een met even grote snelheid naar links lopend. Bovendien is de laagste toestand niet de rusttoestand, zodat ook deze een bijdrage tot het moment geeft.

De oude kwantenteorie geeft ook een van de klassieke theorie afwijkend resultaat; afgezien van de nulpuntsenergie, zijn de daarin na inschakeling van het magneetveld geoorloofde toestanden dezelfde, als in de golfmechanika.

A A N H A N G S E L.

NOOT I

a) Afleiding van

$$\Sigma x_{\xi\xi'} \cdot c_{\xi'} = + i \cdot a \cdot \frac{\partial c_{\xi}}{\partial \xi}.$$

$$(1) \text{ Gegeven } \Psi = \Sigma c_{\xi} \cdot \psi_{\xi}; \psi_{\xi} = e^{+i \frac{\xi}{a} x} \cdot u_{\xi}; \varphi_{\xi} = e^{-i \frac{\xi}{a} x} \cdot \bar{u}_{\xi},$$

($\bar{u}$ is de toegevoegde van u .)

Krachtens definitie is

$$(2) \quad c_{\xi} = \int dx \cdot \varphi_{\xi} \cdot \psi,$$

dus

$$(3) \quad \frac{\partial c_{\xi}}{\partial \xi} = \int dx \cdot \frac{\partial \varphi_{\xi}}{\partial \xi} \cdot \psi$$

$$(4) \quad \frac{\partial \varphi_{\xi}}{\partial \xi} = -\frac{ix}{a} \cdot \varphi_{\xi} + e^{-\frac{i\xi x}{a}} \cdot \frac{\partial \bar{u}_{\xi}}{\partial \xi}$$

Daar u slechts weinig van ξ afhangt kunnen we de tweede term in het rechterlid van (4) verwaarlozen. We krijgen dus voor (3):

$$(5) \quad \begin{aligned} \frac{\partial c_{\xi}}{\partial \xi} &= -\frac{i}{a} \int dx \cdot \varphi_{\xi} \cdot x \cdot \psi = -\frac{i}{a} \cdot \int dx \cdot \Sigma \varphi_{\xi} \cdot x \cdot c_{\xi'} \cdot \psi_{\xi'} = \\ &= -\frac{i}{a} \Sigma x_{\xi\xi'} \cdot c_{\xi'} \end{aligned}$$

Hieruit volgt het gestelde.

b) Berekening van het matrixelement van p . Daartoe moeten we de integraal

$$(6) \quad \int_{-\frac{aG}{2}}^{\frac{aG}{2}} dx \cdot \frac{\partial \varphi_{\xi}}{\partial x} \cdot \psi_{\xi} \quad \text{uitwerken.}$$

Daar φ_{ξ} van de vorm $e^{-\frac{i\xi x}{a}} \cdot \bar{u}_{\xi}(x)$ is, waar $\bar{u}$ periodiek is met de periode a , kunnen we voor (6) ook schrijven:

$$(7) \quad \sum_{\alpha = -\frac{G}{2}}^{\frac{G}{2}-1} e^{i(\xi - \xi')\alpha} \cdot \int_0^a dx \cdot \frac{\partial \varphi_{\xi}}{\partial x} \cdot \psi_{\xi'}$$

(Is G oneven, dan kan men de integraal tussen $-\frac{1}{2}a$ en $+\frac{1}{2}a$ nemen.)

Daar nu: $\xi = \frac{2\pi \cdot k}{G}$, (k is geheel getal) is de som steeds nul, tenzij $\xi = \xi'$.

Hieruit volgt, dat p een diagonaalmatrix is.

NOOT II.

Golfvergelijking in een magneetveld¹⁾.

ω zij de Larmorfrekwentie $= \frac{eH}{2mc}$; $\omega h = B.H$, waar B het magneton van Bohr voorstelt.

De golfvergelijking is:

$$(1) \quad K = \left[\frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \omega (y p_x - x p_y) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) \right] \psi = E \psi$$

waar p_x de operator $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$ en $p_y = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}$ voorstelt.

Met de substituties:

$$(2) \quad b^2 = \frac{h}{2\pi m \omega}; \quad W = \frac{2\pi}{\omega h} \cdot E.$$

$$(3) \quad x = b r \cdot \cos \vartheta, \quad y = b r \cdot \sin \vartheta$$

gaat (1) over in:

$$(4) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + 2i H \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + (2W - r^2) \psi = 0$$

Hieraan wordt voldaan door:

$$(5) \quad \psi = e^{i k \vartheta} \cdot R(r),$$

waar $R(r)$ voldoet aan de vergelijking:

$$(6) \quad \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \left(2W' - \frac{k^2}{r^2} - r^2 \right) R = 0,$$

waar

$$(7) \quad W' = W - kH$$

Door de substitutie

$$(8) \quad r^2 = s, \text{ gaat (6) over in:}$$

$$(9) \quad \frac{\partial^2 R}{\partial s^2} + \frac{1}{s} \frac{\partial R}{\partial s} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{W'}{2s} - \frac{k^2}{4s^2} \right) R = 0.$$

Zetten wij voor W' in:

$$(10) \quad W' = 2n + k + 1,$$

dan wordt (9) identiek met een reeds door Schroedinger behandelde²⁾.

Uit de eenduidigheidsvoorwaarde volgt uit (5): k kan alleen gehele waarden aannemen, overigens kan k zowel positief als negatief zijn.

De vergelijking (9) heeft alleen een oplossing voor niet negatieve gehele

waarden van n , terwijl in (10) de k optreedt als de positieve wortel uit de coëfficiënt van $\left(\frac{1}{4s^2}\right)$, dus moet in (10) de absolute waarde van k genomen worden.

De eigenfuncties van (9) (die wij verder niet gebruiken zullen) zijn de generaliseerde functies van Laguerre¹⁾.

Substitutie van (10) in (7) geeft:

$$(11) \quad W = 2n + |k| + 1 + k,$$

dus de eigenwaarden van vergelijking (1) zijn:

$$(12) \quad E(n, k) = \omega \frac{h}{2\pi} (2n + |k| + 1 + k) = B H (2n + |k| + 1 + k).$$

We zien: in tegenstelling met het veldloze geval zijn in een magneetveld ook volkomen vrije elektronen gekwanteld. (Periodiek systeem). Voorts hangt voor negatieve waarden van k de energie niet van k af. (Ontaarding).

¹⁾ E. Schroedinger, l.c.

¹⁾ V. Fock, Zeitsch. f. Physik. 47, S. 446, 1927.

²⁾ E. Schroedinger, Ann. der Physik 80, S. 437, 1926, formule 105.

NOOT III.

Stelling: hangt de funktie van Hamilton $K(x, p, z)$ behalve van de koördinaten en momenten, nog van een parameter z af, dan geldt, als $E(n, z)$ de eigenwaarde van de energie in de kwantentoestand n voorstelt:

$$(1) \quad \frac{\partial E(n, z)}{\partial z} = \int dx \cdot \phi_n \frac{\partial K\left(x, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, z\right)}{\partial z} \cdot \psi_n$$

Daar ψ_n en ϕ_n oplossingen van een vergelijking zijn, die z bevat, is dit niet vanzelfsprekend.

Bewijs: Krachtens definitie is

$$(2) \quad E(n, z) = \int dx \cdot \phi_n(x, z) \cdot K\left(x, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, z\right) \psi_n(x, z);$$

Laat z toenemen van $z \rightarrow z + \Delta z$, dan:

$$(3) \quad E(n, z + \Delta z) = \int dx \cdot \phi_n(x, z + \Delta z) \cdot K(x, p, z + \Delta z) \psi_n(x, z + \Delta z),$$

waar $\psi_n(x, z + \Delta z)$, de eigenfunctie van de golfvergelijking met deze nieuwe waarde van de parameter, met behulp van storingsrekening verkregen kan worden. Deze leert¹⁾: de storing van de eigenfunctie — in ons geval $\psi_n(x, z + \Delta z) - \psi_n(x, z)$ — staat loodrecht op de ongestoorde eigenfunctie, d.w.z. ontwikkelen we de storing van de eigenfunctie naar de eigenfuncties van het ongestoorde systeem, dan is de koëfficiënt van ψ_n nul. Deze eigenschap geeft ons het gevraagde bewijs.

Immers ontwikkelen we beide leden van (3) in een Taylorreeks, en verwaarlozen wij termen met $(\Delta z)^2$, zo volgt onder toepassing van (2) en daar

$$K(x, p, z) \psi_n(x, z) = E(n, z) \cdot \psi_n(x, z)$$

$$(4) \quad \frac{\partial E(n, z)}{\partial z} = E_n \cdot \int dx \cdot \left(\frac{\partial \phi_n(x, z)}{\partial z} \cdot \psi_n(x, z) + \phi_n(x, z) \frac{\partial \psi_n(x, z)}{\partial z} \right) + \int dx \cdot \phi_n(x, z) \cdot \frac{\partial K}{\partial z} \psi_n(x, z).$$

Uit bovengenoemde eigenschap volgt, dat de eerste integraal nul is, waarmede het gestelde bewezen is.

¹⁾ Schrodinger, Ann. der Physik 80, S. 437, 1926.

NOOT IV.

Bewijs, dat de klassieke theorie ook geen magneties moment oplevert, als we bij de methode van de toestandenintegraal niet die elektronen meetellen, wier baanmiddelpunten buiten het vat gelegen zijn.

De toestandenintegraal is:

$$(1) \quad \iiint dx \cdot dy \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot e^{-\beta K(x, p)}.$$

Pas de volgende transformatie toe:

$$(2) \quad \begin{aligned} x &= \xi + a \cdot \cos \vartheta; & p_x &= -2m\omega a \cdot \sin \vartheta - m\omega(\eta + a \cdot \sin \vartheta) \\ y &= \eta + a \cdot \sin \vartheta; & p_y &= 2m\omega a \cdot \cos \vartheta + m\omega(\xi + a \cdot \cos \vartheta). \end{aligned}$$

Hier zijn ξ en η de koördinaten van het middelpunt van de beschreven cirkel, a de straal, en 2ω de hoeksnelheid, (ω = Larmorfrekwentie); terwijl ϑ de plaats op de cirkel vastlegt.

De funktionaaldeterminant is:

$$(3) \quad \frac{\partial(x, y, p_x, p_y)}{\partial(\xi, \eta, a, \vartheta)} = 4m^2\omega^2 a.$$

De energie gaat over in $2m \cdot \omega^2 \cdot a^2$; dus de integraal wordt:

$$(4) \quad m^2\omega^2 \iiint d\xi d\eta da d\vartheta \cdot e^{-2m\beta\omega^2 a^2} \cdot a.$$

Uitvoering van twee integraties en overgang voor ξ en η op poolkoördinaten vereenvoudigt de uitdrukking tot

$$(5) \quad 4\pi^2 m k T \int dr \cdot r$$

Of wij nu deze integraal van 0 tot R (= straal grondvlak) of tot oneindig nemen, de uitkomst blijft onafhankelijk van H , dus is er wegens (60.2) geen resulterend magneties moment.

STELLINGEN.

I.

De ontwikkeling der natuurkunde in de laatste jaren doet sterk de wenselijkheid uitkomen van een signifiëse bestudering der in de natuurkunde gebruikte termen.

II.

Het Pauli-verbod is in de fysieka der kwanten niet vreemder dan verschillende natuurwetten in de makroskopiese natuurkunde, waaraan wij meer „gewend” zijn, b.v. ondoordringbaarheid der materie.

III.

Bij zijn bespreking van de „Resonanzfluorescenz” bij meer atomen laat Weisskopf de elektrostatische wisselwerking tussen de atomen buiten beschouwing. Het is niet zeker, dat dit geoorloofd is.

V. Weisskopf, Ann. der Phys. 9, S. 23, 1931.

IV.

De beschouwingen van Kennard over de mogelijkheid, dat een elektron over een potentiaalberg komt, geven tot verkeerde konklusies aanleiding.

E. H. Kennard, Physik. Zeits. 30, S. 495, 1929.

V.

De behandeling van elektronen in een kristalrooster door Strutt bevat ernstige fouten.

M. J. O. Strutt, Ann. der Phys. 86, S. 319, 1928.

VI.

De bewering van Roess, dat het voor de massa-absorptie-coëfficiënt van de K-ring geen onderscheid maakt of deze met één, dan wel met twee elektronen bezet is, is onjuist.

L. C. Roess, Phys. Review 37, p. 553, 1931.

VII.

De konklusie van Heuse en Otto, dat uit hun metingen volgt het rechtlijnig verloop der isothermen van He, tussen 0,2 en 1 atm., heeft nog geen voldoende grond.

W. Heuse & J. Otto, Ann. der Phys. 2, S. 1020, 1929.

VIII.

De methode ter berekening van de karakteristieke temperatuur, die door Meissner en Voigt toegepast wordt, n.l. uit de elektrische weerstand met behulp van de formule van Grüneisen, is niet geheel betrouwbaar.

W. Meissner en B. Voigt, Ann. der Phys. 7, S. 761 & 892, 1930.

IX.

De Corioliskracht wordt vaak gedemonstreerd aan een rollende bal in een draaiende omwentelingsparaboloïde. Hierbij dient echter in het oog te worden gehouden, dat de rolling een komplikatie met zich brengt vergeleken bij de glijdende beweging.

X.

Formule 2 op blz. 190 van Dr. J. A. Barrau, Analytische Meetkunde II, is onjuist.

Dr. J. A. Barrau, Analytische Meetkunde, tweede deel, Groningen 1927.

XI.

Bij de formulering van de groepen-postulaten bij Weyl en Speiser zijn de voorwaarden, waaraan de elementen moeten voldoen om een groep te vormen, niet tot het noodzakelijkste beperkt.

H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, 2e Aufl., Leipzig 1931.

A. Speiser, Theorie der Gruppen von endlicher Ordnung, 2e Aufl., Berlin 1927.

XII.

Het bewijs van de Fourier-ontwikkelbaarheid in Courant-Hilbert is te verkiezen boven andere bewijzen.

R. Courant & D. Hilbert, Methoden der mathematischen Physik, 1e Aufl., Berlin 1924.

XIII.

Het chemies gedrag van waterstof vertoont zowel overeenkomst met de alkalimetalen als met de halogenen. Voorbeelden van dit laatste zijn, zoals ook te verwachten is, minder algemeen dan van het eerste.

XIV.

De uitdrukkingen „kritiese” temperatuur, „krities” punt, dienen vervangen te worden door „kritieke” temperatuur, resp. „kritiek” punt.