QUANTUMTHEORIE 1

DR. W.L.G.A.M. VAN NEERVEN

Instituut-Lorentz
Rijks Universiteit Leiden
postbus 9506, 2300 RA Leiden
Nederland

Inhoud Quantumtheorie 1

Aanbevolen literatuur

1) Quantum Mechanics, Vol. I,II, A. Messiah, North Holland Publishing Company, Amsterdam, hfst. II,IV,V,VII,VIII.

2) Advanced Quantum mechanics, J.J. Sakurai, Addison-Wesley Publishing Company, hfst. II.

3) Lectures on Quantum Mechanics, G. Baym, W.A. Benjamin Inc., New York, hfst. 8,18,19.

I. Principes van de Quantummechanica

In de quantummechanica wordt de toestand van een fysisch systeem beschreven door een golffunctie $\psi(\vec{r})$. De waarschijnlijkheidsverdeling $W(\vec{r})$ wordt gegeven door

1) $W(\vec{r}) = \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})$ waarbij $\psi(\vec{r})$ een complexe functie voorstelt. Voor een gegeven fysisch systeem is de golffunctie tot op een fase na bepaald. M.a.w. als $W(\vec{r})$ het systeem beschrijft dan beschrijft $e^{i\alpha}\psi(\vec{r})$ dit systeem ook (α willekeurig $\alpha\epsilon\mathcal{R}$).

2) De golffuncties in de quantummechanica zijn kwadratisch integreerbare functies (L^2) gedefinieerd op de configuratieruimte $q_1, q_2, ..., q_n$. Zij $\psi(q_1, q_2, ..., q_n)$ een golffunctie die van n coördinaten q_i afhangt dan is de integraal gegeven door $\int dq|\psi(q_1, q_2, ..., q_n)|^2$ eindig. Hier is de maat dq gedefinieerd door $dq = dq_1 dq_2 ... dq_n$.

   De verzameling $(q_1, q_2, ..., q_n)$ wordt de plaats-configuratieruimte genoemd.

3) Uit het bovenstaande volgt dat de Fourier getransformeerde φ ,gedefinieerd door $\varphi(p_1, p_2, ..., p_n) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int dq \exp(-i/\hbar \sum_{j=1}^{n} p_j q_j)\psi(q_1, q_2, ..., q_n)$, ook bestaat en kwadratisch integreerbaar is. De verzameling $(p_1, p_2, ..., p_n)$ wordt de impuls-configuratieruimte genoemd. De correspondentie tussen φ en ψ is een eenduidig.

Opmerking
Met een-eenduidig wordt bedoeld dat we twee functies φ_1 en φ_2 identificeren als ze slechts verschillen door een ensemble van maat nul.

In de taal van de wiskunde wordt de ruimte van kwadratisch integreerbare functies een Hilbertruimte genoemd.

Eigenschappen van een Hilbertruimte $\mathcal{H}$

1. $\mathcal{H}$ is een lineaire ruimte met als bijbehorend lichaam de verzameling van complexe getallen $\mathcal{C}$. Zij ψ_1 en ψ_2 kwadratisch integreerbare functies

   $\rightarrow$ $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$ kwadratisch integreerbaar voor λ_1, $\lambda_2\epsilon\mathcal{C}$

2. $\mathcal{H}$ is een genormeerde ruimte. De norm is gegeven door een hermitisch inprodukt

$$(\varphi, \psi) \underset{D}{=} \int dq\, \varphi^*(q_1, q_2, ..., q_n)\psi(q_1, q_2, ..., q_n) \quad \epsilon\mathcal{C}$$

(φ, ψ) is een scalair. Als het inprodukt nul is worden φ en ψ orthogonaal genoemd. De norm N_ψ van een functie ψ wordt gegeven door

$$N_\psi \underset{D}{=} \sqrt{(\psi, \psi)} = \quad \| \psi \|$$

De fundamentele eigenschappen van het scalaire inprodukt zijn

a) $(\psi, \varphi) = (\varphi, \psi)^*$

b) Het scalaire produkt van ψ met φ is lineair t.o.v. ψ

$$(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2)$$

c) De norm van ψ is een reëel niet negatief getal

$$N_\psi \geq 0$$

en als $N_\psi = 0 \ \rightleftarrows \ \psi = 0$

Opmerking

ψ kan slechts waarden hebben verschillend van nul op een ensemble van maat nul. We mogen dan ψ met nul identificeren.

Uit a) en b) volgt dat het scalaire inprodukt van ψ en φ antilineair is t.o.v. φ

$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi)$$

Uit a), b) en c) volgt een belangrijke eigenschap van het scalaire produkt, die gegeven wordt door de Schwarz-ongelijkheid. Deze is

$$|(\varphi, \psi)| \ \leq \ \sqrt{(\varphi, \varphi)(\psi, \psi)}$$

Opmerking: denk aan gewone vectorruimtes

$$|\vec{a}\vec{b}| \ \leq \ |\vec{a}|\,|\vec{b}|$$

Uit de Schwarz-ongelijkheid volgt

$$|(\varphi, \psi)| \ = \ \sqrt{(\varphi, \varphi)(\psi, \psi)} \ \rightleftarrows \ \varphi = \lambda\psi \qquad \lambda \epsilon \mathcal{C}$$

Uit de Schwarz-ongelijkheid volgt dat (φ, ψ) eindig is als ψ en φ kwadratisch integreerbare functies zijn.

3) $\mathcal{H}$ is compleet.

Iedere Cauchy-rij $\{\psi_n\}$, waarbij ψ_n kwadratisch integreerbaar is, convergeert in de limiet $n \to \infty$ naar een kwadratisch integreerbare functie.

<u>def.</u> ψ_n is een Cauchy-rij als geldt dat voor een gegeven $\epsilon > 0$ een N te vinden is zodat voor alle $n, m > N$ geldt

$$\parallel \psi_n - \psi_m \parallel < \epsilon$$

Voor een Hilbertruimte geldt nu dat $\lim\limits_{n \to \infty} \psi_n = \psi$ m.a.w. voor een gegeven $\epsilon > 0$ is er een N te vinden zodat voor alle $n > N$ geldt

$$\parallel \psi_n - \psi \parallel < \epsilon$$

Opm. Men spreekt van een pre-Hilbertruimte $\mathcal{H}'$ als $\mathcal{H}'$ wel een hermitisch inprodukt heeft (unitaire ruimte), maar niet compleet is.

4) $\mathcal{H}$ is separabel.

Elke kwadratisch integreerbare functie ψ kan worden uitgedrukt in een aftelbare orthonormale basis u_i

$$\psi(q_1, q_2, ..., q_n) = \sum_{i=1}^{p} a_i \ u_i(q_1, q_2, ..., q_n)$$

met $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ waarbij u_i ook kwadratisch integreerbaar is. Let op dat p oneindig kan zijn.

Uit het feit dat $\mathcal{H}$ separabel is volgt

$$(\psi, \psi) = \sum_i |a_i|^2 \qquad \text{Parseval-relatie (Plancherelle-relatie)}$$

Op het eerste gezicht behoren alleen golffuncties die corresponderen met toestanden die een discreet spectrum hebben tot $\mathcal{H}$. Deze gaan voldoende snel naar nul als $q_i \to \infty$.
Echter in de quantummechanica zijn er ook golffuncties die corresponderen met toestanden die een continu spectrum hebben. Deze gaan niet naar nul voor $q_i \to \infty$ en zijn niet normeerbaar

$$\text{m.a.w.} \quad (\psi, \psi) = \infty$$

voorbeeld: vlakke golven Er zijn nu twee mogelijkheden om dit te verhelpen

a) Men geeft een goede wiskundige definitie voor de golffuncties met een continu spectrum zodat zij tot $\mathcal{H}$ behoren (dit is gedaan door von Neumann).

b) Men breidt de Hilbertruimte $\mathcal{H}$ uit tot een grotere ruimte $\tilde{\mathcal{H}}$ genoemd (die geen Hilbertruimte meer is) en laat de normeerbaarheids eis vallen. Dit laatste zullen wij doen.

Er zijn nu operatoren $\hat{A}$ gedefinieerd die op de toestandsvectoren ψ in $\tilde{\mathcal{H}}$ werken. De belangrijkste hiervan zijn de hermitische (zelfgeadjungeerde) operatoren en de (anti) unitaire operatoren. De eerste corresponderen met observabelen, de laatste met symmetrieën (bijvoorbeeld rotatie- invariantie, pariteitsinvariantie, tijdsomkeerinvariantie etc.). We geven nu een overzicht van de eigenschappen waaraan hermitische operatoren moeten voldoen

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$$

1) Met iedere meetbare grootheid A correspondeert een hermitische operator $\hat{A}$ (observabele) in $\tilde{\mathcal{H}}$
voorbeeld:

$$\begin{array}{ll} x \to \hat{x} & \hat{x}\psi(\vec{r}) = x\psi(\vec{r}) \\ p_x \to \hat{p}_x & \hat{p}_x\psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial x} \end{array}$$

Idem voor y, z.

$$l_x \to \hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \qquad l_z\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = m\hbar\psi_{n,l,m}(\vec{r})$$

Idem voor y, z cyclisch.

$$H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \to \hat{H} = H(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}}) \qquad \hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

2) Bij iedere observabele $\hat{A}$ hoort een reëel eigenwaardenspectrum $\{a\} \equiv$ {verzameling van alle meetuitkomsten van de grootheid A}.
voorbeeld:

$$\begin{array}{lll} \hat{x} & \to & \text{continu spectrum} \\ \hat{l}_z & \to & \text{discreet spectrum} \\ H = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{\hat{r}} & \to & \text{H-atoom gemengd spectrum} \\ E_n = -\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{mc^2}{2n^2} & \to & n = \text{ hoofd-quantumgetal} \end{array}$$

3) Met iedere hermitische operator $\hat{A}$ correspondeert een orthonormale basis $\{\psi_{a,\lambda}(\vec{r})\}$ waarvoor geldt

$$\hat{A}\psi_{a,\lambda} = a\psi_{a,\lambda} \qquad \lambda = \text{ontaardingsgraad}$$

$$(\psi_{a,\lambda}, \psi_{a',\lambda'}) = \delta(a,a')\delta(\lambda,\lambda') \qquad \text{orthonormaliteit}$$

$$\delta(a,a') = \begin{cases} \delta_{aa'} & a, a' \text{ discreet} \quad \text{(normeerbare eigenfuncties)} \\ \delta(a-a') & a, a' \text{ continu} \\ 0 & a \text{ continu, } \; a' \text{ discontinu} \end{cases}$$

$$\psi(\vec{r}) = S_{a,\lambda} \; c(a,\lambda)\psi_{a,\lambda}(\vec{r}) \text{ met } c(a,\lambda) = (\psi_{a,\lambda}, \psi)$$

Dit geldt voor alle $\psi \epsilon \tilde{\mathcal{H}}$ (volledigheid).

$$S_a = \begin{cases} \sum_a & a \text{ discreet} \\ \int da & a \text{ continu} \end{cases}$$

4) Met iedere fysische toestand correspondeert een genormeerde $\psi(\vec{r})$ (toestands- of golffunctie in de plaats $(\vec{r})$- representatie). Deze is tot op een constante fasefactor $e^{i\alpha}$ bepaald.
Bij de toestand ψ hoort een kansverdeling van de meetuitkomsten $\{a\}$ behorende bij de meetbare grootheid A. Deze kansverdeling wordt gegeven door

$$P(a) = S_\lambda \; |(\psi_{a,\lambda}, \psi)|^2 = S_\lambda \; |c(a,\lambda)|^2$$

De verwachtingswaarde $\bar{A} = S_a \; P(a) \; a = (\psi, \hat{A}\psi)$

$$(\Delta A)^2 = S_a \; P(a) \; (a - \bar{A})^2 = \overline{A^2} - \bar{A}^2$$

Waarbij ΔA de standaardafwijking is.

Stel ψ is een toestand waarbij A altijd de meetuitkomst a geeft. Dan geldt $\bar{A} = a$ en $\Delta A = 0$. Hieruit volgt weer dat ψ een eigenfunctie van de operator $\hat{A}$ is met discrete eigenwaarde a.

5) Zijn de observabelen $\hat{A}$ en $\hat{B}$ onafhankelijk zodat $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}$ dan bestaat er een orthonormale basis $\{\psi_{a,b,\mu}\}$ van gemeenschappelijke eigenfuncties van $\hat{A}$ en $\hat{B}$.

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0} \;\leftrightarrows\; A \text{ en } B \text{ zijn comensurabel (compatibel)}$$

voorbeeld:

x, y compatibel	$[\hat{x}, \hat{y}] = 0$
x, p_x incompatibel	$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\hat{1}$

voor onafhankelijke compatibele A, B geldt

$$P(a,b) = S_\mu \; |(\psi_{a,b,\mu}, \psi)|^2$$

6) Stel er bestaat een compleet stelsel onafhankelijke commuterende observabelen gegeven door

$$\{\hat{K}_1, \hat{K}_2, ..., \hat{K}_f\} \equiv \hat{K} \qquad \text{(observatie -maximum)}$$

Dan bestaat er een niet-ontaarde basis $\{\psi_{k_1...k_f}(\vec{r})\} \equiv \{\psi_k(\vec{r})\}$. Men zegt dat de dynamische toestand van het systeem compleet gespecificeerd is door de quantum getallen $k_1, k_2, ..., k_f$. Voor het observatie-maximum geldt

$$P(k_1, k_2, ..., k_f) = |(\psi_{k_1...k_f}, \psi)|^2$$

voor een compleet stel meetbare grootheden $\{K_1, K_2, ..., K_f\}$.
De verzameling $\{k_1, k_2, ..., k_f\}$ is de uitkomst van een maximale meting.
bijvoorbeeld:

$$\hat{\vec{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \quad \rightarrow \quad \{\psi_{\vec{r}\,'}(\vec{r})\} = \{\delta(\vec{r} - \vec{r}\,'\} \quad -\infty < |\vec{r}\,'| < \infty$$

$$P(\vec{r}\,') = |(\psi_{\vec{r}\,'}, \psi)|^2 = |\psi(\vec{r}\,')|^2$$

$$\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \quad \rightarrow \quad \{\psi_{\vec{p}}(\vec{r})\} = \left\{\tfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}}\right\} \quad -\infty < |\vec{p}| < \infty$$

$$P(\vec{p}) = |(\psi_{\vec{p}}, \psi)|^2$$

$$H-\text{atoom} \quad \hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z \ \rightarrow \ \{\psi_{n,l,m}(\vec{r})\}$$

Waarbij n, l, m corresponderen met $\hat{H}, \hat{L^2}, \hat{L}_z$.

7) Irreversibele toestandsverandering t.g.v. de maximale meting van $K_1...K_f$ met uitkomst $\{k_1, k_2, ..., k_f\}$ waarbij k_i discreet is.

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow \psi_{k_1...k_f}(\vec{r}) \equiv \psi_k(\vec{r})$$

Dit correspondeert met de “preparatie van het systeem in de toestand ψ_k”.

8) Natuurlijke tijdsevolutie (tussen metingen in) wordt gegeven door de Schrödinger vergelijking.

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\vec{r}, t) = H(\vec{r}, \vec{p}, t)\psi(\vec{r}, t)$$

$$H \rightarrow \ \text{hermitische Hamilton-operator } \hat{H}$$

Als het systeem conservatief is dan is $\hat{H}$ onafhankelijk van t. In dit geval wordt $\hat{H}$ de energie-operator.

Als $\hat{A}$ onafhankelijk is van t dan volgt uit Schrödinger vergelijking

$$\frac{d}{dt}\,\bar{A} \;=\; \frac{d}{dt}\left(\psi(t), \hat{A}\psi(t)\right) \;=\; \frac{i}{\hbar}\left(\psi(t), [\hat{H}, \hat{A}]\psi(t)\right)$$

Stel $\psi(0) \equiv \psi_i$ bekend, dan volgt hieruit de kans(dichtheid) P om het systeem bij meting op tijdstip t in ψ_f aan te treffen gelijk is aan

$$P(i \rightarrow f, t) = |\,(\psi_f, \psi(t))\,|^2$$

II. Unitaire Operatoren

Def. representatie

dit is een afbeelding D die als volgt werkt.
ruimte van operatoren $\{\hat{A}\} \xrightarrow{D}$ ruimte van representaties $\{A\} = \{D(\hat{A})\}$

met de eigenschap $D(\hat{A}\hat{B}) = D(\hat{A})D(\hat{B})$
De afbeelding D wordt een homomorfisme genoemd.
Kern $D = \hat{1} \rightarrow$ D is een isomorfisme.

Def. matrixrepresentatie van een operator $\hat{A}$ t.o.v. een basis $\{u_n\}$ (notatie: $A = D(\hat{A})$)

$$\hat{A}u_n = \sum_k \; u_k \; A_{kn} = \sum_k \; u_k \; D_{kn}(\hat{A})$$

$$A_{kn} = D_{kn}(\hat{A}) = (u_k, \hat{A}u_n) = \int dq \; u_k^* \; \hat{A}u_n$$

Def. A representatie van $\hat{B}$ (notatie $B_A = \{B_{jk}\}$).

$$\rightarrow B_{jk} = (u_j, \hat{B}u_k) \text{ met } \hat{A} \; u_j = a_j u_j \quad \text{i.h.b. } A_A = \{A_{jk}\} = \{a_j \delta_{jk}\}$$

A is diagonaal

Def. A-representatie van een golffunctie ψ

Zij $\psi = \{\psi_1, \psi_2, ..., \psi_n, ...\}_A$ met $\psi = \sum_k \; \psi_k u_k$

De ontwikkelingscoëfficiënten ψ_k van ψ, uitgedrukt in de orthonormale eigenfuncties u_k van de operator $\hat{A}$, vormen de A- representatie van ψ.

$$\psi = \sum_k (u_k, \psi)\psi_k$$

Verandering van basisstelsel

Gegeven zij $\mathcal{H}$ met twee volledige orthonormale bases $\{u_n\}$ en $\{u'_n\}$

$$\{u_n\} \underset{D}{=} \{u_1, u_2, ..., u_n, ...\} \qquad u_n \,\epsilon\, \mathcal{H}$$

$$\{u'_n\} \underset{D}{=} \{u'_1, u'_2, ..., u'_n, ...\} \qquad u'_n \,\epsilon\, \mathcal{H}$$

Er bestaat een maxtrix S zodat

$$u'_k = \sum_n \; u_n \; S_{nk} \quad \text{met} \quad S_{nk} \;=\; (u_n, u'_k) \;=\; \int dq \; u_n^* u'_k$$

De eigenschappen van S volgen uit de volledigheidsrelatie.

$$\int dq \; u'^*_j u'_k = \sum_{n,m} \int dq \; S^*_{mj} \; S_{nk} \; u^*_m \; u_n$$

$$= \sum_n S^*_{nj} S_{nk} = (S^\dagger S)_{jk}$$

Hierbij is gebruik gemaakt van de volgende eigenschappen

$$S^*_{mj} = (S^\dagger)_{jm}$$

$$\int dq\ u^*_m u_n = \delta_{mn}$$

Als nu ook geldt dat $\{u'_j\}$ een orthonormale basis is dan geldt

$$(S^\dagger S)_{jk} = \delta_{jk} \to S^\dagger S = I \to S^\dagger = S^{-1}$$

Dit betekent dat S een unitaire matrix is.
(opmerking $\tilde{S}_{jn} = S_{nj}$ en $S^\dagger_{jn} = \tilde{S}^*_{jn} = S^*_{nj}$)

Stelling:Als $u'_k = \sum_n u_n\ S_{nk}$ dan geldt: $u_n = \sum_k u'_k\ S^\dagger_{kn}$.

Bewijs:

Stel

$$u_n = \sum_k u'_k\ S'^\dagger_{kn} \qquad (u'_k \text{ is volledig})$$

dan

$$S'^\dagger_{kn} = (u'_k, u_n) = \int dq\ u'^*_k u_n = (\int dq\ u^*_n u'_k)^* = S^*_{nk} = S^\dagger_{kn}$$

$$\to S' = S$$

Stelling: als $SS^\dagger = S^\dagger S = I$ dan bestaat er een S^{-1} en $S^\dagger = S^{-1}$ m.a.w. S is een unitaire matrix. Men kan dit gemakkelijk laten zien voor kwadratische matrices van eindige dimensies. Voor het oneindig dimensionale geval is het bewijs moeilijker.

Def. Unitaire matrix S

Als $S^\dagger = S^{-1}$ dan is S unitair.

Stelling: het hermitische inprodukt is invariant onder een unitaire transformatie.

Te bewijzen $(\varphi, \psi)' = (\varphi, \psi)$

$$\text{i.h.a. } \psi = \sum_n (u_n, \psi) u_n$$

$$(\varphi, \psi) = \sum_n (u_n, \varphi)^*(u_n, \psi) \qquad (\varphi, \psi)' = \sum_k (u'_k, \varphi)^*(u'_k, \psi)$$

$$(\varphi, \psi) = \sum_n (u_n, \varphi)^*(u_n, \psi) = \sum_{n,k,j} (S^*_{nk} u'_k, \varphi)^*(S^*_{nj} u'_j, \psi)$$

$$= \sum_{k,j,n} S^*_{nk} S_{nj} (u'_k, \varphi)^* (u'_j, \psi) = \sum_{k,j} \left(\sum_n S^\dagger_{kn} S_{nj} \right) (u'_k, \varphi)^* (u'_j, \psi)$$

$$= \sum_k (u'_k, \varphi)^* (u'_k, \psi) = (\varphi, \psi)'$$

als er bovendien nog een unitaire operator $\hat{S}$ bestaat is het bewijs heel eenvoudig

$$(\varphi, \psi)' = (\hat{S}\varphi, \hat{S}\psi) = (\hat{S}^{\ \dagger}\hat{S}\varphi, \psi) = (\varphi, \psi)$$

Def. isometrie

Transformaties die een inprodukt (metrische tensor) invariant laten worden isometrieën genoemd.

Stel $\{u_n\}$ is een volledige basis in $\mathcal{H}$ die echter niet orthonormaal behoeft te zijn. In dat geval kunnen wij een metriek definiëren.

Def. metriek G

Een metriek wordt gekarakteriseerd door een inprodukt met elementen $g_{ik} = (u_i, u_k)$. Verder mag G niet ontaard zijn dus det $g \neq 0$.

Uit $g_{ki} = g^*_{ik} \rightarrow G^\dagger = G$

Dit betekent dat de metriek G gegeven wordt door een hermitische matrix.

Definieer een isometrie S als een basistransformatie die de metriek G invariant laat

$$g'_{ik} = (u'_i, u'_k) = g_{ik}$$

$\rightarrow$ condities: $SGS^\dagger = G$ en $S^\dagger GS = G \rightarrow S$ is een isometrie.

Deze condities kunnen worden opgevat als definitie van een unitaire transformatie van een niet orthonormale basis.

Als de basis orthonormaal is $\rightarrow G = I$ en $SS^\dagger = I \rightarrow$ wordt de unitaire transformatie gegeven door een unitaire matrix.

Voor een unitaire tranformatie geldt dat det $S = e^{i\alpha} \quad \alpha \epsilon R$.

De unitaire transformaties vormen een groep geheten $U(n)$. Als det $S = 1$ dan wordt de groep $SU(n)$ genoemd.

Indien S reeël is dan worden de unitaire transformaties orthogonaal genoemd.Hiervoor geldt det $S = \pm 1$ en de goep wordt $O(n)$ genoemd. Als bovendien nog det $S = 1$ dan krijgen we de groep $SO(n)$.

$$SU(n) \subset U(n) \qquad O(n) \subset U(n) \qquad SO(n) \subset SU(n).$$

Stelling: De uitspraken van de quantummechanica zijn invariant onder een een unitaire transformatie. Dit houdt in dat de verwachtingswaarden

$$\langle \hat{A} \rangle = (\psi, \varphi) \text{ met } \varphi = \hat{A}\psi.$$

invariant zijn onder unitaire transformaties.

De verandering van basiskeuze heeft tot gevolg dat vectoren, componenten, matrix-elementen en operatoren veranderen.

Er zijn nu twee soorten basistransformaties in de literatuur te onderscheiden.

a) Passieve transformaties.

1. Met de basisvectoren worden getransformeerd:
   de componenten van een vector
   de matrixrepresentatie van een operator

2. Blijven invariant:
   de vectoren
   de operatoren

een operator die in twee verschillende bassissen wordt uitgedrukt heeft verschillende matrixelementen.

b) Actieve transformaties.

1. Met de basisvectoren worden getransformeerd:
   de vectoren
   de operatoren

2. Blijven invariant:
   de componenten van een vector
   de matrixrepresentatie van een operator

$\hat{A}$ en $\hat{A}'$,ofschoon verschillend, hebben dezelfde matrixelementen.

Passief

De vector blijft invariant $\rightarrow \psi, \psi' \epsilon \mathcal{H}$ met $\psi = \psi'$. Dan geldt

$$\psi = \sum_n \psi_n u_n = \sum_k \psi'_k u'_k \qquad \begin{array}{l} \psi'_n, \psi_n \epsilon \mathcal{C} \\ u'_n, u_n \epsilon \mathcal{H} \end{array}$$

$$u'_k = \sum_n u_n S_{nk}$$

$$\rightarrow \psi_n = \sum_k S_{nk} \psi'_k$$

Operator invariant $\hat{A} = \hat{A}'$

$$\hat{A} u_m = \sum_n u_n A_{nm} \rightarrow A_{nm} = (u_n, \hat{A} u_m)$$

$$\hat{A} u'_k = \sum_j u'_j A'_{jk} \rightarrow A'_{jk} = (u'_j, \hat{A} u'_k)$$

$$A'_{jk} = (u'_j, \hat{A} u'_k) = \sum_{n,m} (u_n S_{nj}, \hat{A}\ u_m S_{mk})$$

$$= \sum_{n,m} S^*_{nj} S_{mk} (u_n) \hat{A} u_m) = \sum_{n,m} S^\dagger_{jn} A_{nm} S_{mk} = (S^\dagger A S)_{jk}$$

$$A' = S^\dagger A S \quad \text{als} \quad S \quad \text{unitair} \quad \rightarrow A' = S^{-1} A S$$

S is een maxtrix die in de representatieruimte werkt (en geen operator die in de Hilbertruimte $\mathcal{H}$ werkt)

$$\begin{array}{ccc} A' & \text{en} & A \\ \downarrow & & \downarrow \\ u' & & u \end{array} \qquad \text{horen bij dezelfde } \hat{A}$$

Actief

Stel voor willekeurige $\psi \epsilon \mathcal{H}$ geldt $\hat{S}\psi = \psi'$ met $\psi' \epsilon \mathcal{H}$.

Uit $(u_n, \hat{S}u_k) = S_{nk}$ volgt

$$u'_k = \hat{S}u_k = \sum_n (u_n, \hat{S}u_k)u_n = \sum_n S_{nk}u_n$$

Merk op dat er geen verschil in basistransformatie bestaat tussen actief en passief.

Beschouw nu $\psi = \sum\limits_n \psi_n u_n$ en $\psi' = \sum\limits_k \psi'_k u'_k$

$$\psi' = \hat{S}\psi = \hat{S}\left(\sum_n \psi_n u_n\right)$$

$$= \sum_n \psi_n \hat{S}u_n = \sum_n \psi_n u'_n$$

$$= \sum_n \psi'_n u'_n \quad \Rightarrow \quad \psi_n = \psi'_n$$

De componenten van de ongetransformeerde vector ψ en de getransformeerde vector ψ' zijn gelijk.

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (\psi', \hat{A}'\psi') \text{ voor elke } \psi\epsilon\mathcal{H} \text{ met } \psi' = \hat{S}\psi$$

Twee verschillende operatoren hebben dezelfde matrix elementen!

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (S\psi, \hat{A}'S\psi) = (\psi, \hat{S}^\dagger \hat{A}'\hat{S}\psi) \quad \hat{A}, \hat{A}' \text{ dicht in } \mathcal{H}$$

$$\to \hat{A} = \hat{S}^\dagger \hat{A}' \hat{S}.$$

Als $\hat{S}$ bovendien unitair is dan $\hat{A} = \hat{S}^{-1}\hat{A}'\hat{S}$ of $\hat{A}' = \hat{S} \ \hat{A}\hat{S}^{-1}$

$$\hat{A} \neq \hat{A}'$$

$$A'_{jk} = (u'_j, \hat{A}'u'_k) = (\hat{S}u_j, \hat{A}'Su_k) = (u_j, \hat{S}^\dagger \hat{A}'\hat{S}u_k)$$

$$= (u_j, \hat{A}u_k) = A_{jk} \quad \text{of} \quad A' = A \quad \text{maar} \quad \hat{A} \neq \hat{A}'$$

$$\begin{array}{lll} \hat{A} & \text{basis } u_n & \to A_{jk} \\ \hat{A}' & \text{basis } u'_n & \to A_{jk} \end{array}$$

Stelling: Onder een unitaire transformatie wordt de hermiticiteit behouden.

$$\hat{A}^\dagger = A \qquad \hat{A} = S^\dagger \hat{A}' S \qquad \hat{S}^\dagger \hat{S} = \hat{S}\hat{S}^\dagger = \hat{I}$$

$$\hat{A}' = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^\dagger \to \hat{A}'^\dagger = (\hat{S}\hat{A}S^\dagger)^\dagger = S\hat{A}^\dagger \hat{S}^\dagger = S\hat{A}\hat{S}^\dagger = \hat{A}'$$

verder geldt

$$\left[\hat{S}\hat{A}\hat{S}^{\dagger}, \hat{S}\hat{B}\hat{S}^{\dagger}\right] = \hat{S}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{S}^{\dagger}$$

Dus S verandert de structuur van de commutatierelaties niet.
Voorbeeld:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \rightarrow \quad [\hat{x}'_i, \hat{p}'_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \quad \rightarrow \quad \left[\hat{L}'_x, \hat{L}'_y\right] = i\hbar\hat{L}'_z$$

III. Projectie-operatoren

We geven nu nog een ander voorbeeld van een belangrijke hermitische operator namelijk de projectie-operator.

Def.: Orthocomplementaire deelruimten van $\mathcal{H}$.

V en $V^{\perp}$ worden orthocomplementair genoemd als $V \subset \mathcal{H}$ en $V^{\perp} \subset \mathcal{H}$. Verder geldt:

$$\mathcal{H} = V \oplus V^{\perp} \quad \text{met} \quad V^{\perp} \perp V$$

Stelling: Elke vector van $\mathcal{H}$ is de som van één vector van V en één vector van $V^{\perp}$. Deze twee componenten zijn een eenduidig bepaald.

$$\varphi \epsilon \mathcal{H} \qquad \varphi = \varphi_V + \varphi_{V^{\perp}} \text{ met } \varphi_V \epsilon V \qquad \varphi_{V^{\perp}} \epsilon V^{\perp}$$

Bewijs

Bekijk de splitsing van de basis in $\mathcal{H}$ in een basis van V en een basis van $V^{\perp}$.

Opm.

1) $(\varphi_V, \psi_{V^{\perp}}) = 0$ voor $\varphi_V \epsilon V$ en $\psi_{V^{\perp}} \epsilon V^{\perp}$

2) $\| \varphi \|^2 \;=\; \| \varphi_V \|^2 + \| \varphi_{V^{\perp}} \|^2$ (Pythagoras)

Def. Projectie-operator $\hat{P}_V$ op de deelruimte $V \subset \mathcal{H}$.

$\hat{P}_V \varphi = \varphi_V$ voor elke $\varphi \epsilon \mathcal{H}$ met $\varphi_V \epsilon V$.

Eigenschappen van $\hat{P}_V$

1) $\hat{P}_V^{\dagger} = \hat{P}_V$ de projectie-operator is hermitisch.

Bewijs:

$$(\varphi, \hat{P}_V{}^{\dagger} \psi) = (\hat{P}_V \varphi, \psi) = (\varphi_V, \psi_V) + (\varphi_V, \psi_{V^{\perp}}) = (\varphi_V, \psi_V)$$

$$(\varphi, \hat{P}_V \psi) = (\varphi, \psi_V) = (\varphi_V, \psi_V) + (\varphi_{V^{\perp}}, \psi_V) = (\varphi_V, \psi_V)$$

2) $\hat{P}_V{}^2 = \hat{P}_V$ de projectie-operator is idempotent.

$$\hat{P}_V{}^2\varphi = \hat{P}_V\varphi_V = \varphi_V$$

3) De eigenvectoren van $\hat{P}_V$ bestaan uit

De vectoren uit V met eigenwaarde 1
De vectoren uit $V^\perp$ met eigenwaarde 0

$\hat{P}_V\varphi_V = \varphi_V \qquad P_V\varphi_{V^\perp} = 0$

4) $\hat{P}_{V^\perp} = \hat{I} - \hat{P}_V$ is de projectie-operator op $V^\perp \rightarrow P_{V^\perp}\varphi_V = 0$

Hierbij is $\hat{I}$ de identiteitsoperator.Het bewijs is simpel.

$\hat{P}_{V^\perp}^2 = \hat{I}^2 - \hat{I}\hat{P}_V - \hat{P}_V\hat{I} + \hat{P}_V{}^2 = \hat{I} - \hat{P}_V = \hat{P}_{V^\perp}$

omgekeerd geldt ook dat iedere idempotente hermitische operator $\hat{P}$ een projectie-operator is. De eigenvectoren die de eigenwaarde 1 hebben behoren tot de deelruimte $V = \hat{P}\mathcal{H}$ waarop $\hat{P}$ projecteert.

Bijzondere gevallen

1) $\hat{P} = \hat{I} \qquad \hat{P}\mathcal{H} = \mathcal{H} \qquad \mathcal{H} = V \qquad V^\perp = 0$

2) $\hat{P} = \hat{0} \qquad \hat{0}\mathcal{H} = 0$ d.w.z. $\mathcal{H} = V^\perp \qquad V = 0$

Def. Elementaire projectie-operator P_ψ

Stel $\psi\epsilon\mathcal{H}$ dan $\hat{P}_\psi\psi = \psi$ en $\hat{P}_\psi\varphi = 0$ voor $\varphi\epsilon\{\psi\}^\perp$

d.w.z. V is een ééndimensionale ruimte bestaande uit alle vectoren van de vorm $c.\psi$ met $c\epsilon C$

i.h.b. bekijken we de elementaire projectie-operatoren die werken op de orthonormale basis $\{u_n\}$.

1) $\hat{P}_n u_m = \delta_{nm} u_n \Rightarrow \sum\limits_n \hat{P}_n = \hat{I}$ afsluitingsrelatie.

Bewijs: $\psi = \sum\limits_k \psi_k u_k$

$$\hat{P}_n\psi = \hat{P}_n\ (\sum_k \psi_k u_k) = \sum_k \psi_k \delta_{nk} u_n = \psi_n u_n = (u_n, \psi) u_n$$

Dus voor elke $\psi\epsilon\mathcal{H}$ geldt.

$$\sum_n \hat{P}_n\psi = \sum_n \psi_n u_n = \psi \rightarrow \sum_n \hat{P}_n = \hat{I}$$

2) $\hat{P}_j\hat{P}_k = \delta_{jk}\hat{P}_k$
want

$$\hat{P}_j(\hat{P}_k\psi) = u_j(u_j, \hat{P}_k\psi) = u_j(\hat{P}_k u_j, \psi) = \delta_{jk}u_j(u_j, \psi) = \delta_{jk}\hat{P}_j\psi = \delta_{jk}\hat{P}_k\psi$$

Stel de hermitische operator $\hat{A}$ heeft eigenwaarden $a_1, a_2, ..., a_n, ...$ met ontaardingsgraad $g_1, g_2, ..., g_n, ...$. Verder is $\hat{P}_j$ een projectie-operator die alle vectoren op de deelruimte V_{a_j} projecteert d.w.z.

$$\psi\epsilon\mathcal{H} \quad P_j\psi = \varphi(a_j)$$

$$\varphi(a_j)\epsilon V_{a_j} \quad \rightarrow \quad \hat{A}\varphi(a_j) = a_j\varphi(a_j)$$

Nu geldt

$$(\hat{A} - a_j)\varphi(a_j) = 0 \quad \rightarrow \quad (\hat{A} - a_j)\hat{P}_j\psi = 0$$

Hieruit volgt

$$(\hat{A} - a_j)\hat{P}_j = \hat{0}$$

en

$$\sum_j \hat{A}\hat{P}_j = \hat{A}\sum_j \hat{P}_j = \hat{A} \quad \rightarrow \quad \hat{A} = \sum_j a_j\hat{P}_j$$

Conclusie: De operator $\hat{A}$ is volledig gekarakteriseerd door zijn eigenwaarden a_j en de bijbehorende deelruimte V_{a_j}.

Opm.$[\hat{A}, \hat{P}_k] = 0$

want $\hat{A}\hat{P}_k = a_k\hat{P}_k$ en $\hat{P}_k\hat{A} = a_k\hat{P}_k$
zodat i.h.a. geldt $f(\hat{A}) = \sum_j f(a_j)\hat{P}_j$.

Men kan dus $\mathcal{H}$ opsplitsen in de volgende deelruimten.

$$\mathcal{H} = V_{a_1} \oplus V_{a_2} \oplus ...V_{a_n} \oplus ...$$

Voor eigenwaarden $a_1, a_2, ..., a_n, ...$ van de hermitische operator $\hat{A}$ corresponderende met een volledig stelsel van eigenfuncties van $\hat{A}$, die een orthonormale basis van $\mathcal{H}$ vormen.

$$\hat{A}u_k^{(j)} = a_k u_k^{(j)} \qquad j = 1, 2, ..., g_k, ... \quad \text{ontaardingsgraad}$$

Het bovenstaande is ook van toepassing op een operator met een continu spectrum
In dit geval wordt het somteken vervangen door een integraalteken.

$$\sum_n \quad \rightarrow \quad \int da$$

IV. Dirac-notatie

In het verleden werden de toestanden in $\mathcal{H}$ aangegeven door expliciete uitdrukkingen. Voorbeelden waren de golffuncties, die complexe functies zijn van de x-coördinaten of p-coördinaten (configuratieruimte). Deze zijn oplossingen van de Schrödinger-vergelijking.

Voorbeeld:

$$H - \text{atoom} \qquad \psi(\vec{r}) \sim \sum_{n,l,m} a_{n,l,m}\, R_{nl}(r)\, Y_l^{(m)}(\theta, \varphi)$$

We voeren nu een notatie in waarin alleen de quantum getallen van een volledige set compatibele operatoren voorkomen.
Voorbeeld:

$$H - \text{atoom} \quad \rightarrow \quad |n, l, m\ \rangle \quad \text{Dirac notatie}$$

Def. "ket" vectoren $\qquad \psi \rightarrow |\psi\rangle$

De vectoren van de Hilbertruimte $\mathcal{H}$ zijn $|\psi\rangle$ dus $|\psi\rangle \epsilon \mathcal{H}$

Def. "bra" vectoren $\qquad \varphi^* \rightarrow \langle\varphi|$

De vectoren van de duale ruimte $\mathcal{H}^*$ worden gegeven door $\langle\varphi|$, dus $\langle\varphi|\epsilon\mathcal{H}^*$

$\langle\varphi|$ definieert een functie $\varphi(|\psi\rangle) \underset{D}{=} (\varphi, \psi) = \langle\varphi|\psi\rangle$

Def. inproduct $\langle\varphi|\psi\rangle$ gegeven door $(\varphi, \psi) = \langle\varphi|\psi\rangle$

Indien $\mathcal{H}$ zelfduaal is ($\mathcal{H} \approx \mathcal{H}^*$) dan bestaat er een correspondentie tussen de vectoren van $\mathcal{H}$ en $\mathcal{H}^*$. Deze is

$|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|$ (geconjungeerde vectoren, $*$-operatie is een adjunctie op vectoren). Hieruit volgt:

$\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle$ ($*$ is een complexe conjungatie op getallen).

Def.:

lineaire operator $\hat{A} \qquad |\psi\rangle = \hat{A}|\varphi\rangle$

matrixelement $(\phi, \hat{A}\psi) \qquad \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$

Def. Product van kets (tensor product van twee Hilbert-ruimtes $\mathcal{H}^{(1)}$ en $\mathcal{H}^{(2)}$)

$$|\psi^{(1)}\rangle\epsilon\mathcal{H}^{(1)} \quad |\psi^{(2)}\rangle\epsilon\mathcal{H}^{(2)}$$

$$\rightarrow |\psi^{(1)}\psi^{(2)}\rangle \underset{D}{=} |\psi^{(1)}\rangle|\psi^{(2)}\rangle \quad \epsilon \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$$

Opm. Operatoren $\hat{A}^{(1)}$ en $\hat{A}^{(2)}$ die respectievelijk op $\mathcal{H}^{(1)}$ en $\mathcal{H}^{(2)}$ gedefinieerd zijn commuteren met elkaar.

Def. Eigenvector ψ_a van operator $\hat{A}$ met eigenwaarde a.

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \qquad (\psi_a \rightarrow |a\rangle)$$

Def. Volledig stelsel van orthonormale eigenvectoren $\{u_n\}$ van operator $\hat{A}$.

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle \qquad (u_n \rightarrow |n\rangle)$$

orthonormalisatie $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

Def. Projectie-operator $\hat{P}_n$ op $|n\rangle$

$$\hat{P}_n|m\rangle = \delta_{nm}|n\rangle \rightarrow \hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$$

met

$$\hat{P}_n^\dagger = \hat{P}_n \quad \text{en} \quad \hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$$

Verder hebben wij de afsluitingsrelatie:

$$\sum_n \hat{P}_n = \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{I} \qquad \text{(ontbinding van de identiteit)}$$

Voor ontaarde spectra $\hat{A}\ |n, j_n\rangle = a_n\ |n, j_n\rangle$ met $j_n = 1, 2, ..., g_n$ geldt:

$$\hat{P}_{a_n} = \sum_{j_n} |n, j_n\rangle\langle n, j_n|$$

Voor een willekeurige ket in de $\hat{A}$ representatie met $|n\rangle$ eigenvector van $\hat{A}$ geldt:

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\psi_n \qquad \psi_n = \langle n|\psi\rangle$$

analoog voor de bra's

$$\langle\psi| = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|$$

$\hat{F}$ is een lineaire operator, dan geldt

$$\hat{F} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|\hat{F}|m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} |n\rangle F_{nm}\langle m|$$

dit is $\hat{F}$ in de $\hat{A}$ representatie.

De operator $\hat{A}$ in de A-representatie heeft de eenvoudige vorm

$$\hat{A} = \sum_{n,m} |n\rangle\langle n|\hat{A}|m\rangle\langle m| = \sum_{n,m} |n\rangle a_n\delta_{nm}\langle m|$$

$$= \sum_n |n\rangle a_n \langle n| \quad \text{d.w.z.} \quad A_{nm} = a_n \delta_{nm} \quad \text{de matrix A is diagonaal}$$

Laten we nu nog eens naar de operator F kijken

$$|\varphi\rangle = \hat{F}|\psi\rangle = \sum_{n,m} |n\rangle F_{nm} \langle m|\psi\rangle = \sum_{n,m} |n\rangle F_{nm} \psi_m$$

$$= \sum_n |n\rangle \left(\sum_m F_{nm} \psi_m \right) = \sum_n |n\rangle \varphi_n \quad \text{dus} \quad \varphi_n = \sum_m F_{nm} \psi_m \quad \text{voor} \quad \varphi_n, \psi_m \epsilon C$$

Voor eigenfuncties met een continu spectrum krijgen we:

$$\langle \nu|\nu'\rangle = \delta(\nu' - \nu) \quad \text{met} \quad \hat{A}|\nu\rangle = a(\nu)|\nu\rangle$$

de rest is analoog.

$$\hat{P} = \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu \quad |\nu\rangle\langle\nu|$$

$$\hat{P}|\xi\rangle = \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu \quad |\nu\rangle\langle\nu|\xi\rangle$$

$$(\hat{I} - \hat{P})|\xi\rangle \perp |\nu\rangle$$

$$\langle\nu|(\hat{I} - \hat{P})|\xi\rangle = \langle\nu|\xi\rangle - \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu' \langle\nu|\nu'\rangle\langle\nu'|\xi\rangle$$

$$= \langle\nu|\xi\rangle - \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu' \delta(\nu - \nu')\langle\nu'|\xi\rangle = 0$$

V. Representaties

De coördinaat-of $\vec{r}$- representatie van een structuurloos deeltje wordt de Schrödinger-representatie genoemd.

We beperken ons tot een eendimensionale vectorruimte $\vec{r} = (x)$

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \qquad \text{(definitie)}$$

Het voordeel van de $\vec{r}$-representatie is dat de potentiaalmatrix de diagonale vorm aanneemt.

Uit $\hat{V} \underset{D}{=} V(\hat{x})$ volgt.

$$\hat{V}|x\rangle = V(x)|x\rangle$$

De normering van $|x\rangle$ wordt gegeven door

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

De afsluitingsrelatie (ontbinding van de identiteit) luidt

$$\hat{I} = \int dx\ |x\rangle\langle x|$$

$\{|x\rangle$ voor alle $x \epsilon \mathcal{R}\}$ vormt een basis. Dus een willekeurige $|\psi\rangle$ kan geschreven worden als

$$|\psi\rangle = \int dx\ |x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int dx\ \psi(x)|x\rangle$$

We noteren dat $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ de golffunctie in de plaatsruimte is die voldoet aan de Schrödingervergelijking.

Het inprodukt wordt gegeven door

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{I}|\varphi\rangle = \int dx\ \langle\psi|x\rangle\langle x|\varphi\rangle = \int dx\ \psi^*(x)\varphi(x)$$

De operator $\hat{x}$ heeft in de x- representatie de eenvoudige vorm

$$\hat{x} = \int dx\ |x\rangle x\langle x|$$

De generalisatie tot meer dan een dimensie is triviaal.

We willen nu de $\vec{r}$-representatie van de operator $\hat{\vec{p}}$ vinden.

Gebruik de commutatierelatie

$$[\hat{p}_k, \hat{x}_j] = \tfrac{\hbar}{i}\ \delta_{kj}$$

We kunnen dan het volgende afleiden

$$|\vec{r}\rangle \underset{D}{=} |x_1, x_2, x_3\rangle$$

$$\langle \vec{r}\,''|\vec{r}\,'\rangle = \delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,') = \delta(x_1''-x_1')\delta(x_2''-x_2')\delta(x_3''-x_3')$$

$$\langle \vec{r}\,''|\hat{x}_j\hat{p}_j-\hat{p}_j\hat{x}_j|\vec{r}\,'\rangle = (x_j''-x_j')\langle \vec{r}\,''|\hat{p}_j|\vec{r}\,'\rangle$$

met $\hat{x}_j|x_1,x_2,x_3\rangle = x_j|x_1,x_2,x_3\rangle$

anderzijds is

$$\langle \vec{r}\,''|\hat{x}_j\hat{p}_j-\hat{p}_j\hat{x}_j|\vec{r}\,'\rangle = -\frac{\hbar}{i}\,\langle \vec{r}\,''|\vec{r}\,'\rangle = -\frac{\hbar}{i}\,\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')$$

dus krijgen we

$$\langle \vec{r}\,''|\hat{p}_j|\vec{r}\,'\rangle = -\frac{\hbar}{i}\,\frac{1}{x_j''-x_j'}\,\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')$$

$$\underset{D}{=}\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial x_j''}\,\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')$$

te bewijzen $\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,') = -(x_j''-x_j')\,\dfrac{\partial}{\partial x_j''}\,\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')$

Dit doen we m.b.v. de testfunctie $f(\vec{r}) = f(x_1,x_2,x_3)$

$$-\int d^3\vec{r}\,'\,f(\vec{r}\,')(x_j''-x_j')\,\frac{\partial}{\partial x_j''}\,\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x_j''}\int d^3\vec{r}\,'\,f(\vec{r}\,')(x_j''-x_j')\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')$$

$$+\int d^3\vec{r}\,'\,f(\vec{r}\,')\,\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,') = \int d^3\vec{r}\,'\,f(\vec{r}\,')\,\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')$$

Dus $\langle \vec{r}\,'\,|\hat{p}_j|\vec{r}\,'\rangle = \dfrac{\hbar}{i}\,\dfrac{\partial}{\partial x_j''}\,\delta^{(3)}(\vec{r}\,''-\vec{r}\,') = \dfrac{\hbar}{i}\,\dfrac{\partial}{\partial x_j''}\,\langle \vec{r}\,''|\vec{r}\,'\rangle$

$\to\ \hat{p}_j = \dfrac{\hbar}{i}\,\dfrac{\partial}{\partial x_j''}$ voldoet aan de commutatierelatie.

Vervolgens behandelen wij de impuls- of $\vec{p}$-representatie gegeven door

$$\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$$

Laten wij ons eerst weer beperken tot het eendimensionale geval. Het voordeel van de $\vec{p}$-representatie is dat de kinetische energie $\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$ diagonaal is. Deze representatie is ook nuttig voor de beschrijving van verstrooiingstoestanden.De normering van $|p\rangle$ wordt gegeven door

$$\langle p|p'\rangle = 2\pi\hbar\delta(p-p')$$

met als afsluitingsrelatie

$$\hat{I} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \; |p\rangle\langle p|$$

$\{|p\rangle$ voor alle $p\epsilon\mathcal{R}\}$ vormt een basis dus voor willekeurige ψ

$$|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \; |p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \; \tilde{\psi}(p)|p\rangle$$

Waarbij $\langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p)$ de golffunctie in de impulsruimte is.

Het inprodukt wordt gegeven door

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \; \langle\psi|p\rangle\langle p|\varphi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \; \tilde{\psi}^*(p)\tilde{\varphi}(p)$$

De operator $\hat{p}$ heeft in de impulsrepresentatie de eenvoudige vorm

$$\hat{p} = \int dp \; |p\rangle p\langle p|$$

We willen nu de $\vec{p}$-representatie van de operator $\hat{\vec{r}}$ bepalen

$$|\vec{p}\rangle = |p_1, p_2, p_3\rangle$$

$$\langle\vec{p}\,''|\vec{p}\,'\rangle = (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}\,'' - \vec{p}\,') = \delta(p_1'' - p_1')\delta(p_2'' - p_2')\delta(p_3'' - p_3')(2\pi\hbar)^3$$

$$\langle\vec{p}\,''|\hat{x}_j\hat{p}_j - \hat{p}_j\vec{x}_j|\vec{p}\,'\rangle = (p_j' - p_j'')\langle\vec{p}\,''|\vec{x}_j|\vec{p}\,'\rangle$$

Het bovenstaande is ook gelijk aan

$$-\frac{\hbar}{i} \; \langle\vec{p}\,''|\vec{p}\,'\rangle = -\frac{\hbar}{i} \; \delta^3(\vec{p}\,'' - \vec{p}\,')(2\pi\hbar)^3$$

$$\Rightarrow \; \langle\vec{p}\,''|\hat{x}_j|\vec{p}\,'\rangle = \frac{\hbar}{i} \; \frac{(2\pi\hbar)^3}{p_j'' - p_j'} \; \delta^{(3)}(\vec{p}\,'' - p') = -\frac{\hbar}{i} \; \frac{\partial}{\partial_j''} \; \delta^{(3)}(\vec{p}\,'' - \vec{p}\,')$$

$$(2\pi\hbar)^3 = -\frac{\hbar}{i} \; \frac{\partial}{\partial p_j''} \; \langle\vec{p}\,''|\vec{p}\,'\rangle$$

$$\hat{x}_j = -\frac{\hbar}{i} \; \frac{\partial}{\partial p_j''} \qquad \text{voldoet aan de commutatierelatie}$$

Afleiding van de relatie tussen $\psi(x)$ en $\tilde{\psi}(p)$

$$\langle x|p\rangle = e^{ixp/\hbar} \quad \text{in drie dimensies} \rightarrow \quad \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = e^{i\dfrac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$$

$$\langle x|x'\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \; \langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \; e^{ixp/\hbar} \; e^{-ix'p/\hbar}$$

$$= \frac{2\pi}{2\pi\hbar}\, \delta\left(\frac{x-x'}{\hbar}\right) = \delta(x-x') \qquad \text{q.e.d.}$$

Opm. $\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ e^{ik(x-x')}$ (definitie van de deltafunctie)

Verder hebben we de eigenschap

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\,\delta(x)$$

In n-dimensies is de deltafunctie gedefinieerd als

$$\delta^{(n)}(\vec{r}-\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{-\infty}^{\infty} d^nk\ e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

$|x\rangle$ en $|p\rangle$ zijn een volledig stelsel zodat we het volgende kunnen schrijven

$$|x\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,|p\rangle\langle p|x\rangle \quad \text{of} \quad \langle x| = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,\langle x|p\rangle\langle p|$$

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\,\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle$$

$$= \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{ixp/\hbar}\,\tilde{\psi}(p) \qquad \text{definitie Fouriergetransformeerde}$$

De inverse Fouriergetransformeerde wordt gegeven door

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int dx\ \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int dx e^{-ixp/\hbar}\psi(x)$$

Merk op dat de vlakke golf $e^{ipx/\hbar}$ een eigenfunctie van de impulsoperator in de x-representatie is.
Merk op dat de vlakke golf $e^{-ipx/\hbar}$ een eigenfunctie van de plaatsoperator in de p-representatie is.

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,e^{ixp/\hbar} = p\ e^{ixp/\hbar} \qquad \frac{-\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\,e^{-ixp/\hbar} = x\ e^{-ixp/\hbar}$$

Opm. Generalisatie van het bovenstaande leidt tot de:

Abstracte formulering van de quantummechanica.Deze luidt als volgt.

a) Vind een maximaal commuterend stelsel van operatoren nl. $\{\hat{K}_1, \hat{K}_2, ..., \hat{K}_f\} = \hat{K}$ (observatiemaximum)

   Voorbeeld H-atoom: $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$. Heeft het deeltje een spin dan komen nog daarbij $\hat{S}^2, \hat{S}_z$.

b) Met behulp van $\hat{K}$ bepalen we een stelsel van orthonormale eigenvektoren $\{|k\rangle\}$ Deze worden geconstrueerd m.b.v. commutatierelaties zoals $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ (geldt voor ieder quantummechanisch systeem).

   Verder hebben we in drie dimensies het impulsmoment $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \rightarrow [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$.
   Deze leiden tot de verhogings- en verlagingsoperatoren gedefinieerd door $\hat{L}_+, \hat{L}_-$ met $\hat{L}_+ = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)/\sqrt{2}$ en $\hat{L}_- = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)/\sqrt{2}$.

   In het geval van de harmonische oscillator hebben we $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}$ (zie beneden).

c) Verder dienen wij de matrixelementen $\langle k|\hat{A}|k'\rangle$ van de overige operatoren te bepalen.

Nu gaan wij de verschillende representaties van de lineaire eendimensionale harmonische oscillator (zie quantumfysica 1) behandelen.

We willen de energie-of bezettingsgetal representatie (N-representatie) van de harmonische oscillator construeren. Alvorens dit te doen herhalen we eerst een aantal zaken, die in quantumfysica 1 behandeld zijn.

De Hamilton-operator van de eendimendionale lineaire harmonische oscillator wordt gegeven door.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\, m\omega^2\hat{x}^2$$

Introduceer de dimensieloze variabelen

$$\hat{x} = \hat{Q}\,\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \qquad\qquad \hat{p} = \hat{P}\,\sqrt{m\hbar\omega}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\,\hbar\omega(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) \qquad\qquad [\hat{Q}, \hat{P}] = i$$

Los het eigenwaardeprobleem op van

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

Opl. $\{u_n(Q)\}$ $n = 0, 1, 2, ...$ is een volledig orthonormaal stelsel van eigenfuncties van $\hat{H}$. De eigenwaarden zijn

$$\hat{H}u_n = \lambda_n u_n$$

met

$$\lambda_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Het spectrum van $\hat{H}$ is discreet en niet ontaard.

De energierepresentatie van de verschllende operatoren. wordt gegeven door.

a) $H_{mn} = (u_m, \hat{H} u_n) = \lambda_n \; \delta_{mn}$ is een diagonale matrix, wat het ook moet zijn.

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \ldots\ldots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} & \end{pmatrix}$$

b) $Q_{mn} = (u_m, \hat{Q} u_n)$ wordt bepaald uit de relatie

$$\hat{Q} u_n(Q) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \; u_{n+1}(Q) + \sqrt{\frac{n}{2}} \; u_{n-1}(Q)$$

De matrixelementen die ongelijk aan nul zijn worden gegeven door

$$Q_{n+1,n} = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \quad \text{en} \quad Q_{n-1,n} = \sqrt{\frac{n}{2}}$$

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \ldots\ldots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \end{pmatrix}$$

c) $P_{mn} = (u_m, \hat{P} \; u_n)$

$$\hat{P} \; u_n(Q) = -i \; \frac{du_n(Q)}{dQ} = i \; \sqrt{\frac{n+1}{2}} \; u_{n+1}(Q) - i \; \sqrt{\frac{n}{2}} \; u_{n-1}(Q)$$

$$\Rightarrow \quad P_{n+1,n} = i \; \sqrt{\frac{n+1}{2}} \qquad P_{n-1,n} = -i \; \sqrt{\frac{n}{2}}$$

$$P = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \ldots\ldots \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \end{pmatrix}$$

Verifieer dat $\hat{Q}, \hat{P}, \hat{H}$ hermitisch zijn. De eerste twee operatoren voldoen aan de commutatierelatie

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i$$

en $\hat{H}$ kan geschreven worden als

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \; \hbar\omega(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2)$$

Het is natuurlijk niet de bedoeling eerst het probleem via de Schrödingervergelijking op te lossen en daarna de matrixformulering te geven.
De matrixformulering van de quantummechanica bestond al voordat zelfs de Schrödingervergelijking bekend was.

Wij zullen dus het probleem van de harmonische oscillator nog eens aanpakken maar nu in de formulering van P.M. Dirac.

Matrixformulering van de energie- representatie (Dirac).

Definieer

$$\text{vernietigings (of annihilatie)-operator} \quad \hat{a} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{Q} + i\hat{P})$$
$$\text{scheppings (of creatie)-operator} \quad \hat{a}^\dagger = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{Q} - i\hat{P})$$

$$\Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\,\hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})$$

Def. getalsoperator $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a} \to \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N} + \hat{1}$

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{1}) \text{ en } [\hat{H}, \hat{N}] = 0$$

De eigenfuncties van $\hat{H}$ zijn ook eigenfuncties van $\hat{N}$
Hier volgt de afleiding van de eigenschappen van deze eigenfuncties

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \qquad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$$

$|n\rangle$ eigenfunctie van $\hat{N}$

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \qquad \langle n|n\rangle > 0$$

dan

1. $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n\langle n|n\rangle$
2. $\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|\hat{N} + \hat{1}|n\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle$

Nu is $\hat{a}|n\rangle = |n'\rangle \,\epsilon \mathcal{H}$ de eerste relatie (1) houdt in

$$\langle n'|n'\rangle = n\langle n|n\rangle \to n \geq 0$$

$$\hat{N}|n'\rangle = \hat{N}\hat{a}|n\rangle = \hat{a}(\hat{N} - \hat{1})|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle = (n-1)|n'\rangle$$

Dus $\hat{a}|n\rangle$ is een eigenvektor van $\hat{N}$ met eigenwaarde $n-1$

Analoog is $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ een eigenvektor van $\hat{N}$ met eigenwaarde $n+1$

Dus zijn de eigenvektoren van de vorm:

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle \quad \hat{a}^{\dagger\,2}|n\rangle \quad \hat{a}^{\dagger\,3}|n\rangle ...$$

Laten wij nu uitgaan van de eigenvektor met de kleinste eigenwaarde

De kleinste eigenwaarde van $\hat{N}$ is 0 zodat de eigenwaarden van $\hat{N}$ gegeven zijn door $0, 1, 2, ..., n, ...$ (n is een geheel niet negatief getal) met een stelsel van orthonormale eigenvektoren

$$|0\rangle, \quad |1\rangle, \quad |2\rangle, ...|n\rangle$$

De eigenschappen van de creatie-en annihilatie-operator worden gegeven door

$$\hat{a}|n\rangle = \alpha|n-1\rangle$$

$$n = \langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle = \langle \hat{a}\, n|\hat{a}\, n\rangle = |\alpha|^2 \; \langle n-1|n-1\rangle$$

$$= |\alpha|^2 \rightarrow |\alpha| = \sqrt{n} \;\; \text{kies fase van } \alpha \text{ gelijk aan nul } \;\rightarrow \alpha = \sqrt{n}$$

$$\Rightarrow \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\; |n-1\rangle \quad \text{verder} \quad a|0\rangle = 0$$

leid af $\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}\; |n+1\rangle$

stel $\quad \hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \beta|n+1\rangle \qquad \hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \beta\hat{a}|n+1\rangle$

$$\Rightarrow (\hat{N} + \hat{1})|n\rangle = \beta\sqrt{n+1}|n\rangle \quad \text{dus} \quad \beta = \sqrt{n+1}$$

door iteratie $|n\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{n!}}\; (\hat{a}^{\dagger})^n \; |0\rangle$

$|0\rangle$ is de vacuumtoestand en $|n\rangle$ is de n-de aangeslagen toestand.Verder geldt

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad \text{en} \quad \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \quad \text{als} \quad \langle 0|0\rangle = 1$$

Opm. $\langle n| = \dfrac{1}{\sqrt{n!}} \; \left[(\hat{a}^{\dagger})^n \; |0\rangle\right]^{\dagger} = \dfrac{1}{\sqrt{n!}} \; \langle 0|\hat{a}^n$

v.b. $\langle 1|1\rangle = \langle 0|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|0\rangle = \langle 0|\hat{N} + \hat{1}|0\rangle = \langle 0|\hat{N}|0\rangle$

$+ \; \langle 0|0\rangle = 1$ etc.

$\{|n\rangle\}$ vormt een compleet basisstelsel in $\mathcal{H}$ (geen bewijs). Hieruit volgt

$$\sum_n \; |n\rangle\langle n| = 1 \quad \text{afsluitingsrelatie}$$

In deze bezettingsgetal-representatie zien de matrices eruit als

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & ..... \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \end{pmatrix}$$

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & ..... \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \end{pmatrix}$$

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & ..... \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \end{pmatrix}$$

$$u_n = |n\rangle \quad \hat{Q} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{a}^\dagger + \hat{a})$$
$$\hat{P} = \tfrac{i}{\sqrt{2}}\,(\hat{a}^\dagger - \hat{a})$$

De eigenwaarden van $\hat{H}$ zijn $\hbar\omega(n + 1/2)$

i.h.b. $\quad \langle 0|\hat{H}|0\rangle = \dfrac{1}{2}\,\hbar\omega$ nulpunts-energie.

Dit voorbeeld maakt duidelijk dat men niet hoeft te werken in de $\hat{x}$- of $\hat{p}$-representatie om een probleem op te lossen. Merk op welke belangrijke rol door de commutatierelaties wordt gespeeld.

<u>x-representatie</u> $\qquad \langle n|Q\rangle = u_n(Q)$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{Q} + i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\left(Q + \frac{d}{dQ}\right)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\hat{Q} - i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\left(Q - \frac{d}{dQ}\right)$$

grondtoestand is $u_0(Q)$ met $\hat{a}\; u_0(Q) = 0$

x- of Q-representatie $\left(Q + \dfrac{d}{dQ}\right)\; u_0(Q) = 0$

De oplossing is $u_0(Q) = N_0\, e^{-1/2\;Q^2} \qquad Q = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}\; x$

$$\int dx\; |u_0(Q)|^2 = 1 \quad \rightarrow \quad N_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \; e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \; \left(\hat{a}^\dagger\right)^n \; u_0$$

$$u_n(Q) = \frac{N_0}{\sqrt{2^n n!}} \; \left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n \; e^{-1/2 \; Q^2}$$

voor een willekeurige functie $\varphi(Q)$ geldt

$$\left(Q - \frac{d}{dQ}\right)\varphi(Q) = -e^{1/2\,Q^2} \; \frac{d}{dQ} \; \left(e^{-1/2\,Q^2} \; \varphi(Q)\right)$$

$$\left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n \varphi(Q) = (-1)^n \; e^{1/2 \; Q^2} \; \frac{d^n}{dQ^n} \; \left(e^{-1/2 \; Q^2}\varphi(Q)\right)$$

$$\Rightarrow \quad u_n(Q) = \frac{N_0}{\sqrt{2^n n!}} \; (-1)^n \; e^{-1/2 \; Q^2} \; \left(e^{Q^2} \; \frac{d^n}{dQ^n} \; e^{-Q^2}\right)$$

Hermite-polynoom $H_n(z) = (-1)^n \; e^{z^2} \; \dfrac{d^n}{dz^n} \; e^{-z^2}$

$$u_n(Q) = \frac{N_0}{\sqrt{2^n n!}} \; e^{-1/2 \; Q^2} \; H_n(Q)$$

$H = \dfrac{1}{2} \; \left(Q^2 - \dfrac{d^2}{dQ^2}\right)$ Schrödingervergelijking

<u>p-representatie</u> $\qquad \langle P|n\rangle = \tilde{u}_n(P)$

$$\hat{a} = \frac{i}{\sqrt{2}} \; \left(P + \frac{d}{dP}\right) \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{-i}{\sqrt{2}} \; \left(P - \frac{d}{dP}\right)$$

$\hat{a} \; \tilde{u}_0(P) = 0 \quad \rightarrow \quad \left(P + \dfrac{d}{dP}\right)\tilde{u}_0(P) = 0 \quad \tilde{u}_0(P)$ is de grondtoestand

$$\tilde{u}_0(P) = M_0 \; e^{-1/2 \; P^2} \qquad\qquad P = \frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}}$$

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar} \; |\tilde{u}_0(p)|^2 = 1 \quad \rightarrow \quad M_0 = \left(\frac{4\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/4}$$

$$\tilde{u}_n(P) = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \; \tilde{u}_0(P) = \frac{(-i)^n M_0}{\sqrt{2^n n!}} \; \left(P - \frac{d}{dP}\right)^n \; e^{-1/2 \; P^2}$$

$$= \frac{(-i)^n M_0}{\sqrt{2^n n!}} \; H_n(P) \; e^{-1/2 \; P^2}$$

$H_n(P)$ Hermite-polynoom

Een voorbeeld van een andere representatie is de coherente representatie. In dit geval wordt de operator $\hat{a}$ door een diagonale matrix voorgesteld.

$\hat{a}\varphi(z) = z\varphi(z) \quad z\epsilon\mathcal{C}$ en $\varphi(z)\epsilon\mathcal{H} \quad$ maar $\; z \not\epsilon\mathcal{R} \;$ waarom ?

VI. Mengsels en de dichtheidsoperator

Er bestaat een belangrijk verschil tussen quantumstatistiek en gewone statistiek !!

Meten: quantummechanisch gezien wil dat zeggen een nieuwe toestand veroorzaken.

Men maakt een onderscheid tussen zuivere en onzuivere toestanden.

Def. zuivere toestand

Deze wordt beschreven door een superpositie van golffuncties.

In het geval van een zuivere toestand wordt de quantummechanische toestand door een golffunctie ψ bepaald. Kent men ψ dan heeft men de maximaal mogelijke informatie.

Def. Waarschijnlijkheid. $W(x) = |\psi(x)|^2$

Het wezen van de quantumstatistiek is dat ψ geschreven kan worden als een superpositie van golffuncties.

voorbeeld: twee spleten-experiment. $\psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$ met $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$

$$W(x) = |c_1|^2\ W_1(x) + |c_2|^2\ W_2(x) + \underbrace{c_1 c_2^*\ \psi_1(x)\psi_2^*(x) + c_1^* c_2\ \psi_1^*(x)\psi_2(x)}_{\text{interferentie}-\text{termen}}$$

In de gewone statistiek zijn geen interferentie-termen aanwezig. In dit geval worden de waarschijnlijkheden opgeteld. Dit is niet het geval in de quantummechanica waar juist de golffuncties worden opgeteld. Het laatste geeft dan ook aanleiding tot het interferentie-patroon.

Dus in de quantummechanica zijn niet alleen $|\psi_1|^2$ en $|\psi_2|^2$ bekend maar ook de relatieve fase tussen ψ_1 en ψ_2.
De verwachtingswaarde van de operator $\hat{A}$ wordt gegeven door

$$\bar{A} = (\psi, \hat{A}\psi) = |c_1|^2\ (\psi_1, \hat{A}\psi_1) + |c_2|^2\ (\psi_2, \hat{A}\psi_2)$$

$$+ c_1^* c_2\ (\psi_1, \hat{A}\psi_2) + c_1 c_2^*\ (\psi_2, \hat{A}\psi_1)$$

Echter het kan gebeuren dat een toestand niet door een enkele golffunctie ψ bepaald wordt. Dit is het geval als men de fasen tussen ψ_1 en ψ_2 niet kent.

In het laatste krijgen we te maken met een mengsel of een gemengde toestand, waarbij zowel de quantum-als de gewone statistiek van toepassing is.

Def. gemengde (onzuivere) toestand Deze wordt beschreven door een superpositie van waarschijnlijkheden).

Hier is de toestand niet door een enkele golffunctie bepaald (relatieve fase tussen de ψ_i's onbekend)

$$\tilde{W}(x) = g_1|\psi_1(x)|^2 + g_2|\psi_2(x)|^2 \qquad 0 \leq g_i \leq | \quad \text{met gewicht } g_i$$

$$\text{of } \ \tilde{W}(x) = g_1 W_1(x) + g_2 W_2(x)$$

$$\text{met } \ W_i(x) = |\psi_i(x)|^2 \ \text{ en } \ \sum_i g_i = 1$$

Merk op dat ψ_1 en ψ_2 zelf weer geschreven kunnen worden als een superpositie van golffuncties.

De fase tussen ψ_1 en ψ_2 is onbekend.

$$\bar{A} = g_1(\psi_1, \hat{A}\psi_1) + g_2(\psi_2, \hat{A}\psi_2)$$

Generaliseren we het bovenstaande dan geldt het volgende. Zij $\{|m\rangle\}$ een verzameling zuivere toestanden en g_m het gewicht van de zuivere toestand $|m\rangle$ in het statistische mengsel $\{|m\rangle\}$. Neem aan dat $|m\rangle$ genormeerd is op 1. De $|m\rangle$'s hoeven niet orthogonaal te zijn. De verwachtingswaarde van de operator $\hat{A}$ is dan gegeven door

$$* \qquad \bar{A} = \sum_m g_m \langle m|\hat{A}|m\rangle \quad \text{met} \quad \langle m|m\rangle = 1$$

Def. dichtheidsoperator $\hat{\rho}$

$$* \qquad \hat{\rho} = \sum_m g_m \, |m\rangle\langle m| \qquad 0 \leq g_m \leq 1 \quad \sum_m g_m = 1$$

$\hat{\rho}$ is de dichtheidsoperator of statistische operator.
Als we het spoor van een matrix A noteren door $Sp(A)$ dan geldt

$$* \qquad \bar{A} = Sp\ (\rho A) = Sp\left(\sum_m g_m\ |m\rangle\langle m|A\right)$$

$$= \sum_m g_m\ Sp\,(|m\rangle\langle m|A) \qquad \underline{\text{dit bewijzen we}}$$

Stel $\hat{P}_m = |m\rangle\langle m|$ is een projectie-operator op de zuivere toestand $|m\rangle$

$$\Rightarrow \quad \hat{\rho} = \sum_m g_m\ \hat{P}_m \quad \rightarrow \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \ \text{ want } \ g_m \epsilon R$$

als $|n\rangle$ een orthormaal volledig stelsel is dan

$$Sp\,(P_m) = \sum_n \langle n|m\rangle\langle m|n\rangle = \sum_n |\langle n|m\rangle|^2 = \langle m|m\rangle = 1$$

We moeten nu bewijzen dat $Sp(|m\rangle\langle m|A) = \langle m|\hat{A}|m\rangle$

$$Sp\,(|m\rangle\langle m|A) = Sp\,(P_m A) = Sp\ \left(P_m^2 A\right) = Sp\,(P_m A P_m)$$

$$= Sp\left(|m\rangle\langle m|\hat{A}|m\rangle\langle m|\right) = \langle m|\hat{A}|m\rangle\ Sp\,(|m\rangle\langle m|)$$

$$= \langle m|\hat{A}|m\rangle\ Sp\,(P_m) = \langle m|\hat{A}|m\rangle$$

m.a.w.

$$\bar{A} = \sum_m g_m\ \langle m|\hat{A}|m\rangle$$

Dit is dus in overeenstemming met de definitie.

bijzonder geval $\hat{A} = \hat{I} \quad \Rightarrow \quad Sp\,(\rho) = 1$

$* \qquad \Rightarrow \ \hat{\rho}$ is een positief definiete hermitische operator met $Sp\,(\rho) = 1$

voor elke ψ geldt

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle = \sum_m g_m\ |\langle\psi|m\rangle|^2 \ \geq 0 \quad \text{positief definiet}$$

$$Sp\,(\rho) = \sum_m g_m\ \underbrace{Sp\ (|m\rangle\langle m|)}_{=1 \text{ zie boven}} = \sum_m g_m = 1$$

$* \qquad$ Men kan laten zien dat alle eigenwaarden van $\hat{\rho}$ tussen 0 en 1 liggen

Voor elke ψ geldt de Schwarz-ongelijkheid

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle = \sum_m g_m\ |\langle\psi|m\rangle|^2 \ \leq \ \sum_m g_m\ |\langle\psi|\psi\rangle|\ \ |\langle m|m\rangle|$$

$$= \sum_m g_m \, |\langle\psi|\psi\rangle| = \langle\psi|\psi\rangle$$

Bovendien geldt

$$\hat{\rho}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \quad \text{met} \quad a \leq 1 \quad \text{dan uit} \quad \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0 \quad \rightarrow \quad a \geq 0$$

Noem D het domein van $\mathcal{H}$ d.w.z. $D \subset \mathcal{H}$

$$\hat{P}_D \quad \text{is de projectie operator} \quad \hat{P}_D\mathcal{H} = D$$

De waarschijnlijkheid W_D dat het resultaat van de meting tot het domein D behoort wordt gegeven door

$$W_D = Sp\,(\rho\; P_D) = \sum_m g_m \, \langle m|\hat{P}_D|m\rangle$$

$$\text{i.h.b.} \;\; W_\psi = Sp\,(\rho|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \text{ met } \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

W_ψ is de waarschijnlijkheid om het systeem in de toestand $|\psi\rangle$ aan te treffen.
Voor een zuivere quantummechanische toestand (geen mengsel) geldt

$$Sp\left(\rho^2\right) = 1$$

Men kan laten zien dat $\hat{\rho}$ een zuivere projectie-operator voorstelt en dat

$$\hat{\rho}^{\,2} = \hat{\rho}$$

Bewijs. Er is een $|m\rangle$ waarvoor geldt $g_m = 1$ en $g_i = 0$ voor $i \neq m$ Dan is $\hat{\rho}$ een projectie-operator. Dus

$$\hat{\rho}^{\,2} = \hat{\rho} \qquad \text{en} \qquad Sp\left(\rho^2\right) = Sp\,(\rho) = 1$$

Stelling
Als $Sp(\rho^2) = 1$ dan bevindt het systeem zich in een zuivere toestand (laat dit zien).

Stelling
Iedere positief definiete hermitische operator waarvoor de waarde van het spoor gelijk aan 1 is kan worden opgevat als een dichtheidsoperator (Messiah VIII.72)

Conclusie
Het is altijd mogelijk de dynamische toestand van een systeem door een dichtheidsoperator te beschrijven, onafhankelijk van het feit of de toestand zuiver of onzuiver is.

Toepassingen dichtheidsoperator

A) Zwarte straler

Een systeem in thermodynamisch evenwicht wordt beschreven door

$$\rho(\vec{p},\vec{q}) = Ae^{-\frac{H(\vec{p},\vec{q})}{kT}} \qquad \text{canonieke distributiefunctie}$$

$H =$ Hamiltoniaan $\qquad (\vec{p}, \vec{q}) \underset{D}{=} (\vec{p}_1, ..., \vec{p}_N; \vec{q}_1, ..., \vec{q}_N)$

In de quantummechanica geldt $[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ dus wordt H een hermitische operator. Hieruit volgt

$$\hat{\rho} = \frac{e^{\frac{-\hat{H}}{kT}}}{Sp\left(e^{-\frac{H}{kT}}\right)} \quad \text{met} \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \quad \text{en} \quad Sp\ \rho = 1$$

Volgens de voorafgaande stelling kan $\hat{\rho}$ worden opgevat als een dichtheidsoperator van een quantummechanisch veeldeeltjes systeem.

$$\hat{\rho} = \sum_\psi g_\psi\ \hat{P}_\psi \quad \text{met} \quad \hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Waarbij $\{|\psi\rangle\}$ een canoniek ensemble voorstelt. Verder is $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ echter niet noodzakelijkerwijs is $\langle\psi|\psi'\rangle = 0$ als $\psi \neq \psi'$. $\{|\psi\rangle\}$ stelt dus ook een quantumstatisch mengsel voor.
Beschouw nu een verzameling onafhankelijke harmonische oscillatoren in thermodynamisch evenwicht.

$$\hat{H} = \sum_\alpha \hat{H}_\alpha(p_\alpha, q_\alpha)$$

Hier stelt $\hat{H}_\alpha$ de hamiltoniaan van één oscillator α voor.

$$\hat{\rho} = C \prod_\alpha \hat{\rho}_\alpha \quad \text{met} \quad \hat{\rho}_\alpha = \frac{e^{-\frac{\hat{H}_\alpha}{kT}}}{Sp\ \left(e^{-\frac{H_\alpha}{kT}}\right)}$$

$\hat{\rho}_\alpha$ is de dichtheidsoperator voor een ééndeeltjes mengsel.

Beschouw <u>de eendimensionale harmonische oscillator</u>.

De energie-eigentoestanden zijn: $|n\rangle$ met $\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle$

$$Sp\left(e^{-H/kT}\right) = \sum_n \langle n|e^{-\hat{H}/kT}|n\rangle = \sum_n e^{-\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{kT}}$$

$$= \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{2kT}}}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

De verwachtingswaarde van de energie van de harmonische oscillator is gelijk aan

$$\bar{E} = Sp\,(\rho\, H) = \frac{\sum_n \langle n|\ \hat{H}e^{-\hat{H}/kT}|n\rangle}{Sp\,(e^{-H/kT})}$$

$$= \frac{1 - e^{-\hbar\omega/kT}}{e^{-\hbar\omega/2kT}} \sum_n (n + 1/2)\ \hbar\omega e^{-\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{kT}}$$

$$= \hbar\omega \left\{\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} + \frac{1}{2}\right\} \qquad \frac{1}{2}\hbar\omega \ \text{ is de nulpuntsenergie bij T} \to 0$$

Verder hebben wij de volgende relaties gebruikt

$$\sum_0^\infty x^n = \frac{1}{1-x} \qquad \sum_0^\infty n x^n = \frac{x}{(1-x)^2} \quad \text{(door differentiatie)}$$

als we de energie van de grondtoestand aftrekken dan (In een foton gas betekent dit de vacuum energie aftrekken) wordt het resultaat

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \qquad \text{eigenschap Bose-gas}$$

Extreme gevallen.

1) $kT >> \hbar\omega$. De temperatuur is zo groot dat quantumeffecten verwaarloosbaar zijn.

$$\bar{E} \sim kT \qquad e^{\hbar\omega/kT} = 1 + \frac{\hbar\omega}{kT} + 0\left(\frac{1}{T^2}\right)$$

2) $kT << \hbar\omega$. Quantumeffecten zijn zeer belangrijk

$$\bar{E} \sim \hbar\omega e^{-\hbar\omega/kT}$$

Het electromagnetische veld (licht) kan in de quantumtheorie worden beschreven als een systeem van onafhankelijke harmonische oscillatoren.

Elke impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ en polarisatie richting (2) corresponderen met een harmonische oscillator.

Het quantumgetal $n_i(\vec{k})$ is dus een functie van $\vec{k}$ en de polarisatierichting i. Het correspondeert met het aantal fotonen met impuls $\vec{p}$, energie $\hbar\omega$ en polarisatierichting i (twee onafhankelijke polarisatierichtingen voor ieder foton).

Per eenheid volume is de dichtheid van de oscillatoren met impuls $\vec{p}$ in het volume element $d^3\vec{p}$ gelijk aan

$$2\,\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{2}{c^3}\,\nu^2\,d\nu\,d\Omega \quad \text{met} \quad p = \frac{E}{c} = \frac{2\pi\hbar\nu}{c}$$

De ruimtehoek wordt gegeven door $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ met $0 < \theta < \pi$ en $0 < \phi < 2\pi$
Het totaal aantal oscillatoren per eenheidsvolume met een frequentie tussen ν en $\nu + d\nu$ is gelijk aan

$$d\nu \int d\Omega\,\frac{2}{c^3}\,\nu^2 = \frac{8\pi}{c^3}\,\nu^2 d\nu \quad \text{met} \quad \int d\Omega = 4\pi$$

De gemiddelde energie van een oscillator met frequentie ν is gelijk aan

$$\bar{E}(\nu) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} \qquad \omega = 2\pi\nu$$

De energiedichtheid $\mathcal{E}(\nu)$ van het stralingsveld in thermodynamisch evenwicht met een frequentie tussen ν en $\nu + d\nu$ wordt gegeven door

$$\mathcal{E}(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\ \nu^2\ \bar{E}(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\ \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Planckse stralingskromme.

frequentieverdeling
zonnestraling

Klassieke limiet $\hbar\omega << kT$

$$\mathcal{E}(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\ \nu^2\ kT \qquad \text{(wet van Rayleigh-Jeans)}$$

Bovenstaande formule kan niet de energiedichtheid voor grote frequenties beschrijven vanwege het quantumeffect. Dit werd historische the ultraviolet (UV) catastrofe genoemd.

Voor $\hbar\omega >> kT$ hebben we

$$\mathcal{E}(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\ \nu^3\ e^{-h\nu/kT} \qquad \text{(wet van Wien)}$$

De totale energie van het stralingsveld in thermodynamisch evenwicht is

$$\begin{aligned}
\mathcal{E} &= \int_0^\infty d\nu\ \mathcal{E}(\nu) \\
\mathcal{E} &= \frac{8\pi h}{c^3}\ \int_0^\infty d\nu\ \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{8\pi h}{c^3}\ \left(\frac{kT}{h}\right)^4\ \int_0^\infty dy\ \frac{y^3}{e^y - 1} \\
\mathcal{E} &= \frac{\pi^2}{15}\ \frac{k^4}{(\hbar c)^3}\ T^4 = \sigma T^4 \qquad \text{(wet van Stefan-Boltzmann)}
\end{aligned}$$

Hierbij hebben we bij de afleiding van deze wet gebruik gemaakt van de relaties

$$Li_4(x) = \frac{1}{6}\int_0^\infty dy \frac{y^3}{\frac{e^y}{x} - 1} \qquad \text{polylogarithmische functie}$$

$$Li_4(1) = \frac{1}{6}\int_0^\infty\ dy\ \frac{y^3}{e^y - 1} = \zeta(4)\ \text{ met }\ \zeta(4) = \frac{2}{5}\ \zeta(2)^2\ \text{ en }\ \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$$

B) Verstrooiing van $spin = 1/2$ deeltjes aan $spin = 0$ deeltjes

Dit is een twee-niveausysteem. Alleen spin-up en spin-down toestanden zijn mogelijk.

De invallende bundel van $spin = 1/2$ deeltjes is een mengsel met een polarisatiegraad $|P|$ die tussen 1 en 0 ligt.
De dichtheidsmatrix is een 2×2 matrix.

$$\rho = \rho^\dagger \qquad Sp\,(\rho) = 1$$

ρ is uit te drukken in een complete set van hermitische matrices. Voor deze worden gekozen de Pauli-spin-matrices $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ en de eenheidsmatrix 1

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\ \sigma_z \qquad \text{cyclisch}$$

$$\text{basis}\ \ \chi_z^{(1/2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi_z^{(-1/2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Waarbij als quantisatie-as de z-as is gekozen.
De bovenstaande Pauli-spinoren $\chi_z^{(s)}$ zijn de eigenvektoren van σ^2 en σ_z.
De dichtheidsmatrix wordt gegeven door

$$\rho = \frac{1}{2}\,(1 + \vec{\sigma}\vec{P}) \qquad \vec{P} = P.\vec{\hat{P}} \qquad |\vec{\hat{P}}| = 1$$

$|P|$ wordt de polarisatie van het systeem genoemd

$$\rho = \sum_{m=\pm 1/2} g_m\ P_m$$

De projectie-operatoren worden gegeven door

$$P_{1/2} = \frac{1 + \vec{\sigma}\vec{\hat{P}}}{2} \quad P_{-1/2} = \frac{1 - \vec{\sigma}\vec{\hat{P}}}{2}$$

met de gewichten

$$g_+ = \frac{1+P}{2} \qquad g_- = \frac{1-P}{2} \qquad g_+ + g_- = 1\ !$$

$$0 \leq g_\pm \leq 1 \quad \rightarrow \quad 0 \leq \mid P \mid \leq 1$$

$P = 0$ het systeem is ongepolariseerd

$\mid P \mid = 1$ het systeem is volledig gepolariseerd

In het laatste geval hebben wij met een zuivere toestand te doen.
Voorwaarde voor een zuivere toestand is

a) $\rho^2 = \rho$

$$\begin{aligned}
\rho^2 &= \frac{1}{4}\,(1 + P^2 + 2\vec{\sigma}\vec{P}) \\
\rho &= \frac{1}{2}\,(1 + \vec{\sigma}\vec{P}) \\
\rho^2 &= \rho \rightarrow \mid P \mid = 1
\end{aligned}$$

b) $Sp(\rho^2) = 1$

$$\begin{aligned}
Sp\left(\rho^2\right) &= \frac{1}{2}\,(1 + P^2) = 1 \\
\rightarrow \mid P \mid = 1
\end{aligned}$$

Laat ons nu het mengsel bekijken als de spin in de richting $\vec{n}$ met $|\vec{n}| = |$ gequantiseerd wordt. De Pauli-spinoren worden dan gegeven door

$$\chi_{\vec{n}}^{\pm 1/2} \qquad \text{quantisatie-as in de } \vec{n}\text{-richting.}$$

Deze zijn eigenvektoren van σ^2 en $\vec{\sigma}.\vec{n}$. De expliciete uitdrukkingen zijn

$$\chi_n^{(1/2)} = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \; e^{-i\phi/2} \\ \sin\theta/2 \; e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \qquad \chi_n^{(-1/2)} = \begin{pmatrix} -\sin\theta/2 \; e^{-i\phi/2} \\ \cos\theta/2 \; e^{i\phi/2} \end{pmatrix}$$

met $\vec{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ en $\vec{\sigma}\vec{n}\;\chi_n^{(s)} = 2s\;\chi_n^{(s)}$

op basis $\chi_n^{(\pm 1/2)}$ $\qquad \vec{\sigma}\vec{n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$!!

De projectie-operatoren zijn

$$P_{\vec{n}} = \frac{1 + \vec{\sigma}\vec{n}}{2} \qquad P_{-\vec{n}} = \frac{1 - \vec{\sigma}\vec{n}}{2}$$

Die als volgt werken op de Pauli-spinoren

$$\begin{aligned}
P_{\vec{n}}\chi_{\vec{n}}^{(1/2)} &= \chi_{\vec{n}}^{(1/2)} & \qquad P_{\vec{n}}\chi_{\vec{n}}^{(1/2)} &= 0 \\
P_{-\vec{n}}\chi_{\vec{n}}^{(1/2)} &= 0 & \qquad P_{-\vec{n}}\chi_{\vec{n}}^{(-1/2)} &= \chi_n^{(-1/2)}
\end{aligned}$$

De spin vector $\vec{S}$ geprojecteerd op de richting $\vec{n}$ is

$$\vec{S}\vec{n} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}\vec{n} = \frac{\hbar}{2}\;(P_{\vec{n}} - P_{-\vec{n}})$$

De waarschijnlijkheid dat we de waarde $\pm\ 1/2$ voor de spin meten is dan

$$W_{\pm}(\vec{n}) = Sp\;\,(\rho\;P_{\pm\vec{n}}) = \frac{1 \pm \vec{P}\vec{n}}{2}$$

Hierbij hebben wij gebruik gemaakt van de relatie

$$Sp\left((\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b})\right) = 2\vec{a}\vec{b}$$

Als we nu N metingen uitvoeren op de bundel dan vinden we

$$N_{\pm} = N\ \frac{1 \pm \vec{P}\vec{n}}{2}$$

deeltjes met spin $\pm 1/2$ waarbij $\vec{n}$ de quantisatie-as is.

De polarisatie $P(\vec{n}))$ van deze bundel in de richting $\vec{n}$ is gegeven door

$$P(\vec{n}) = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-} = \vec{P}\vec{n} = Sp(\rho\vec{\sigma}\vec{n})$$

Deze formule laat zien dat $|P|$ de polarisatie van ons systeem is.
Laat het systeem (bundel) gepolariseerd zijn in de richting $\vec{n}$

$$\vec{P} = P\vec{n} \quad \rightarrow \quad \rho = \frac{1}{2}\ (1 + P\vec{\sigma}\vec{n})$$

De dichtheidsmatrix ρ t.o.v. de eigenvektoren van σ^2 en σ_z, die gegeven worden door $\chi_z^{(s)}$, heeft de vorm

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + P\cos\theta & P\sin\theta e^{-i\phi} \\ P\sin\theta e^{i\phi} & 1 - P\cos\theta \end{pmatrix}$$

T.o.v. eigenvektoren van σ^2 en $\vec{\sigma}\vec{n}$, die
gegeven worden door $\chi_{\vec{n}}^{(s)}$, wordt de dichtheidsmatrix

$$\rho = \frac{1}{2}\ \begin{pmatrix} 1 + P & 0 \\ 0 & 1 - P \end{pmatrix}$$

Wij hebben nu weer de volgende gevallen

a) Ongepolariseerd

$$P = 0 \quad \text{en} \quad \rho = \frac{1}{2}\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dit is weer onafhankelijk van de basis.

b) Volledige gepolariseerd

$$P = 1 \ \ \text{en} \ \ \rho = \frac{1 + \vec{\sigma}\vec{n}}{2} \ \ \text{(projectie-operator)}$$

t.o.v. basis $\chi_z^{(s)}$ ziet ρ eruit als

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & 1-\cos\theta \end{pmatrix}$$

t.o.v. basis $\chi_{\vec{n}}^{(s)}$ ziet ρ eruit als

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Als de bundel gepolariseerd is dan is de matrix afhankelijk van de basiskeuze.

VII. Schrödinger-, Heisenberg- en interactiebeeld, verstrooiingsoperator

Er zijn twee soorten veranderingen in een quantummechanisch systeem

a) Acausale verandering t.g.v. een meting. De relatie tussen de golffunctie voor de meting en de golffunctie na de meting is verbroken.

b) Wanneer er geen metingen worden uitgevoerd kan het systeem nog steeds evolueren in de tijd. Deze verandering is causaal en er bestaat dan ook een relatie tussen de golffuncties op verschillende tijdstippen.
We zullen op punt b) dieper ingaan.

A) Schrödingerbeeld

De tijdsevolutie wordt beschreven door tijdsafhankelijke golffuncties. De operatoren zijn daarentegen stationair (evolueren niet met de tijd) tenzij ze expliciet tijdsafhankelijk zijn.
Dit laatste formuleren we aldus

$$* \qquad \frac{d\hat{A}_s}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_s}{\partial t} \quad \rightarrow \quad \frac{d\hat{A}_s}{dt} = 0$$

mits $\hat{A}_s$ expliciet onafhankelijk is van t. Verder postuleren we dat de lineaire superpositie van toestanden behouden is in de loop van de tijd. Hieruit volgt dat de correspondentie tussen $|\psi(t0)\rangle$ en $|\psi(t)\rangle$ lineair is. We kunnen dan een lineaire operator definiëren

$$|\psi_s(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi_s(t_0)\rangle$$

$\hat{U}$ is een tijdsevolutie operator.
Verder wordt de tijdsevolutie gegeven door de Schrödingervergelijking

$$** \qquad \hat{H}(t)|\psi_s(t)\rangle = i\hbar \, \frac{\partial}{\partial t} \, |\psi_s(t)\rangle$$

$$\rightarrow \quad \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0) = i\hbar \, \frac{\partial}{\partial t} \, \hat{U}(t,t_0)$$

$$\text{Oplossing} \quad \hat{U}(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \; \hat{H}(t')\hat{U}(t',t_0) \text{ met } \hat{U}(t_0,t_0) = 1$$

Als $\hat{H}$ hermitisch is dan is $\hat{U}$ unitair.

$\rightarrow$ behoud van waarschijnlijkheid : $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$

Is het systeem conservatief $\rightarrow \hat{H}$ is onafhankelijk van t. In dit geval krijgen we de volgende oplossing voor de tijdsevolutieoperator

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$$

opmerking De unitariteit van $\hat{U}$ is triviaal. Een ander gevolg is

$$\text{neem } t_0 = 0 \quad |\psi_s(0)\rangle \equiv \sum_n \ \psi_n|u_n\rangle \text{ met } \hat{H}|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle$$

$$|\psi_s(t)\rangle = e^{-i/\hbar \hat{H}t} \ \left\{\sum_n \ \psi_n|u_n\rangle\right\} = \sum_n \ \psi_n \ e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}} \ |u_n\rangle$$

Voor de verwachtingswaarden geldt

$$\bar{A}_t \underset{D}{=} \langle\psi_s(t)|\hat{A}_s|\psi_s(t)\rangle = \langle\psi_s(t_0)|\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}_s U(t,t_0)|\psi_s(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow$$

$$\frac{d\bar{A}_t}{dt} = \langle\psi_s(t)|\frac{1}{i\hbar} \ \left[\hat{A}_s, \hat{H}\right] + \frac{\partial\hat{A}_s}{\partial t} \ |\psi_s(t)\rangle$$

Als het systeem conservatief is en $|\psi_s(0)\rangle$ is een eigentoestand van $\hat{H}$ dan

$\bar{A}_t = \bar{A}_0$ het systeem <u>blijft</u> in de eigentoestand (stationaire toestand)

B) <u>Heisenbergbeeld</u>

De tijdsevolutie wordt beschreven door tijdsafhankelijke operatoren. De golffuncties zijn tijdsonafhankelijk.
Het eerste betekent

$|\psi_H\rangle \underset{D}{=} |\psi_s(0)\rangle$ voor alle t $\qquad |\psi_H\rangle$ is tijdsonafhankelijk

$$* \qquad \Rightarrow \quad i\hbar \ \frac{d|\psi_H\rangle}{dt} = 0$$

Een operator in het Heisenbergbeeld wordt gegeven door

$$\hat{A}_H(t) \underset{D}{=} \hat{U}^\dagger(t,t_0)A_s \ \hat{U}(t,t_0)$$

$\hat{A}_s$ kan eventueel expliciet tijdsafhankelijk zijn. $\hat{U}$ is unitair.

Heisenberg bewegingsvergelijking

$$** \qquad \frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \ \left[\hat{A}_H, \hat{H}_H\right] + \frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t}$$

als $\hat{H}(t) = \hat{H}^\dagger(t)$

Bewijs

$$i\hbar \, \frac{\partial}{\partial t} \, \hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$$

$$i\hbar \, \frac{\partial}{\partial t} \, \hat{U}(t,t_0)^\dagger = -\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{H}(t)$$

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \hat{U}^\dagger(t,t_0) \, \frac{\partial A_s}{\partial t} \, \hat{U}(t,t_0) - \frac{1}{i\hbar} \, \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{H}(t)\hat{A}_s\hat{U}(t,t_0)$$

$$+\frac{1}{i\hbar} \, \hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}_s\hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$$

$$= \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \, \hat{U}(t,t_0)^\dagger \, \left[\hat{A}_s, \hat{H}(t)\right] \hat{U}(t,t_0)$$

$$= \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \, \left[\hat{U}(t,t_0)^\dagger \, \hat{A}_s\hat{U}(t,t_0), \hat{U}(t,t_0)^\dagger \, \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)\right]$$

$$= \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \, \left[\hat{A}_H, \hat{H}_H\right]$$

Als het systeem conservatief is $\rightarrow \; \hat{H}_H = \hat{H}$

en $$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \, \left[\hat{A}_H, \hat{H}\right]$$

$$\bar{A}_t = \langle \psi_H | \hat{A}_H | \psi_H \rangle$$

$$\frac{d\bar{A}_t}{dt} = \langle \psi_H | \frac{1}{i\hbar} \, \left[\hat{A}_H, \hat{H}_H\right] + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} | \psi_H \rangle$$

Merk op dat alleen in het Heisenbergbeeld de bovenstaande vergelijking ook voor operatoren geldt.

Voorbeeld 1 Gegeven is $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

Laat zien dat $[\hat{x}(t), \hat{p}(t')] = i\hbar$ als $t = t'$ voor het geval dat het systeem conservatief is.

Voorbeeld 2 De harmonische oscillator in het Heisenbergbeeld

Laat zien dat $\hat{a}_H(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}$ *en* $\hat{a}^\dagger_H(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}$. Toon verder aan dat

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x}(0) \; \cos\omega t + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \; \sin\omega t$$

$$\hat{p}_H(t) = \hat{p}(0)\ \cos\omega t - m\omega\hat{x}(0)\ \sin\omega t$$

door gebruik te maken van de relaties:

$$\hat{x}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\ (\hat{a}^\dagger(t) + \hat{a}(t)) \quad \hat{p}(t) = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\ i(\hat{a}^\dagger(t) - \hat{a}(t))$$

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}\ \left[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]\right] + \frac{1}{3!}\ \left[\hat{A},\left[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]\right]\right] + \cdots$$

<u>Heisenbergbeeld en correspondentie principe</u>.

$$\begin{array}{lllll} \dfrac{d\hat{q}_i}{dt} & = & \frac{1}{i\hbar}\,[\hat{q}_i,\hat{H}] & = & \frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_i} \\ & & & & \\ \dfrac{d\hat{p}_i}{dt} & = & \frac{1}{i\hbar}\,[\hat{p}_i,\hat{H}] & = & -\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{q}_i} \end{array}$$

Hamiltons bewegingsvergelijking van operatoren $\hat{p}_i, \hat{q}_i$ (klassieke mechanica)

Dit laatste volgt uit

$$[\hat{p}_i,\hat{A}] = -i\hbar\ \frac{\partial\hat{A}}{\partial q_i}$$

$$[\hat{q}_i,\hat{A}] = i\hbar\ \frac{\partial\hat{A}}{\partial p_i}$$

In het algemeen geldt voor een klassieke dynamische variabele $A_{cl} = A(q_1,\cdots,q_N;p_1,\cdots,p_N)$

$$\frac{dA_{cl}}{dt} = \frac{\partial A_{cl}}{\partial t} + \{A_{cl},H_{cl}\}$$

Dit is het klassiek analogon van de Heisenbergbewegingsvergelijking. Verder definiëren wij de Poisson-haakjes

$$\{f,g\} \underset{D}{=} \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\,\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\,\frac{\partial g}{\partial q_i}\right)$$

$$\begin{array}{ccc} \text{klassieke mechanica} & \longrightarrow & \text{quantum mechanica} \\ & & \\ \{f,g\} & \longrightarrow & [\hat{f},\hat{g}] \end{array}$$

C) Interactiebeeld

In veel gevallen kan men de hamiltoniaan in twee delen opsplitsen

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \qquad \underline{V \text{ is een kleine storing}}$$

$\hat{H}_0$ is de ongestoorde hamiltoniaan waarvan in principe de eigenfuncties bekend zijn. Neem aan dat $\hat{H}_0$ tijdsonafhankelijk is (dit is niet noodzakelijk), definieer het interactiebeeld

$$|\psi_I(t)\rangle \underset{D}{=} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi_s(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\ e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi_s(0)\rangle$$

$$\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\ \hat{A}_s(t)\ e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

De bewegingsvergelijkingen in het interactiebeeld zijn

$$* \qquad i\hbar\ \frac{d}{dt}\ |\psi_I(t)\rangle = \hat{H}_I(t)|\psi_I(t)\rangle \quad \text{met} \quad \hat{H}_I = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

$$* \qquad \frac{d\hat{A}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\ \left[\hat{A}_I, \hat{H}_0\right] + \frac{\partial \hat{A}_I(t)}{\partial t}$$

De tijdsafhankelijkheid van $|\psi_I(t)\rangle$ wordt gegeven door $\hat{H}_I$ $(\hat{V})$ en de tijdsafhankelijkheid van de operatoren $\hat{A}_I(t)$ door $\hat{H}_0$. Vandaar dat het interactiebeeld ook wel eens het intermediaire beeld wordt genoemd.

Bewijs:

$$i\hbar\ \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = i\hbar\ \frac{d}{dt}\ \left\{e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi_s(t)\rangle\right\} = -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi_s(t)\rangle$$

$$+e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} i\hbar\ \frac{d}{dt}\ (\psi_s(t)\rangle = -\hat{H}_0|\psi_I(t)\rangle + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi_I(t)\rangle$$

$$= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\ (\hat{H} - \hat{H}_0)\ e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\ |\psi_I(t)\rangle = \hat{H}_I(t)|\psi_I(t)\rangle$$

In dit beeld wordt de niet triviale tijdsevolutie van de toestanden gegeven door $\hat{H}_I$

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi_I(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar\ \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} = \hat{H}_I(t)\ \hat{U}(t, t_0) \quad \text{met} \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$$

Oplossing $\quad \hat{U}(t,t_0) = \hat{1} + \dfrac{1}{i\hbar} \displaystyle\int_{t_0}^{t} dt' \ \hat{H}_I(t')\hat{U}(t',t_0)$

Deze integraalvergelijking kan worden opgelost door iteratie

$$\hat{U}(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(t,t_0)$$

$$\begin{array}{lll} \text{met} & \hat{U}^{(0)}(t,t_0) & = \hat{1} \\ & \hat{U}^{(1)}(t,t_0) & = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 \ \hat{H}_I(t_1) \\ & \hat{U}^{(2)}(t,t_0) & = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2) \\ \text{alg.} & \hat{U}^{(n)}(t,t_0) & = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 \hat{H}_I(t_1)\hat{U}^{(n-1)}(t_1,t_0) \end{array}$$

Tijdsgeordend Produkt (Dyson)

Definitie $T[\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\cdots\hat{H}_I(t_n)] \underset{D}{=} \hat{H}_I(t_i)\hat{H}_I(t_j)\cdots\hat{H}_I(t_k)$

met $t_i > t_j > \cdots > t_k$

$>$ $=$ later dan

Men kan dan schrijven

$$\hat{U}(t,t_0) = T\left\{ e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \ \hat{H}_I(t')} \right\}$$

of wat hetzelfde is

$$\hat{U}^{(n)}(t,t_0) = \frac{1}{n!}\frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n \ T\left(\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\cdots\hat{H}_I(t_n)\right)$$

Bewijs: (slechts voor $n=2$)

We moeten laten zien dat

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \ T\left\{\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\right\} = 2\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)$$

Nu is

$$T\left\{\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\right\} = \begin{array}{ll} \hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2) & \text{als } t_1 > t_2 \\ \\ \hat{H}_I(t_2)\hat{H}_I(t_1) & \text{als } t_2 < t_1 \end{array}$$

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \ T\left\{\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\right\} = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ T\left\{\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\right\}$$

$$+\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 \; T\left\{\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\right\}$$

$$= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \; \hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2) + \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 \; \hat{H}_I(t_2)\hat{H}_I(t_1)$$

Laten we de eerste integraal eens bekijken

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \; \hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)$$

$$\text{dus} \; \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \; \hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2) = \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_2}^{t} dt_1 \; \hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)$$

$$= \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 \; \hat{H}_I(t_2)\hat{H}_I(t_1)$$

$$\Rightarrow \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \; P\left\{\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\right\} = 2\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \; \hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)$$

Van praktisch belang is de berekening van de tijdsevolutie van een systeem, dat geen eigentoestand van $\hat{H}$ is. Echter deze toestand kan op een eenvoudige wijze in de eigentoestanden van $\hat{H}_0$ worden uitgedrukt waarbij $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$.
Deze situatie doet zich voor in het geval van

a) Verstrooiingsprocessen. $\hat{V}(t)$ stelt de wisselwerking tussen deeltjes voor en $\hat{V}(\infty) = \hat{V}(-\infty) = 0$ (deeltjes ver verwijderd van het interactietijdstip op $t = 0$). De begin-en eindtoestand van het systeem wordt beschreven door $\hat{H}_0$.

b) In sommige systemen wordt voor enige tijd een extra interactie $\hat{V}(t)$ ingeschakeld. Bijvoorbeeld kan men electromagnetische straling in het systeem laten vallen (optisch/micro golf gebied).

   Al deze systemen zijn gekarakteriseerd door het feit dat voor en na de storing of de verstrooiing door $\hat{V}(t)$ de tijdsafhankelijkheid van het systeem essentieel gegeven is door $\hat{H}_0$. Alleen gedurende het proces moeten we $\hat{H}$ volledig meenemen.

Opmerking In het interactiebeeld zijn de toestandsvektoren tijdsonafhankelijk voor en na het verstrooiingsproces. Alleen gedurende de aanwezigheid van $\hat{V}(t)$ zijn ze tijdsafhankelijk.
De verstrooiingsoperator of S-operator is gedefinieerd door

$$\hat{S} = \lim_{T\to\infty} \hat{U}\left(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}\right) \quad \text{dan } |\psi_I(\infty)\rangle = \hat{S}|\psi_I(-\infty)\rangle$$

De begintoestand van het systeem is:$|i\rangle = |\psi_I(-\infty)\rangle$.
De waarschijnlijkheid om het systeem na de verstrooiing in de eindtoestand $|f\rangle$ te vinden is

$$|\langle f|\psi_I(\infty)\rangle|^2 = |\langle f|\hat{S}|i\rangle|^2$$

De overgangswaarschijnlijkheid per tijdseenheid van de begintoestand $|i\rangle$ naar de eindtoestand $|f\rangle$ is

$$w_{fi} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \, |\langle f|\hat{U}\left(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}\right)|i\rangle|^2$$

Opmerking $[\hat{S}, \hat{H}] \neq 0$ maar $[\hat{S}, \hat{H}_0] = 0$.

We zullen nu aannemen dat $\hat{V}$ onafhankelijk is van t behalve bij het in- en uitschakelen van de wisselwerking (adiabatisch).

Definitie overgangsoperator $\hat{T}$

$$\langle f|\hat{S}|i\rangle = \langle f|i\rangle - 2\pi i\delta(E_i - E_f)\,\langle f|\hat{T}|i\rangle$$

waarbij

$$\langle f|\hat{T}|i\rangle = \langle f|\hat{V}|i\rangle + \sum_n \frac{\langle f|\hat{V}|n\rangle\langle n|\hat{V}|i\rangle}{E_i - E_n + i\epsilon} + \cdots$$

Bewijs:

$$\langle f|\hat{U}(t,-\infty)|i\rangle = \langle f|i\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1\ \langle f|\hat{H}_I(t_1)|i\rangle$$

$$+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{-\infty}^{t} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2\ \langle f|\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)|i\rangle + \cdots$$

als $\hat{V}$ onafhankelijk is van t

$$\langle f|\hat{H}_I(t)|i\rangle = \langle f|e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\ \hat{V} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\ |i\rangle$$

$$= e^{i(E_f - E_i)t/\hbar}\ \langle f|\hat{V}|i\rangle \underset{D}{=} V_{fi}\ e^{i\omega_{fi} t}$$

$$\hbar\omega_{fi} = E_f - E_i \qquad |f\rangle\ ,\ |i\rangle \text{ zijn eigentoestanden van } \hat{H}_0 \text{ !!}$$

Aanname $|n\rangle$ zijn eigentoestanden van $\hat{H}_0$ en vormen een volledige verzameling in $\mathcal{H}$. $\rightarrow$

$$\langle f|\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)|i\rangle = \sum_n\ \langle f|\hat{H}_I(t_1)|n\rangle\langle n|\hat{H}_I(t_2)|i\rangle =$$

$$\sum_n\ V_{fn}V_{ni}\ e^{i\omega_{fn} t_1}\ e^{i\omega_{ni} t_2}$$

We moeten nu integralen van het type $\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1\ e^{i\omega_{fi} t_1}$ uitrekenen. Daarom introduceren we een convergerende factor $e^{\varepsilon t_1}$ zodat de integrand verdwijnt voor $t_1 \rightarrow -\infty$. Deze factor kan worden beschouwd als een adiabatisch in-en uitschakelen van de interactie.

$$\int_{-\infty}^{t} dt_1\ e^{i\omega_{fi} t_1} = \lim_{\epsilon\to 0}\ \int_{-\infty}^{t} dt_1\ e^{i(\omega_{fi} - i\epsilon)t_1} =$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{e^{i(\omega_{fi} - i\epsilon)t}}{i(\omega_{fi} - i\epsilon)} = e^{i\omega_{fi} t}\ \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{i\hbar}{E_i - E_f + i\epsilon}$$

analoog

$$\int_{-\infty}^{t} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2\ e^{i\omega_{fn} t_1} e^{i\omega_{ni} t_2} = \int_{-\infty}^{t} dt_1\ e^{i\omega_{fi} t_1}\ \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{i\hbar}{E_i - E_n + i\epsilon}$$

$$= e^{i\omega_{fi} t}\ \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{(i\hbar)^2}{(E_i - E_f + i\epsilon)(E_i - E_n + i\epsilon)}$$

We kunnen nu schrijven

$$\langle f|\hat{U}(t, -\infty)|i\rangle = \langle f|i\rangle + \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{e^{i\omega_{fi} t}}{E_i - E_f + i\epsilon}\ \langle f|\hat{T}|i\rangle$$

Waarbij

$$T_{fi} \equiv \langle f|\hat{T}|i\rangle = V_{fi} + \sum_n V_{fn}\ \frac{1}{E_i - E_n + i\epsilon}\ V_{ni} + \cdots$$

onafhankelijk is van de tijd t en $V_{fi} = \langle f|\hat{V}|i\rangle$. Hieruit volgt

$$\langle f|\hat{U}(t,-\infty)|i\rangle = \langle f|i\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1\ e^{i\omega_{fi}t_1}\ T_{fi}$$

omdat

$$\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega_{fi}t} = \frac{2\pi}{i\hbar}\ \delta(\omega_{fi}) = -2\pi i\delta(E_f - E_i)$$

vinden we

$$\langle f|\hat{S}|i\rangle = \langle f|i\rangle - 2\pi i\delta(E_f - E_i)\ \langle f|\hat{T}|i\rangle$$

De Lippmann-Schwinger vergelijking wordt gegeven door

$$\langle f|\hat{T}|i\rangle = \langle f|\hat{V}|i\rangle + \sum_n \frac{\langle f|\hat{V}|n\rangle\langle n|\hat{V}|i\rangle}{E_i - E_n + i\epsilon} + \cdots$$

met $\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ etc. Deze reeksontwikkeling herschrijven we als

$$\langle f|\hat{T}|i\rangle = \langle f|\hat{V}|i\rangle + \sum_n \langle f|\hat{V}\ \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon}\ |n\rangle\langle n|\hat{V}|i\rangle + \cdots$$

$$= \langle f|\hat{V} + \hat{V}\ \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon}\ \hat{V} + \cdots |i\rangle$$

Definitie Green-operator $\hat{G}_0^{(+)}$ (ook geheten resolvent van $\hat{H}_0$)

$$\hat{G}_0^{(+)} = \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon} \qquad E_i \underset{D}{=} E_i\hat{1}$$

Definieer de overgangsoperator

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}G_0^{(+)}\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V} + \cdots$$

Dit is een reeksontwikkeling voor $\hat{T}$ met

$$\hat{T}^{(1)} = \hat{V} \qquad \hat{T}^{(2)} = \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V}\ \ \text{etc.}$$

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\ \left\{\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V} + \cdots\right\} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{T}$$

De <u>Lippmann-Schwinger-vergelijking</u> luidt :

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{T}$$

Deze integraalvergelijking is equivalent met de Schrödinger vergelijking. Dit is zelfs waar als de reeksontwikkeling voor $\hat{T}$ niet convergeert.
Bovenstaande reeks kan worden verkregen door $\hat{T}$ in $\hat{V}$ uit te drukken $\Rightarrow$

$$\hat{T} = \left(1 - \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\right)^{-1}\ \hat{V} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V} + \cdots \quad \text{etc.}$$

Een formele oplossing van de Lippmann-Schwinger vergelijking is

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\ \frac{1}{E_i - \hat{H} + i\epsilon}\ \hat{V} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}^{(+)}\hat{V}$$

met

$$\hat{G}^{(+)} = \frac{1}{E_i - \hat{H} + i\epsilon}$$

Bewijs

$$\frac{1}{\hat{A} - \hat{B}} = (\hat{A} - \hat{B})^{-1} = \left\{\hat{A}\left(1 - \hat{A}^{-1}\hat{B}\right)\right\}^{-1} = \left(1 - \hat{A}^{-1}\hat{B}\right)^{-1}\ \hat{A}^{-1}$$

$$= \hat{A}^{-1} + \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1} + \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1} + \cdots$$

$$\Rightarrow G^{(+)} = \frac{1}{E_i - \hat{H} + i\epsilon} = \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 - \hat{V} + i\epsilon} = \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon}$$

$$+ \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{V}\frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon} + \cdots$$

of

$$\hat{G}^{(+)} = \hat{G}_0^{(+)} + \hat{G}_0^{(+)}\hat{V}\hat{G}_0^{(+)} + \cdots$$

Substitueer dit weer in de formele oplossing. Het resultaat is

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}^{(+)}\hat{V} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V}\hat{G}_0^{(+)}\hat{V} + \cdots$$

Dit geeft ons de oude reeks weer terug.

Diagramatische taal

Als $\hat{V}$ zeer klein is $\Rightarrow$ $\hat{T}_{BA} = \hat{T}^{(1)} = \hat{V}$. Dit wordt de Born-benadering genoemd overgangswaarschijnlijkheden en de werkzame doorsnede

De overgangswaarschijnlijkheid wordt gegeven door

$$w_{fi} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \; |\langle f|\hat{U}\left(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}\right)|i\rangle|^2$$

De S-matrix is gedefinieerd door

$$\langle f|\hat{S}|i\rangle = \lim_{T\to\infty} \; \langle f|\hat{U}\left(\frac{T}{2}, -\frac{T}{2}\right)|i\rangle$$

$$\langle f|\hat{S}|i\rangle = \langle f|i\rangle - 2\pi i\delta(E_i - E_f) \; \langle f|\hat{T}|i\rangle$$

De experimentele opstelling bij verstrooiing wordt altijd zo gekozen dat $\langle f|i\rangle = 0$ Het gevolg is dat

$$w_{fi} = \frac{|\langle f|\hat{S} - \hat{1}|i\rangle|^2}{T} = \frac{\{2\pi\delta(E_i - E_f)\}^2}{T} \; |\langle f|\hat{T}|i\rangle|^2$$

Deze vergelijking is niet zinvol vanwege het verschijnen van een δ- functie in het kwadraat. Echter het is niet moeilijk om hieraan een zinvolle uitdrukking te geven.

$$2\pi\hbar\delta(E_i - E_f) = \lim_{T\to\infty} \; \int_{-T/2}^{T/2} dt \; e^{i\omega_{fi}t}$$

$$= \lim_{T\to\infty} \frac{2}{\omega_{fi}} \; \sin \; \left(\frac{\omega_{fi}\, T}{2}\right)$$

met $\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$ Laten wij dit controleren.

$$\pi\delta(x) = \lim_{T\to\infty} \frac{\sin \; \left(\frac{x\; T}{2}\right)}{x}$$

$$\pi \int_{-\infty}^{\infty} dx \; \delta(x) = \lim_{T\to\infty} \; \int_{-\infty}^{\infty} dx \; \frac{\sin\left(\frac{x\; T}{2}\right)}{x}$$

$$= 2 \lim_{T\to\infty} \quad \underbrace{\int_0^{\infty} dx \; \frac{\sin \; \left(\frac{x\; T}{2}\right)}{x}}_{\substack{\pi/2 \\ \text{onafhankelijk van } T \\ T > 0}}$$

De overgangswaarschijnlijkheid wordt nu

$$w_{fi} = \lim_{T\to\infty} \frac{4}{T} \frac{1}{(E_f - E_i)^2} \left\{\sin^2 \left(\frac{T}{2\,\hbar} (E_f - E_i)\right)\right\} |\langle f|\hat{T}|i\rangle|^2$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\ \delta(E_f - E_i)\ |\langle f|\hat{T}|i\rangle|^2 \qquad \underline{\text{gouden regel van Fermi}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{\sin^2\ (\mu x)}{x^2} = 2\int_0^{\infty} dx\ \frac{\sin^2\ (\mu x)}{x^2} = \mu\pi \qquad \text{zie integralenboek}$$

$$\pi\delta(x) \underset{D}{=} \lim_{\alpha\to\infty} \frac{\sin^2\ (\alpha x)}{\alpha x^2} \to \pi\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \delta(x) = \lim_{\alpha\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{\sin^2\ (\alpha x)}{\alpha x^2}$$

$$\pi\delta(E_f - E_i) = \lim_{T/2\hbar\to\infty} \frac{\sin^2\ \left(\frac{T}{2\,\hbar}\ (E_f - E_i)\right)}{\frac{T}{2\,\hbar}\ (E_f - E_i)^2}$$

Laat ons aannemen dat de eindtoestanden tot een continuum behoren.
Het aantal eindtoestanden $|f\rangle$ in het energie-interval $(E_f, E_f + dE_f)$ wordt gegeven door

$$dN_f = \rho_E\ dE_f \qquad \rho_E \text{ is de toestandsdichtheid in het energie-interval}$$

De totale overgangswaarschijnlijkheid is gegeven door

$$W_{fi} = \int dN_f\ w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\ |\langle f(\hat{T}|i\rangle|^2\ \rho_E|_{E_i=E_f}$$

Berekening ρ_E voor een verstrooiingsprocess van deeltjes met massa m aan een potentiaal $V(\hat{\vec{r}})$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$$

$$|i\rangle \text{ en } |f\rangle \text{ zijn eigentoestanden van } \frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{H}_0$$

De vrije toestanden in de impulsrepresentatie worden gegeven door

$$|i\rangle \to |\vec{p_i}\rangle \qquad |f\rangle \to |\vec{p}_f\rangle$$

Bereken ρ_E via door de toestanden in een doos op te sluiten. Dit geeft ons de normalisatie.

Neem een kubus met ribbe L en periodieke randvoorwaarden.
De genormeerde eigenfuncties zijn

$$\psi(\vec{p},\vec{r}) = \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{L^{3/2}}\ e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$$

Deze beschrijft deeltjes met dichtheid $\rho = \frac{1}{L^3}$. Vanwege de periodieke randvoorwaarden nemen de impulsen de volgende waarden aan $p_k = \frac{2\pi\hbar}{L}\ n_k \quad k = x, y, z$.
Per volume-element $\left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^3$ in de impulsruimte hebben we één eigentoestand van de impuls.
Per volume-eenheid in de impulsruimte is het aantal eigentoestanden van de impuls gelijk aan

$$\frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3\rho}$$

De dichtheid van de eindtoestanden is gelijk aan ρ_f.
dN_f is het aantal eindtoestanden met impuls $\vec{p}_f$ in het volume-element $d^3\vec{p}_f$.
Het laatste wordt gegeven door

$$dN_f = \frac{d^3\vec{p}_f}{(2\pi\hbar)^3\rho_f} = \frac{m_f p_f}{(2\pi\hbar)^3\rho_f}\ d\Omega\ dE_f = \rho_E\ dE_f$$

Het bovenstaande kan beschouwd worden als definitie van ρ_E.

$$d^3\vec{p}_f = p_f^2 dp_f d\Omega \qquad d\Omega \text{ is de ruimtehoek}$$

$$\text{en } p_f dp_f = m_f dE_f \text{ want } E_f = \frac{p_f^2}{2m_f} \qquad p_f = |\vec{p}_f|$$

De totale overgangswaarschijnlijkheid, per tijdseenheid, van een begintoestand i naar een eindtoestand f in de ruimtehoek $d\Omega$ is gelijk aan

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\ |\langle f|\hat{T}|i\rangle|^2\ \frac{m_f p_f}{(2\pi\hbar)^3\rho_f}\ d\Omega$$

We kunnen hieruit de werkzame doorsnede afleiden.
De invallende deeltjes worden beschreven door de flux $\rho_i v$ waarbij ρ_i de dichtheid van de deeltjes in de begintoestand is.
Verder hangt ρ_i af van de normalisatie van $|i\rangle$.
$\vec{v} = \frac{\vec{p}_i}{m_i}$ is de relatieve snelheid van de invallende deeltjes (in nietrelativistische theorieën is de snelheid van de trefschijf altijd 0) . De differentiële werkzame doorsnede is gelijk aan

$$d\sigma(i \to f) = \frac{2\pi}{\hbar}\ \frac{\rho_E}{v\rho_i}\ |\langle f|\hat{T}|i\rangle|^2 \text{ met } \rho_E = \frac{m_f p_f}{(2\pi\hbar)^3\rho_f}\ d\Omega$$

$$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{p_f}{p_i} \frac{m_i m_f}{(2\pi)^2 \hbar^4 \rho_i \rho_f} |\langle f|\hat{T}|i\rangle|^2$$

Opmerking $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ is onafhankelijk van de normalisatie van de begin-en eindtoestanden.
In het vervolg kiezen we $\rho_i = \rho_f = 1 \rightarrow L = 1$

$$\text{of} \;\; \psi(\vec{p}, \vec{r}) = \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$$

$$\Rightarrow \langle \vec{p}|\vec{p}\,'\rangle = (2\pi\hbar)^3 \; \delta^{(3)} \; (\vec{p} - \vec{p}\,')$$

Opmerking voor niet-relativistische verstrooiing geldt $m_i = m_f$.
In het geval van elastische verstrooiing ($p_i = p_f$ maar $\vec{p}_i \neq \vec{p}_f$) wordt de differentiële werkzame doorsnede gelijk aan

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \;\; |\langle f|\hat{T}|i\rangle|^2$$

VIII. Tweede-quantisatieformalisme voor niet relativistische veel-deeltjessystemen

Een veel-deeltjessysteem: Er zijn twee soorten identieke deeltjes in de quantummechanica t.w.

A) identieke bosonen (dezelfde massa, spin, interne quantumgetallen). Zij voldoen aan de Bose-Einstein statistiek.

B) identieke fermionen (dezelfde massa, spin, interne quantumgetallen). Zij voldoen aan de Fermi-Dirac statistiek.

bosonen hebben geheeltallige spin	$s = 0, 1, 2, \cdots$
fermionen hebben halftallige spin	$s = 1/2, 3/2, 5/2 \cdots$

Stel we hebben n identieke bosonen dan voldoet de golffunctie die deze n identieke bosonen beschrijft aan de volgende eigenschap

$$\psi(1,2,3,\cdots,n) = \sum_P \varphi(p(1), p(2), \cdots, p(n))$$

$\sum\limits_P$ is de som over $n!$ mogelijke permutaties van $1, 2, \cdots, n$ en $p(i)$ geeft de toestand (plaats, spin etc.) van het deeltje aan.

$\Rightarrow \psi(1,2,3,\cdots,n)$ is symmetrisch onder verwisseling van paren in $1, 2, \cdots, n \rightarrow$

Bose-Einstein statistiek.

Voorbeeld van een golffunctie die drie Bose-Einstein deeltjes beschrijft

$$\psi(1,2,3) = \varphi(1,2,3) + \varphi(2,3,1) + \varphi(3,1,2) + \varphi(2,1,3) + \varphi(1,3,2) + \varphi(3,2,1)$$

Stel we hebben n identieke fermionen dan voldoet de golffunctie die deze n identieke fermionen beschrijft aan de volgende eigenschap

$$\psi(1,2,3,\cdots,n) = \sum_P \epsilon_P \varphi(p(1), p(2), \cdots p(n))$$

$\epsilon_P = 1$ voor even permutaties
$\epsilon_P = -1$ voor oneven permutaties

Een even permutatie is een even verwisseling van paren uitgaande van de volgorde in de rij $1, 2, 3, \cdots, n$.

Een oneven permutatie is een oneven verwisseling van paren uitgaande van de volgorde in de rij $1, 2, 3, \cdots, n$.

$\Rightarrow \psi(1, 2, 3, \cdots, n)$ is antisymmetrisch onder verwisseling van paren in $1, 2, 3, \cdots, n \rightarrow$

Fermi-Dirac statistiek.

Het bovenstaande houdt in dat $\psi(\cdots, p(i), \cdots, p(j), \cdots) = 0$ als toestand $p(i) =$ toestand $p(j)$

Dus twee fermionen kunnen niet in dezelfde toestand zitten Pauli- (uitsluitings-) principe.

Voorbeeld van een golffunctie die drie Fermi-Dirac deeltjes beschrijft

$$\psi(1,2,3) = \varphi(1,2,3) + \varphi(2,3,1) + \varphi(3,1,2) - \varphi(2,1,3) - \varphi(1,3,2) - \varphi(3,2,1)$$

($231 \rightarrow 213 \rightarrow 123$ (2 x) even; $321 \rightarrow 312 \rightarrow 132 \rightarrow 123$ (3 x) oneven).

Voorbeeld: Een samengestelde golffunctie, die een systeem beschrijft dat twee vrije electronen ($s = 1/2$) bevat. De spintoestand van electron i ($i = 1, 2$) wordt gegeven door $|s, m_s\rangle$.

$$\begin{array}{ll} \alpha_1 = |1/2, 1/2\rangle_1 & \alpha_2 = |1/2, 1/2\rangle_2 \\ \beta_1 = |1/2, -1/2\rangle_1 & \beta_2 = |1/2, -1/2\rangle_2 \end{array}$$

De spin-golffunctie, symmetrisch onder $1 \leftrightarrow 2 \quad \rightarrow \quad s = 1$, wordt gegeven door

$$\chi^{(1)}_{1,2}(\alpha, \beta) = \left\{ \begin{array}{cc} & \alpha_1\alpha_2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & (\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1) \\ & \beta_1\beta_2 \end{array} \right\}$$

De spin-golffunctie, antisymmetrisch onder $1 \leftrightarrow 2 \quad \rightarrow \quad s = 0$, wordt gegeven door

$$\chi^{(0)}_{1,2}(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)$$

Het ruimtelijk gedeelte van de golffunctie kan worden opgesplitst in een symmetrisch en antisymmetrisch deel.

$$\begin{aligned} \varphi^S_{1,2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) + \varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1)\} \\ \varphi^A_{1,2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) - \varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1)\} \end{aligned}$$

De totale golffunctie van het twee electron systeem wordt gegeven door het produkt van het ruimtelijke en het spin afhankelijke deel.

$$\psi(1,2) = \varphi^S_{1,2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi^{(0)}_{1,2}(\alpha, \beta)$$

of

$$\psi(1,2)=\varphi^A_{1,2}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi^{(1)}_{1,2}(\alpha,\beta)$$

In beide gevallen is $\psi(1,2)=-\psi(2,1)$

Beschouw een verzameling van n niet wisselwerkende identieke deeltjes. De orthormale golffunctie voor deeltje i in de toestand j

wordt gegeven door $\varphi_i(j):\varphi_i^*(j)\varphi_k(l)=\delta_{jl}\delta_{ik}$

In het geval van Bose deeltjes wordt de golffunctie

$$\psi(1,2,3,\cdots,n)=\frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_p\varphi_1(p(1))\varphi_2(p(2)\cdots\varphi_n(p(n))$$

ψ is symmetrisch in $1,2,\cdots,n$ en orthonormaal ook als twee of meer deeltjes in dezelfde toestand voorkomen. Een voorbeeld is

$$\psi(1,2,3)=\frac{1}{\sqrt{3!}}\{\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(3)+\varphi_1(2)\varphi_2(3)\varphi_3(1)+\varphi_1(3)\varphi_2(1)\varphi_3(2)$$
$$+\varphi_1(2)\varphi_2(1)\varphi_3(3)+\varphi_1(1)\varphi_2(3)\varphi_3(2)+\varphi_1(3)\varphi_2(2)\varphi_3(1)\}$$

Neem het geval dat toest. 1 = toest. 2 , verder noem toest. 3 = toest. 2.

$$\psi(1,2,3)\equiv\psi(1,1,2)=\tfrac{1}{\sqrt{3}}\{\varphi_1(1)\varphi_2(1)\varphi_3(2)+\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(1)$$
$$+\quad\varphi_1(2)\varphi_2(1)\varphi_3(1)\}$$

De algemene notatie is: $\psi(n_1,1;n_2,2;\cdots;n_k,k)$, $\quad\sum\limits_{i=1}^k n_i=n$.

$$\psi(n_1,1;n_2,2;\cdots;n_k,k)=\sqrt{\frac{\Pi_{i=1}^k n_i!}{n!}}\{\varphi_1(1)\cdots\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_1+1}(2)\cdots\varphi_{n_1+n_2}(2)$$
$$\cdots\cdots\varphi_{1+\sum\limits_{i=1}^{k-1}n_i}(k)\cdots\varphi_n(k)+\text{ sym. perm. }\}$$

In het geval van Fermi-deeltjes hebben we

$$\psi(1,2,3,\cdots,n)=\frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_P\epsilon_P\varphi_1(p(1))\varphi_2(p(2))\cdots\varphi_n(p(n))$$

Deze golffunctie kunnen we ook schrijven als

$$\psi(1,2,\cdots,n)=\frac{1}{\sqrt{n!}}det\begin{bmatrix}\varphi_1(1)\varphi_1(2) & \cdots & \varphi_1(n)\\ \varphi_2(1)\varphi_2(2) & \cdots & \varphi_2(n)\\ & & \\ \varphi_n(1)\varphi_n(2) & \cdots & \varphi_n(n)\end{bmatrix}\qquad\text{(Slater determinant)}$$

De veel-deeltjestoestanden kunnen we het beste beschrijven door de methode van de tweede quantisatie te gebruiken.

Merk op dat tweede quantisatie niet noodzakelijk is voor de niet relativistische quantummechanica. We hadden het systeem ook met gesymmetriseerde of antigesymmetrische golffuncties kunnen beschrijven.

Het tweede-quantisatieformalisme is heel eenvoudig.

a) We introduceren een Fockruimte $\mathcal{F}$. Dit is een Hilbertruimte waarin alleen symmetrische (Bose-Einstein) of antisymmetrische (Fermi-Dirac) toestands vektoren voorkomen.
   Men kan ook een gemengde Fockruimte definiëren $\mathcal{F} = \mathcal{F}_b \otimes \mathcal{F}_f$

b) In deze Fockruimte is een vacuum-toestandsvektor gegeven, die de nul-deeltjestoestand voorstelt. Voor niet wisselwerkende deeltjes heeft deze toestand de laagste energie.

c) Alle deeltjestoestanden worden via creatie-operatoren uit het vacuum gecreëerd.

Merk op dat met bovenstaand formalisme ook niet identieke-deeltjessystemen kunnen worden beschreven.

Als we over creatie-en annihilatie-operatoren spreken dan impliceert dit dat we in de bezettingsgetal-representatie van de Fockruimte werken. We nemen nu het hele formalisme van de een-dimensionale lineaire harmonische oscillater over.

A) Bosonen

Stel we hebben n_α bosonen die alle in de toestand (niveau) α zitten. In de Fock ruimte wordt deze toestandsvektor gegeven door.

$$|n_\alpha\rangle = \frac{(a_\alpha^\dagger)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} |0\rangle \quad \text{zodat} \quad \langle n'_\alpha | n_\alpha \rangle = \delta_{n'_\alpha n_\alpha}$$

$|0\rangle$ is het vacuum (geen bosonen in de toestand α)

De creatie-operator $a_\alpha^\dagger$ en de annihilatie-operator a_α voldoen aan de relaties

$$[a_\alpha, a_\alpha^\dagger] = 1 \quad [a_\alpha, a_\alpha] = 0 \quad [a_\alpha^\dagger, a_\alpha^\dagger] = 0$$

$$\begin{aligned} \text{zodat} \quad a_\alpha^\dagger |n_\alpha\rangle &= \sqrt{n_\alpha + 1}|n_\alpha + 1\rangle \quad &&\text{(een extra boson in toestand } \alpha \text{ wordt gecreëerd)} \\ a_\alpha |n_\alpha\rangle &= \sqrt{n_\alpha}|n_\alpha - 1\rangle &&\text{(een boson in toestand } \alpha \text{ wordt vernietigd)} \end{aligned}$$

Voer in de de getalsoperator $N_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha$ (laat het dakje voor de operatoren die in de Fock-ruimte werken weg)

$$[N_\alpha, a_\alpha] = -a_\alpha \quad [N_\alpha, a_\alpha^\dagger] = a_\alpha^\dagger$$

zodat $N_\alpha|n_\alpha\rangle = n_\alpha|n_\alpha\rangle$ (De eigenwaarde n_α geeft het aantal bosonen in de toestand α aan)

B) Fermionen

In een toestand α kan slechts één of geen fermion zitten (twee niveau systeem) $n_\alpha = 1$ of $n_\alpha = 0$

dit betekent

$$|1_\alpha\rangle = b_\alpha^\dagger|0\rangle \qquad {b_\alpha^\dagger}^2|0\rangle = 0$$

ook geldt

$$b_\alpha^2|1_\alpha\rangle = b_\alpha|0\rangle = 0$$

We mogen nu b_α interpreteren als een (fermionische) annihilatie -operator en $b_\alpha^\dagger$ als een (fermionische) creatie-operator.
Uit het bovenstaande volgt

$$\{b_\alpha, b_\alpha\} = \{b_\alpha^\dagger, b_\alpha^\dagger\} = 0$$

Dit suggereert de anticommutatierelatie

$$\{b_\alpha, b_\alpha^\dagger\} = 1$$

we laten de consitentie hiervan zien.
Voer in de getalsoperator

$$N_\alpha^\dagger = b_\alpha^\dagger b_\alpha$$

met

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A,C\}B$$

krijgen we

$$[N_\alpha, b_\alpha] = -b_\alpha \quad [N_\alpha, b_\alpha^\dagger] = b_\alpha^\dagger$$

Dit laatste is hetzelfde als voor bosonen.
controleer

$$N_\alpha|0\rangle = 0|0\rangle \quad \text{en} \quad N_\alpha|1_\alpha\rangle = N_\alpha b_\alpha^\dagger|0\rangle = (b_\alpha^\dagger N_\alpha + b_\alpha^\dagger)|0) = 1|1_\alpha\rangle$$

in tegenstelling tot de bosonische getalsoperator heeft de fermionische slechts twee eigenwaarden namelijk 0 en 1.

$$\text{bewijs:} \quad N_\alpha^2 = b_\alpha^\dagger b_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha = b_\alpha^\dagger b_\alpha = N_\alpha$$

$$\text{m.a.w.} \qquad n_\alpha^2 = n_\alpha \quad \rightarrow \quad n_\alpha = 0, 1$$

Beschouw nu een twee-deeltjestoestand waarbij één deeltje in niveau α_1 en het andere deeltje in niveau α_2 zit.

definitie: $\quad |\alpha_1, \alpha_2\rangle = a^\dagger_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_2} |0\rangle \qquad$ afkorting: $\quad |0\rangle = |0, 0\rangle$

zijn de twee deeltjes bosonen dan

$$|\alpha_1, \alpha_2\rangle = |\alpha_2, \alpha_1\rangle \quad \rightarrow \quad a^\dagger_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_2} |0\rangle = a^\dagger_{\alpha_2} a^\dagger_{\alpha_1} |0\rangle$$

$$\Rightarrow \quad [a_{\alpha_1}, a_{\alpha_2}] = [a^\dagger_{\alpha_1}, a^\dagger_{\alpha_2}] = 0 \;\text{ en }\; [a_{\alpha_1}, a^\dagger_{\alpha_2}] = \delta_{\alpha_1 \alpha_2}$$

Als de twee deeltjes fermionen zijn dan.

$|\alpha_1, \alpha_2\rangle = b^\dagger_{\alpha_1} b^\dagger_{\alpha_2} |0\rangle \quad$ let op volgorde α_1 en α_2

$$|\alpha_1, \alpha_2\rangle = -|\alpha_2, \alpha_1\rangle \quad \rightarrow \quad b^\dagger_{\alpha_1} b^\dagger_{\alpha_2} |0\rangle = -b^\dagger_{\alpha_2} b^\dagger_{\alpha_1} |0\rangle$$

$$\Rightarrow \{b_{\alpha_1}, b_{\alpha_2}\} \quad = \quad \{b^\dagger_{\alpha_1}, b^\dagger_{\alpha_2}\} = 0 \qquad \text{en} \qquad \{b_{\alpha_1}, b^\dagger_{\alpha_2}\} = \delta_{\alpha_1 \alpha_2}$$

in beide gevallen

$$[N_{\alpha_1}, a_{\alpha_2}] = -a_{\alpha_1} \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \qquad [N_{\alpha_1}, a^\dagger_{\alpha_2}] = a^\dagger_{\alpha_1} \delta_{\alpha_1 \alpha_2}$$

$$[N_{\alpha_1}, b_{\alpha_2}] = -b_{\alpha_1} \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \qquad [N_{\alpha_1}, b^\dagger_{\alpha_2}] = b^\dagger_{\alpha_1} \delta_{\alpha_1 \alpha_2}$$

Het bovenstaande generaliserend kunnen we schrijven

$|\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_M\rangle = a^\dagger_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_2} \cdots a^\dagger_{\alpha_M} |0\rangle \qquad$ M-boson-toestand

en

$|\alpha_1, \alpha_2 \cdots, \alpha_N\rangle = b^\dagger_{\alpha_1} b^\dagger_{\alpha_2} \cdots b^\dagger_{\alpha_N} |0\rangle \qquad$ N-fermion-toestand

voor fermionen geldt

$$|\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_i, \cdots, \alpha_j, \cdots, \alpha_N\rangle = 0$$

als er een i en j bestaat zodat $\alpha_i = \alpha_j$

Voor bosonen mag $\alpha_i = \alpha_j$ echter dan is de bovenstaande toestand niet meer genormeerd: In dit geval definiëren we

$$|n_1, \alpha_1; n_2, \alpha_2; \cdots; n_M, \alpha_M\rangle = \frac{(a^\dagger_{\alpha_1})^{n_1} (a^\dagger_{\alpha_2})^{n_2} \cdots (a^\dagger_{\alpha_M})^{n_M}}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots n_M!}} |0\rangle$$

Dit stelt een veel-bosontoestand voor met n_1 bosonen in niveau α_1, n_2 bosonen in niveau α_2 etc.

Definitie van de getalsoperator in niveau α

$N_\alpha = a^\dagger_\alpha a_\alpha \quad$ bosonen $\qquad N_\alpha = b^\dagger_\alpha b_\alpha \quad$ fermionen

N_α geeft het aantal deeltjes aan in niveau α.
De totale getalsoperator is

$$N = \sum_{i=1}^{n} N_{\alpha_i}$$

Merk op dat in deze notatie alle α_i's verschillend zijn.

Eigenschappen

A) Bosonen

$$\begin{aligned}
&a_{\alpha_i}|n_1,\alpha_1;n_2,\alpha_2;\cdots;n_i,\alpha_i;\cdots;n_M,\alpha_M\rangle = \\
&\qquad \sqrt{n_i}|n_1,\alpha_1;n_2,\alpha_2;\cdots;n_i-1,\alpha_i;\cdots;n_M,\alpha_M\rangle \\
&a^\dagger_{\alpha_i}|n_1,\alpha_1;n_2,\alpha_2;\cdots;n_i,\alpha_i;\cdots;n_M,\alpha_M\rangle = \\
&\qquad \sqrt{n_i+1}|n_1,\alpha_1;n_2,\alpha_2;\cdots;n_i+1,\alpha_i;\cdots;n_M,\alpha_M\rangle \\
&N_{\alpha_i}|n_1,\alpha_1;n_2\alpha_2;\cdots:n_i,\alpha_i;\cdots n_M,\alpha_M\rangle = \\
&\qquad n_i|n_1,\alpha_1;n_2,\alpha_2;\cdots;n_i,\alpha_i;\cdots;n_M,\alpha_M\rangle \\
&\langle n_1,\alpha_1;n_2,\alpha_2;\cdots;n_M,\alpha_M|n'_1,\alpha'_1;n'_2,\alpha'_2;\cdots;n'_M,\alpha'_M\rangle = \\
&\qquad \sum_P \delta_{n_1 n'_{P(1)}}\cdots\delta_{n_M,n'_{P(M)}}\delta\alpha_1\alpha'_{P(1)}\cdots\delta\alpha_M,\alpha'_{P(M)} = 1 \text{ of } 0.
\end{aligned}$$

B) Fermionen

$$\begin{aligned}
b_{\alpha_i}|\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_i,\cdots,\alpha_N\rangle &= (-1)^{i-1}|\alpha_1,\alpha_2,\cdots,0,\cdots,\alpha_N\rangle \\
&= 0 \text{ anderszins.} \\
b^\dagger_{\alpha_i}|\alpha_1,\alpha_2,\cdots,0,\cdots,\alpha_N\rangle &= (-1)^{i-1}|\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_i,\cdots,\alpha_N\rangle \\
&= 0 \text{ anderszins.} \\
N_{\alpha_i}|\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_i,\cdots,\alpha_N\rangle &= |\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_i,\cdots,\alpha_N\rangle \\
&= 0 \text{ anderszins.}
\end{aligned}$$

$$\langle\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N|\alpha'_1,\alpha'_2,\cdots,\alpha'_N\rangle = \sum_P \epsilon_P \delta_{\alpha_1\alpha'_{p(1)}}\delta_{\alpha_2\alpha'_{p(2)}}\cdots\delta_{\alpha_N\alpha'_{P(N)}}$$

$$= \epsilon_P \qquad \epsilon_P = 1 \text{ even permutaties} \qquad \epsilon_P = -1 \text{ oneven permutaties}$$

Merk op dat de creatie-(annihilatie-) operatoren die op de kets werken fungeren als annihilatie-(creatie-) operatoren op de bras. Let op de volgorde der niveaus.

voorbeeld $|\alpha_1,\alpha_2\rangle = b^\dagger_{\alpha_1}b^\dagger_{\alpha_2}|0\rangle$

$$\langle\alpha_1,\alpha_2| \;=\; (|\alpha_1,\alpha_2\rangle)^\dagger \;=\; (b^\dagger_{\alpha_1}b^\dagger_{\alpha_2}|0\rangle)^\dagger \;=\; \langle 0|b_{\alpha_2}b_{\alpha_1}$$

ofwel $|\alpha_1,\alpha_2\rangle = b^\dagger_{\alpha_1}b^\dagger_{\alpha_2}|0\rangle \qquad \langle\alpha_1,\alpha_2| = \langle 0|b_{\alpha_2}b_{\alpha_1}$

De Fockruimte $\mathcal{F}$ is de Hilbertruimte die kan worden geconstrueerd als de directe som van de n-deeltjes-deelruimtes $\mathcal{F}_n$.

$$\mathcal{F} = \sum_n \oplus \mathcal{F}_n$$

$\mathcal{F}_0$ wordt opgespannen door het vacuum $|0\rangle$
$\mathcal{F}_1$ wordt opgespannen door de één-deeltjestoestand $|\alpha_1\rangle$
$\mathcal{F}_2$ wordt opgespannen door de twee-deeltjestoest $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$
etc.

Bovenstaande methode is ontleend aan de tweede quantisatie zoals men die in de relativistische quantumveldentheorie zal leren kennen. Hier is het een handige methode om de Bose-Einstein-en Fermi-Dirac-statistiek van een veel- deeltjessyteem in rekening te brengen.

α noteert de toestand of het niveau in de één-deeltjes-Hilbertruimte. Zoals we gezien hebben kunnen we α in vele representaties uitdrukken. Echter voor de tweede quantisatie wordt heel vaak de impuls-en plaatsrepresentatie gebruikt. Dit is in het bijzonder het geval als een vrije toestand beschreven wordt waarbij geen één-deeltjespotentiaal aanwezig is.

beschouw een één-deeltjestoestand in de Fockruimte.

a) <u>impulsrepresentatie:</u> $|\vec{p}, s\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\vec{p}, s\rangle$

Hierbij kiest men voor α en s (s= spin) een discrete notatie terwijl voor de impuls $\vec{p}$, een continue notatie genomen wordt.

$$a^\dagger_\alpha |0\rangle = |\alpha\rangle \quad \text{en} \quad a^\dagger(\vec{p}, s)|0\rangle = |\vec{p}, s\rangle$$

Hieruit volgt

$$a^\dagger(\vec{p}, s) = \sum_\alpha \langle\alpha|\vec{p}, s\rangle a^\dagger_\alpha \quad \text{en} \quad a(\vec{p}, s) = \sum_\alpha \langle\vec{p}, s|\alpha\rangle a_\alpha$$

omdat

$$\langle\vec{p}\,', s'|\vec{p}, s\rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}\,' - \vec{p})\delta_{ss'}$$

geldt

$$[a(\vec{p}, s), a^\dagger(\vec{p}\,', s')]_\pm = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}\,')\delta_{ss'} \quad \text{etc.}$$

met als notatie

$$[\ ,\ ]_+ = [\ ,\ ] \qquad [\ ,\ ]_- = \{\ ,\ \}$$

b) <u>plaatsrepresentatie:</u> $|\vec{r}, s\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\vec{r}, s\rangle$

$$\psi^\dagger(\vec{r},s)|0\rangle = |\vec{r},s\rangle$$

Hieruit volgt

$$\psi^\dagger(\vec{r},s) = \sum_\alpha \langle\alpha|\vec{r},s\rangle a_\alpha^\dagger \qquad \psi(\vec{r},s) = \sum_\alpha \langle\vec{r},s|\alpha\rangle a_\alpha$$

met de normalisatie

$$\langle\vec{r}\,',s'|\vec{r},s\rangle = \delta^{(3)}(\vec{r}\,'-\vec{r})$$

Hieruit volgen de (anti-)commutatierelaties

$$[\psi(\vec{r},s),\psi^\dagger(\vec{r}\,',s')]_\pm = \delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}\,')\delta_{ss'} \quad \text{etc.}$$

$\psi(\vec{r},s)$ wordt een veldoperator genoemd die in de Fockruimte werkt. De verwachtingswaarde $\langle\vec{r},s|\alpha\rangle$ is een golffunctie die voldoet aan de Schrödingervergelijking. Hieruit volgt dat $\psi(\vec{r},s)$ ook aan de Schrödingervergelijking voldoet, die nu een veldvergelijking wordt. De grootheid $\psi(\vec{r},s)$ wordt ook wel eens het Schrödingerveld genoemd.

Stelling Bovenstaande commutatierelaties definiëren de veldquantisatie.

bijzondere gevallen

Kies $|\alpha\rangle = |\vec{p}\rangle$ *en* $\sum\limits_\alpha = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$ dan

$$\psi^\dagger(\vec{r},s) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle a^\dagger(\vec{p},s)$$

of kies $|\alpha\rangle = |\vec{r}\rangle$ *en* $\sum\limits_\alpha = \int d^3r$

$$a^\dagger(\vec{p},s) = \int d^3\vec{r}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\psi(\vec{r},s)$$

voor een vrij deeltje (geen één-deeltjespotentiaal)

$$\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \quad \text{of} \quad \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle = e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$$

we krijgen dan de volgende Fouriergetransformeerde grootheden

$$\begin{aligned}\psi^\dagger(\vec{r},s) &= \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar}a^\dagger(\vec{p},s) \;\;;\;\; \psi(\vec{r},s) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}a(\vec{p},s)\\ a^\dagger(\vec{p},s) &= \int d^3\vec{r}\; e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}\psi^\dagger(\vec{r},s) \;\;;\;\; a(\vec{p},s) = \int d^3\vec{r}\; e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar}\;\psi(\vec{r},s)\end{aligned}$$

In sommige gevallen vindt men de continue impulsrepresentatie onhandig en gebruikt men een discrete impulsrepresentatie. Men sluit dan de golffunctie $e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$ op in een doos met volume V en legt periodieke randvoorwaarden op. De impulsen zijn dan bepaald door de waarden

$$p_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}\hbar \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots \text{ hetzelfde voor } y \text{ en } z$$

De genormeerde golffunctie is dan $\frac{e^{i\vec{p}\vec{r}}}{\sqrt{V}}$

$$\psi^\dagger(\vec{r}, s) = \sum_p \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{p}\vec{r}/\hbar} a^\dagger(\vec{p}, s) \qquad \sum_p \frac{e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\frac{\vec{p}\vec{r}'}{\hbar}}}{\sqrt{V}} = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\int d^3\vec{r}\, \frac{e^{-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\frac{\vec{p}\vec{r}'}{\hbar}}}{\sqrt{V}} = \delta_{\vec{p}\vec{p}'}$$

Beide representaties (continu of discreet) hebben hun voor- en nadelen (denk aan $\delta^{(3)}(0)$! in het geval van de continue representatie of het breken van de rotatiesymmetrie in het geval van de discrete representatie).

We zullen nu de meest voorkomende operatoren in de Fockruimte bespreken, namelijk de één-en twéé-deeltjesoperatoren.

A) De één-deeltjesoperator

Deze wordt gegeven door

$$A = \sum_{\alpha,\beta} a^\dagger_\alpha \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle a_\beta$$

Merk op $\langle 0|A|0\rangle = 0$ en $\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle \epsilon C$

Deze matrixelementen specificeren de operator A, die in de Fockruimte werkt.Voor deze operatoren wordt het dakje weggelaten. De één-deeltjestoestandsvektoren zijn orthonormaal gekozen.

$$\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle = \delta\alpha_1\alpha_2$$

De verwachtingswaarde van de één-deeltjesoperator wordt

$$\langle\alpha_1|A|\alpha_2\rangle = \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle 0|a_{\alpha_1} a^\dagger_\alpha a_\beta a^\dagger_{\alpha_2}|0\rangle$$

$$= \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle \delta_{\alpha\alpha_1}\delta_{\beta\alpha_2} = \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_2\rangle$$

Let op dat $\hat{A}$ een operator is die werkt op de niveaus $|\alpha\rangle\epsilon\mathcal{H}_1$ ($\mathcal{H}_1$ is Hilbertruimte die de toestanden van één deeltje bevat).
A is een operator werkende op de deeltjes in de Fockruimte $\mathcal{F}$. Beide worden genoteerd door α. Beter was het om de volgende notatie te gebruiken $|\alpha\rangle\epsilon\mathcal{H}_1$ en $|1;\alpha\rangle\epsilon\mathcal{F}$.

grafische notatie $\quad \langle\alpha_2|\alpha_1\rangle = \delta_{\alpha_1\alpha_2}$

$$\langle\alpha_2|A|\alpha_1\rangle = \langle\alpha_2|\hat{A}|\alpha_1\rangle$$

We kunnen een basis in $\mathcal{H}_\alpha$ kiezen waarbij $\hat{A}$ diagonaal is. In dit geval

$$A = \sum_\alpha A_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha \quad \text{met} \quad A_\alpha = \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$$

voorbeelden van de één-deeltjesoperator zijn.

<u>impulsrepresentatie</u>

totale-getalsoperator	$N = \sum_s \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N(\vec{p},s)$
kinetische-energieoperator	$T = \sum_s \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N(\vec{p},s)\frac{p^2}{2m} = H_0$
energieoperator	$H = \sum_s \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N(\vec{p},s)\mathcal{E}(\vec{p})$
impulsoperator	$P = \sum_s \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N(\vec{p},s)\ \vec{p}$

met $N(\vec{p},s) = a^\dagger(\vec{p},s)a(\vec{p},s)$ (bosonen) of $N(\vec{p},s) = b^\dagger(\vec{p},s)b(\vec{p},s)$ (fermionen).

<u>plaatsrepresentatie</u>

totale-getalsoperator	$N = \sum_s \int d^3\vec{r}\rho(\vec{r},s)$
deeltjesdichtheidsoperator	$\rho(\vec{r},s) = \psi^\dagger(\vec{r},s)\psi(\vec{r},s)$
kinetische-energieoperator	$T = \frac{-\hbar^2}{2m}\sum_s \int d^3\vec{r}\psi^\dagger(\vec{r},s)\Delta\psi(\vec{r},s)$
	$= \frac{\hbar^2}{2m}\sum_s \int d^3r\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{r},s)\vec{\nabla}\psi(\vec{r},s) = H_0$
impulsoperator	$\vec{P} = i\hbar\sum_s \int d^3\vec{r}\psi^\dagger(\vec{r},s)\nabla\psi(\vec{r},s)$
deeltjesstroomoperator	$\vec{J} = \sum_s \int d^3\vec{r}\ \vec{j}(\vec{r},s)$
stroomdichtheidsoperator	$\vec{j}(\vec{r},s) = \frac{\hbar}{2im}\{\psi^\dagger(\vec{r},s)\vec{\nabla}\psi(\vec{r},s) - \vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{r},s)\psi(\vec{r},s)\}$
spinoperator	$\vec{S} = \int d^3\vec{r}\ \vec{\mathcal{S}}(\vec{r})$
spindichtheidsoperator	$\vec{\mathcal{S}}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\sum_{s,s'} \psi^\dagger(\vec{r},s)\vec{\sigma}_{ss'}\psi(\vec{r},s')$

Waarbij de Pauli-matrices gegeven worden door $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$.

Merk op dat alle bovenstaande operatoren diagonaal zijn met betrekking tot $\vec{p}$ en $\vec{r}$.
Bijvoorbeeld

$$T|\vec{p}_1, s_1; \vec{p}_2, s_2\rangle = \left(\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m}\right)|\vec{p}_1, s; \vec{p}_2, s_2\rangle$$

Gebruik

$$N(\vec{p},s)|p_1, s_1; p_2, s_2\rangle = N(\vec{p},s)a^\dagger(\vec{p}_1,s_1)a^\dagger(\vec{p}_2,s_2)|0\rangle$$

Nu is

$$[N(\vec{p},s), a^\dagger(\vec{p}_1,s_1)]_\pm = (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_1)\delta_{ss_1}a^\dagger(\vec{p},s)$$

zodat

$$N(\vec{p},s)a^\dagger(\vec{p}_1,s_1)a^\dagger(\vec{p}_2,s_2)|0\rangle$$

$$= (2\pi\hbar)^3\left(\delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_1)\delta_{ss_1}a^\dagger(\vec{p},s)a^\dagger(\vec{p}_2,s_2) + \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}_2)\delta_{ss_2}a^\dagger(\vec{p}_1,s_1)a^\dagger(\vec{p},s)\right)|0\rangle$$

In het vervolg voeren we de afgekorte notatie in

$$|\alpha\rangle = |\vec{p},s\rangle \quad \text{en} \quad \sum_\alpha = \sum_s \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

In de volgende voorbeelden zullen we alleen fermionen behandelen. De behandeling van de bosonen is analoog aan die van de fermionen.

Voorbeeld twee-fermiontoestand:

$$\langle\alpha_3,\alpha_4|\alpha_1,\alpha_2\rangle \quad = \quad \langle 0|b_{\alpha_4}b_{\alpha_3}b^\dagger_{\alpha_1}b^\dagger_{\alpha_2}|0\rangle$$

$$= \langle 0|b_{\alpha_4}(-b^\dagger_{\alpha_1}b_{\alpha_3} + \delta_{\alpha_1\alpha_3})b^\dagger_{\alpha_2})|0\rangle$$

$$= \delta_{\alpha_1\alpha_3}\langle 0|\delta_{\alpha_4\alpha_2} - b^\dagger_{\alpha_2}b_{\alpha_4}|0\rangle - \langle 0|b_{\alpha_4}b^\dagger_{\alpha_1}(\delta_{\alpha_2\alpha_3} - b^\dagger_{\alpha_2}b_{\alpha_3})|0\rangle$$

$$= \delta_{\alpha_1\alpha_3}\delta_{\alpha_2\alpha_4} - \delta_{\alpha_2\alpha_3}\delta_{\alpha_1\alpha_4}$$

Bereken nu $\langle\alpha_3,\alpha_4|A|\alpha_1,\alpha_2\rangle$

$$\langle\alpha_3,\alpha_4|A|\alpha_1,\alpha_2\rangle = \sum_{\alpha,\beta}\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle\alpha_3;\alpha_4|b^\dagger_\alpha b_\beta|\alpha_1;\alpha_2\rangle$$

$$= \sum_{\alpha,\beta}\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle 0|b_{\alpha_4}b_{\alpha_3}b^\dagger_\alpha b_\beta b^\dagger_{\alpha_1}b^\dagger_{\alpha_2}|0\rangle$$

Verwissel de creatie-en annihilatie-operatoren zodanig dat alle annilatie-operatoren naar rechts geschoven worden.

$$\langle\alpha_3,\alpha_4|A|\alpha_1,\alpha_2\rangle = \delta_{\alpha_2\alpha_4}\langle\alpha_3|\hat{A}|\alpha_1\rangle + \delta_{\alpha_1\alpha_3}\langle\alpha_4|\hat{A}|\alpha_2\rangle$$

$$-\delta_{\alpha_2\alpha_3}\langle\alpha_4|\hat{A}|\alpha_1\rangle - \delta_{\alpha_1\alpha_4}\langle\alpha_3|\hat{A}|\alpha_2\rangle$$

De verticale verwisseling van 3 en 4 geeft een minteken. Dit is karakteristiek voor fermionen.

Voorbeeld:kinetische energie van een fermiongas.

$$\langle\vec{p}_3, s_3; \vec{p}_4, s_4|T|\vec{p}_1, s_1; \vec{p}_2, s_2\rangle =$$

$$\frac{p_1^2+p_2^2}{2m}\Big[(2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_1-\vec{p}_3)\delta_{s_1s_3}(2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_2-\vec{p}_4)\delta_{s_2s_4}$$

$$- \qquad (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_1-\vec{p}_4)\delta_{s_1s_4}(2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_2-\vec{p}_3)\delta_{s_2s_3}\Big]$$

B) De twee-deeltjesoperator

Deze wordt gegeven door

$$A = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger \langle\alpha,\beta|\hat{A}|\gamma,\delta\rangle b_\delta b_\gamma$$

1. De middelingsfactor is $\frac{1}{2!}$,$\rightarrow$ 2 slaat op het aantal deeltjes. De middelingsfactor voor n deeltjes wordt $\frac{1}{n!}$.
2. Het produkt $b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma$ is normaal geordend. Dit betekent dat de annihilatie-operatoren rechts staan van de creatie-operatoren

dit laatste heeft tot gevolg dat

$$\langle 0|A|0\rangle = 0 \quad \text{en} \quad \langle\alpha_2|A|\alpha_1\rangle = 0$$

anders zou A geen twee deeltjes operator zijn De operator A behoudt het aantal deeltjes in het matrixelement. Verwachtingswaarden van A, waarbij A staat tussen toestanden die een verschillend aantal deeltjes bevatten, zullen verdwijnen.

$$\langle\alpha_3,\alpha_4|A|\alpha_1,\alpha_2\rangle = \frac{1}{2}\sum\langle\alpha,\beta|\hat{A}|\gamma,\delta\rangle\langle\alpha_3,\alpha_4|b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma|\alpha_1,\alpha_2\rangle$$

nu is

$$b_\delta b_\gamma|\alpha_1,\alpha_2\rangle = b_\delta b_\gamma b_{\alpha_1}^\dagger b_{\alpha_2}^\dagger|0\rangle = (\delta_{\gamma\alpha_1}\delta_{\delta\alpha_2} - \delta_{\gamma\alpha_2}\delta_{\delta\alpha_1})|0\rangle$$

$$\langle\alpha_3,\alpha_4|b^\dagger_\alpha b^\dagger_\beta = \langle 0|b_{\alpha_4}b_{\alpha_3}b^\dagger_\alpha b^\dagger_\beta = \langle 0|(\delta_{\alpha\alpha_3}\delta_{\beta\alpha_4} - \delta_{\alpha\alpha_4}\delta_{\beta\alpha_3})$$

$$\langle\alpha_3,\alpha_4|A|\alpha_1,\alpha_2\rangle = \frac{1}{2}[\langle\alpha_3,\alpha_4|\hat{A}|\alpha_1,\alpha_2\rangle + \langle\alpha_4,\alpha_3|\hat{A}|\alpha_2,\alpha_1\rangle$$

$$-\langle\alpha_4,\alpha_3|\hat{A}|\alpha_1,\alpha_2\rangle - \langle\alpha_3,\alpha_4|\hat{A}|\alpha_2,\alpha_1\rangle]$$

In alle geval geldt

$$\langle\alpha,\beta|\hat{A}|\gamma,\delta\rangle = \langle\beta,\alpha|\hat{A}|\delta,\gamma\rangle$$

Merk op dat bij een even aantal verwisselingen een plus teken en bij een oneven aantal verwisselingen een min teken verschijnt.Het eindresultaat wordt

$$\langle\alpha_3,\alpha_4|A|\alpha_1,\alpha_2\rangle = \langle\alpha_3,\alpha_4|\hat{A}|\alpha_1,\alpha_2\rangle - \langle\alpha_4,\alpha_3|\hat{A}|\alpha_1,\alpha_2\rangle$$

Dit kan grafisch worden uitgedrukt op de volgende manier

Voorbeelden van een twee-deeltjesoperator zijn de verstrooiingsmatrix (S) en de twee-deeltjespotentiaal V. De laatste wordt gegeven door

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2}\sum b^\dagger_\alpha b^\dagger_\beta\langle\alpha,\beta|\hat{V}|\gamma,\delta\rangle b_\delta b_\gamma \\ &= \frac{1}{2}\int\frac{d^3\vec{p}_1 d^3\vec{p}_2 d^3\vec{p}_3 d^3\vec{p}_4}{(2\pi\hbar)^{12}}\langle\vec{p}_3,\vec{p}_4|\hat{V}|\vec{p}_1,\vec{p}_2\rangle b^\dagger(\vec{p}_3)b^\dagger(\vec{p}_4)b(\vec{p}_2)b(\vec{p}_1)\end{aligned}$$

We laten de spin maar even weg

$$\Rightarrow\ \langle\vec{p}_3,\vec{p}_4|V|\vec{p}_1,\vec{p}_2\rangle = \langle\vec{p}_3,\vec{p}_4|\hat{V}|\vec{p}_1,\vec{p}_2\rangle - \langle\vec{p}_4,\vec{p}_3|\hat{V}|\vec{p}_1,\vec{p}_2\rangle$$

De twee-deeltjespotentiaal behoudt de totale impuls

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}_3,\vec{p}_4|\hat{V}|\vec{p}_1,\vec{p}_2\rangle &= (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_1+\vec{p}_2-\vec{p}_3-\vec{p}_4)\langle\vec{p}_3,\vec{p}_4|\hat{V}|\vec{p}_1,\vec{p}_2\rangle \\ &= (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_1+\vec{p}_2-\vec{p}_3-\vec{p}_4)\bar{\mathcal{V}}(\vec{p},\vec{p}\,')\end{aligned}$$

$$\vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1-\vec{p}_2) \quad \vec{p}\,' = \frac{1}{2}(\vec{p}_3-\vec{p}_4)$$

voor locale potentialen geldt de bijzondere eigenschap

$$\bar{\mathcal{V}}(\vec{p},\vec{p}\,') = \bar{\mathcal{V}}(|\vec{p}-\vec{p}\,'|)$$

Deeltjes en gaten

Hiervoor is de methode van tweede quantisatie zeer nuttig.

Voorbeelden

1) De electronen in een metaal vormen een Fermigas. Bij $0°K$ zijn alle laagste niveaus gevuld en zitten alle electronen in de Fermizee. Als de temperatuur stijgt dan verdwijnen enkele electronen uit deze zee naar hogere niveaus. Zij laten een gat achter in de zee. De situatie waarbij de Fermizee geheel gevuld is met electronen (nl. bij $0°K$) noemen we het vacuum.

2) kernen in de buurt van gesloten schillen.

Men maakt onderscheid tussen twee situaties.

a. De bovenste schil is nauwelijks gevuld. De nucleonen boven de gesloten schil worden deeltjes genoemd.

b. De bovenste schil is bijna helemaal gevuld. De ontbrekende nucleonen worden gaten genoemd.

De gesloten schil wordt geidentificeerd met het vacuum.

Merk op dat de deeltjes-gaten beschrijving typisch is voor fermionen (niet voor bosonen). Het gevolg is dat het aantal fermionen eindig is. In elke toestand is slechts één fermion toegestaan (Pauli principe)! Voor bosonen is dan ook de deeltjes-gaten-beschrijving niet van toepassing.

We behandelen nu alleen voorbeeld 1).

electronengas

De dichtheid is gegeven door ρ. Verder kiezen wij de continue representatie.
Het aantal electronen per volume eenheid is gegeven door

$$\rho = 2 \int_0^{p_F} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3}$$

Bovenstaande formule definieert de Fermi-impuls: p_F. Dit is de grootste impuls, die de electronen (fermionen) in de Fermizee kunnen hebben.

Een electron met $|\vec{p}| > p_F$ noemen we een deeltje.

Een electron met $|\vec{p}| < p_F$ zit in de Fermizee (vacuüm) en we laten dit weg.

Als een electron afwezig is in de zee dan spreken we van een gat. De impuls $\vec{p}_h$ van een gat is gelijk aan $-\vec{p}$ waarbij $\vec{p}$ de impuls van het afwezige electron is. De z-component van de spin van een gat s_h is gelijk aan $-s$ waarbij s de z-component van het afwezige electron is.
Dit houdt het volgende in

Als $|\vec{p}| > p_F$ dan

$b^\dagger(\vec{p}, s)$ is de creatie-operator van een deeltje met impuls $\vec{p}$ en met de z-component van de spin gelijk aan s

$b(\vec{p}, s)$ is de annihilatie-operator van een deeltje met impuls $\vec{p}$ en met de z-component van de spin gelijk aan s.

Als $|\vec{p}| < p_F$

$b^\dagger(\vec{p}, s)$ is de annihilatie-operator van een gat van impuls $-\vec{p}$ en met de z-component van de spin gelijk aan $-s$

$b(\vec{p}, s)$ is de creatie-operator van een gat van impuls $-\vec{p}$ en met de z-component van de spin gelijk aan $-s$.

Om verwarring te voorkomen is het handig om een nieuwe notatie te kiezen.

Voor $|\vec{p}| < p_F$

$$h^\dagger(\vec{p}, s) = b(-\vec{p}, -s) \qquad h(\vec{p}, s) = b^\dagger(-\vec{p}, -s)$$

Hierbij zijn $h^\dagger$ en h de creatie- en annihilatie-operator van het gat (hole).

Voor $|\vec{p}| > p_F$

$$d^\dagger(\vec{p},s) = b^\dagger(\vec{p},s) \qquad d(\vec{p},s) = b(\vec{p},s)$$

Hierbij zijn $d^\dagger$ en d de creatie- en annihilatie-operator van het deeltje, dat boven de Fermizee ligt. Beschouw de één-deeltjesoperatoren van de vorm

$$A = \sum_s \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s) b^\dagger(\vec{p},s) b(\vec{p},s)$$

met

$$\langle \vec{p}, s|\hat{A}|\vec{p}', s'\rangle = \bar{A} \quad (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')\delta_{ss'}$$

Voorbeelden zijn:

$\hat{A} = -\hat{e}$	electrische lading	$\bar{A}(\vec{p},s) = -e$
$\hat{A} = \frac{\hat{p^2}}{2m}$	kinetische energie	$\bar{A}(\vec{p},s) = \frac{p^2}{2m}$
$\hat{A} = \hat{\vec{p}}$	impuls	$\bar{A}(\vec{p},s) = \vec{p}$
$\hat{A} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$	$z-$ component van de electron spin	$\bar{A}(\vec{p},s) = s\frac{\hbar}{2} \quad s = \pm 1$

We drukken nu de één-deeltjesoperator in de creatie- en annihilatie-operatoren van de gaten en de deeltjes uit. Dit geschiedt als volgt.

$$A = \sum_s \int_0^\infty \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s) b^\dagger(\vec{p},s) b(\vec{p},s)$$

$$= \sum_s \int_{p_F}^\infty \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s) d^\dagger(\vec{p},s) d(\vec{p},s) + \sum_s \int_0^{P_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s) h(-\vec{p},s) h^\dagger(-\vec{p},s)$$

$$= \sum_s \int_{p_F}^\infty \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s) N_d(\vec{p},s) + \delta^{(3)}(0)(2\pi\hbar)^3 \sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s)$$

$$- \sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(-\vec{p},-s) N_h(\vec{p},s)$$

Hierbij hebben we gebruik gemaakt van $N_d = d^\dagger d$ en $N_h = h^\dagger h$.

De term :

$$\delta^3(0) \sum_s \int_0^{p_F} d^3\vec{p} \; \bar{A}(\vec{p},s)$$

is de bijdrage van de Fermi-zee tot de operator A
De singulariteit $\delta^{(3)}(0)$ is het gevolg van de continue representatie.

vb. 1 <u>ladingsoperator</u>

$A(\vec{p},s) = -e$

De ladingsdichtheid wordt gegeven door

$$\sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s) = -e \sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} = -e\rho$$

omdat

$$\delta^{(3)}(0)(2\pi\hbar)^3 = \int d^3\vec{r} e^{i\vec{0}\vec{r}} = V \quad \text{eindig volume}$$

wordt de tweede term gelijk aan

$$(2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(0) \sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s) = -e\rho V = \bar{Q}$$

$\bar{Q}$ is de totale lading van de electronen in de Fermizee ($\bar{Q} < 0$). Noem Q de ladingsoperator, die in de Fockruimte werkt. Verder stelt $|F\rangle$ de Fermizee voor dan

$$\langle F|Q|F\rangle = \bar{Q}$$

en

$$Q = \bar{Q} - \ e \sum_s \int_{p_F}^{\infty} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N_d(\vec{p},s) + \ e \sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N_h(\vec{p},s)$$

Opm.
lading van het electron $= -e$
lading van het gat $= +e$

vb. 2 impulsoperator

$$\bar{A}(\vec{p},s) = \vec{p} \rightarrow \bar{A}(-\vec{p},-s) = -\vec{p}$$

De tweede term in de twee-deeltjesoperator wordt nu nul

$$(2\pi)^3 \delta^3(0) \sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \ \ \vec{p} = 0$$

Dit betekent dat de impuls van de Fermizee gelijk aan nul is. De impulsoperator in de Fockruimte wordt gegeven door

$$\vec{P} = \sum_s \int_{p_F}^{\infty} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N_d(\vec{p},s)\vec{p} + \sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N_h(\vec{p},s)\vec{p}$$

vb. 3 energie-operator

De kinetische energie of vrije Hamiltoniaan is gelijk aan

$$\bar{A}(\vec{p},S) = \frac{p^2}{2m}$$

De energie van de Fermizee wordt gegeven door

$$(2\pi\hbar)^3\delta^3(0)\sum_s\int_0^{p_F}\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{p^2}{2m}=V\frac{p_F^5}{10m\pi^2\hbar^3}$$

$$=\rho V\frac{3}{10m}p_F^2=\frac{3}{5}\rho VE_F \text{ met } E_F=\frac{p_F^2}{2m}\text{Fermi-energie}$$

waarbij de dichtheid van de toestanden in de Fermizee is gedefinieerd door

$$\rho=\sum_s\int_0^{p_F}\frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}=\frac{1}{3\pi^2\hbar^3}p_F^3$$

We kunnen de energie-operator (Hamiltoniaan-operator) schrijven als

$$\begin{aligned}H_0 &= \tfrac{3}{5}\rho VE_F+\tfrac{p_F^2}{2m}\left\{\sum_s\int_{p_F}^{\infty}\tfrac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}N_d(\vec{p},s)-\sum_s\int_0^{p_F}\tfrac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}N_h(\vec{p},s)\right\}\\ &+ \sum_s\int_{p_F}^{\infty}\tfrac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}\left(\tfrac{p^2-p_F^2}{2m}\right)N_d(\vec{p},s) + \sum_s\int_0^{p_F}\tfrac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\left(\tfrac{p_F^2-p^2}{2m}\right)N_h(\vec{p},s)\end{aligned}$$

We hebben hier de energieschaal bij de Fermie-energie gelegd.

De energie van een deeltje of een gat wordt dan bepaald door het verschil van hun absolute energie met de energie van de Fermizee.Verder merken wij op dat.

$A(\vec{p},s)$	grootheid voor de deeltjes
$-A(-\vec{p},-s)$	grootheid voor de gaten

Het begrip normale ordening

We hebben in het voorafgaande de Fermizee met het vacuüm geïdentificeerd. Echter er is een probleem namelijk dat

als $|F\rangle=|0\rangle$ dan blijkt $\langle 0|A|0\rangle\neq 0$

Om dit te verhelpen definiëren wij nu een normaal geordende operator aangeduid met de notatie $:A:$ zodat geldt dat

$\langle 0|:A:|0\rangle=0$

Dit komt er op neer dat we in de operator A de Fermizeebijdrage weglaten. Dus voor de een-deeltjesoperator betekent dit

$$:A := \sum_s \int_{p_F}^{\infty} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(\vec{p},s) N_d(\vec{p},s) - \sum_s \int_0^{p_F} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \bar{A}(-\vec{p},-s) N_h(\vec{p},s)$$

Bijvoorbeeld voor een één-deeltjesgetals-operator met $:\bar{A} = 1$ krijgen we

$$:N := \sum_s \int_{p_F}^{\infty} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N_d(\vec{p},s) - \sum_s \int_{p_F}^{\infty} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} N_h(\vec{p},s) = n_d + n_h$$

Met de conventie $n_d > 0$ en $n_h < 0$.

Hoe verkrijgen we nu de uitdrukking voor een normaal geordende operator zonder eerst de hele berekening opnieuw te doen?

<u>recept</u>

De Fermizee was afkomstig van de $\delta^{(3)}$-functie, die in de anticommutatie- relaties voor de gaten verscheen. Deze functie verscheen als volgt:

$$b^\dagger_\alpha b_\beta \to h_\alpha h^\dagger_\beta \to -h^\dagger_\beta h_\alpha + \delta_{\alpha\beta} \quad \text{met} \quad \sum_{\alpha,\beta} \delta_{\alpha\beta} \to \delta^{(3)}(0)$$

<u>definieer</u>

$$:d_\alpha d^\dagger_\beta := -d^\dagger_\beta d_\alpha \quad \text{en} \quad :h_\alpha h^\dagger_\beta := -h^\dagger_\beta h_\alpha$$

<u>generalisatie:</u> Verplaats alle creatie-operatoren zodanig dat zij links van de annihilatie-operatoren staan. Dit doen we via paarsgewijze verwisseling.

<u>bijv.</u> $:dhh^\dagger d^\dagger := -d^\dagger h^\dagger dh$ oneven aantal verwisselingen geeft extra minteken

$:dhh^\dagger d^\dagger := h^\dagger d^\dagger dh$ even aantal verwisselingen geeft extra plusteken

merk op dat $\{d,h\} = 0$, $\{d^\dagger,h^\dagger\} = 0$, $\{d,h^\dagger\} = 0$, $\{h^\dagger,d\} = 0$ annihilatie- en creatie-operatoren van gaten en deeltjes anticommuteren met elkaar.

alleen

$$\{d,d^\dagger\} \neq 0 \quad \text{en} \quad \{h,h^\dagger\} \neq 0$$

Laten we verder de deeltjestoestand in de Fockruimte noteren door $|\alpha_1\rangle$ en de gaten (antideeltjes) door $|\bar{\alpha}_1\rangle$

Voorbeeld: <u>De twee-deeltjesoperator</u>

$$:A := \frac{1}{2} \sum_s \int \frac{d^3\vec{p}_1 d^3\vec{p}_2 d^3\vec{p}_3 d^3\vec{p}_4}{(2\pi\hbar)^{12}} \langle \alpha_3, \alpha_4 | \hat{A} | \alpha_1, \alpha_2 \rangle : b^\dagger_{\alpha_3} b^\dagger_{\alpha_4} b_{\alpha_2} b_{\alpha_1} :$$

Deze operator behoudt het aantal deeltjes. Verder is

$$\langle 0| : A : ||0\rangle = 0$$

De matrixelementen, die een bijdrage geven, hebben de volgende vorm

$$\langle \alpha_3, \alpha_4| : A : |\alpha_1, \alpha_2\rangle \qquad \langle \bar{\alpha_3}, \bar{\alpha_4}| : A : |\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2\rangle$$

$$\langle \alpha_4| : A : |\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle \qquad \langle \alpha_3, \alpha_4, \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2| : A : |0\rangle \qquad \text{etc.}$$

Merk op dat het netto aantal deeltjes dat links en rechts van $: A :$ staat hetzelfde is. Hierbij tellen de deeltjes positief en de antideeltjes negatief.

$$: A := \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \langle \alpha, \beta|\hat{A}|\gamma, \delta\rangle : b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma :$$

Wij vervangen nu de b's door de d's en de h's

$$\begin{array}{llll} \text{voor} & p > p_F & b_\alpha \to d_\alpha & b_\alpha^\dagger \to d_\alpha^\dagger \\ \text{voor} & p < p_F & b_\alpha \to h_{-\bar{\alpha}}^\dagger & b_\alpha^\dagger \to h_{-\bar{\alpha}} \end{array}$$

met

$$d_\alpha = d(\vec{p}_\alpha, s_\alpha) \quad h_{-\bar{\alpha}} = h(-\vec{p}_{\bar{\alpha}}, -s_{\bar{\alpha}})$$

Voorbeeld. Bereken het matrixelement $\langle \alpha_4| : A : |\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle$.

Beschouw $\langle \alpha_4| : b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma : |\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle$

Het bovenstaande matrixelement is ongelijk aan nul als de volgende operatoren aanwezig zijn : twee annihilatie-operatoren behorende bij een deeltje, een annihilatie-operator behorende bij een gat en een creatie-operator behorende bij een deeltje. Denk erom dat naar links de creatie-operator steeds als een annilatie-operator werkt.

Het blijkt dat er twee mogelijkheden zijn.

$$\begin{array}{lclcl} : b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma : & = & : d_\alpha^\dagger h_{-\bar{\beta}} d_\delta d_\gamma : & = & d_\alpha^\dagger h_{-\bar{\beta}} d_\delta d_\gamma \\ : b_\alpha^\dagger b_\beta^\dagger b_\delta b_\gamma : & = & : h_{-\bar{\alpha}} d_\beta^\dagger d_\delta d_\gamma : & = & -\, d_\beta^\dagger h_{-\bar{\alpha}} d_\delta d_\gamma \end{array}$$

Het matrixelement wordt

$$\begin{aligned} \langle \alpha_4| : A : |\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle &= \frac{1}{2} \sum \langle \alpha, \beta|\hat{A}|\gamma, \delta\rangle \\ &\quad \{\langle \alpha_4|d_\alpha^\dagger h_{-\bar{\beta}} d_\delta d_\gamma|\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle - \langle \alpha_4|d_\beta^\dagger h_{-\bar{\alpha}} d_\delta d_\gamma|\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle\} \end{aligned}$$

We moeten nog de volgende operaties uitvoeren.

$$\begin{aligned} h_{-\bar{\beta}} d_\delta d_\gamma|\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle &= h_{-\bar{\beta}} d_\delta d_\gamma d_{\alpha_1}^\dagger d_{\alpha_2}^\dagger h_{\bar{\alpha}_3}^\dagger|0\rangle \\ &= h_{-\bar{\beta}} h_{\bar{\alpha}_3}^\dagger d_\delta d_\gamma d_{\alpha_1}^\dagger d_{\alpha_2}^\dagger|0\rangle \\ &= \delta_{-\bar{\beta}\bar{\alpha}_3} d_\delta d_\gamma d_{\alpha_1}^\dagger d_{\alpha_2}^\dagger|0\rangle \\ &= \delta_{-\bar{\beta}\bar{\alpha}_3} d_\delta(\delta_{\gamma\alpha_1} - d_{\alpha_1}^\dagger d_\gamma) d_{\alpha_2}^\dagger|0\rangle \\ &= \delta_{-\bar{\beta}\bar{\alpha}_3}(\delta_{\gamma\alpha_1}\delta_{\delta\alpha_2} - d_\delta d_{\alpha_1}^\dagger \delta_{\gamma\alpha_2})|0\rangle \\ &= \delta_{-\bar{\beta}\bar{\alpha}_3}(\delta_{\gamma\alpha_1}\delta_{\delta\alpha_2} - \delta_{\delta\alpha_1}\delta_{\gamma\alpha_2})|0\rangle \end{aligned}$$

gebruik steeds $\langle\alpha_4|d^\dagger_\alpha = \langle 0|\delta_{\alpha\alpha_4}$

$$\begin{aligned}\langle\alpha_4| : A : |\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle &= \frac{1}{2}\{\langle\alpha_4, -\alpha_3|\hat{A}|\alpha_1, \alpha_2\rangle \\ &\quad -\langle\alpha_4, -\alpha_3|\hat{A}|\alpha_2, \alpha_1\rangle - \langle -\alpha_3, \alpha_4|\hat{A}|\alpha_1, \alpha_2\rangle \\ &\quad +\langle -\alpha_3, \alpha_4|\hat{A}|\alpha_2, \alpha_1\rangle\}\end{aligned}$$

als we nu weer gebruiken $\langle\alpha, \beta|\hat{A}|\gamma, \delta\rangle = \langle\beta, \alpha|\hat{A}|\delta, \gamma\rangle$ wordt het uiteindelijke resultaat gelijk aan

$$\langle\alpha_4| : A : |\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_3\rangle = \langle\alpha_4, -\alpha_3|\hat{A}|\alpha_1, \alpha_2\rangle - \langle -\alpha_3, \alpha_4|\hat{A}|\alpha_1, \alpha_2\rangle$$

In het geval $\hat{A} = \hat{V}$ (twee-deeltjespotentiaal) worden de Feynman-diagrammen gegeven door

Merk op dat gat 3 annihileert deeltje 2 of deeltje 1.

In de impulsrepresentatie ($|\alpha_i\rangle = |\vec{p}_i\rangle$) wordt de verwachtingswaarde gelijk aan

$$\langle\vec{p}_4, -\vec{p}_3|\hat{V}|\vec{p}_1, \vec{p}_2\rangle = (2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 - \vec{p}_4)\langle\vec{p}_4, -\vec{p}_3|\hat{v}|\vec{p}_1, \vec{p}_2\rangle$$

We kunnen nu schrijven

$$\langle\vec{p}_4, -\vec{p}_3|\hat{v}|\vec{p}_1, \vec{p}_2\rangle = \bar{\mathcal{V}}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2; \vec{p}_4 + \vec{p}_3) = \bar{\mathcal{V}}(\frac{1}{2}|\vec{p}_1 - \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4|)$$

De laatste gelijkheid is alleen maar waar als de potentiaal locaal is. De bovenstaande uitdrukking wordt dan gelijk aan

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}_4| : V : |\vec{p}_1, \vec{p}_2, \bar{\vec{p}}_3\rangle &= (2\pi)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \\ &\quad \{\bar{\mathcal{V}}(\frac{1}{2}|\vec{p}_1 - \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4|) - \bar{\mathcal{V}}(\frac{1}{2}|\vec{p}_1 - \vec{p}_2 + \vec{p}_3 + \vec{p}_4|)\}\end{aligned}$$

voor bovenstaande diagrammen kunnen we de volgende regels formuleren:

1 Iedere vertex krijgt een $(2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\sum_i q_i)$- functie vanwege impulsbehoud

2 Verder dienen we te integreren over alle inwendige impulsen $\vec{q}$ namelijk $\int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^3}$

3 Iedere interactielijn met impuls $\vec{q}$ krijgt een factor $\bar{\mathcal{V}}(q)$ met $q = |\vec{q}|$

Nu we de een-en twee-deeltjesoperator besproken hebben kunnen we de Hamiltoniaan geven voor deeltjes van massa m die paarsgewijs met elkaar wisselwerken. In dit geval is de potentiaal locaal. We zullen de Hamiltoniaan voor bosonen geven. Voor fermionen ziet de uitdrukking voor H er precies hetzelfde uit.

$$H = H_0 + V$$

$$H_0 = \sum_s \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p^2}{2m} N(\vec{p}, s) \qquad \text{impulsrepresentatie}$$

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_s \int d^3\vec{r}\, \vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{r}, s)\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, s) \qquad \text{plaatsrepresentatie}$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \int \frac{d^3\vec{p}_1 d^3\vec{p}_2 d^3\vec{p}_3 d^3\vec{p}_4}{(2\pi\hbar)^{12}} \langle \vec{p}_3, s_1; \vec{p}_4, s_1 | \hat{V} | \vec{p}_1, s_1; \vec{p}_2, s_2 \rangle$$

$$a^\dagger(\vec{p}_3, s_1) a^\dagger(\vec{p}_4, s_2) a(\vec{p}_2, s_2) a(\vec{p}_1, s_1) \qquad \text{impulsrepresentatie}$$

Als de potentiaal locaal is dan

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}_3, s; \vec{p}_4, s_1 | \hat{V} | \vec{p}_1, s; \vec{p}_2, s_1 \rangle &= (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \\ &\quad \bar{\mathcal{V}}(\frac{1}{2}|\vec{p}_1 - \vec{p}_2 - \vec{p}_3 + \vec{p}_4|) \end{aligned}$$

Vanwege de $\delta-$functie hebben we

$$\bar{\mathcal{V}}(|\vec{p}_1 - \vec{p}_3|) = \bar{\mathcal{V}}(|\vec{p}_2 - \vec{p}_4|)$$

In de plaatsrepresentatie wordt V

$$V = \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}_1 \mathcal{V}(|\vec{r} - \vec{r}_1|) \psi^\dagger(\vec{r}, s_1) \psi^\dagger(\vec{r}_1, s_2) \psi(\vec{r}_1, s_2) \psi(\vec{r}, s_1)$$

Bewijs: substitueer in bovenstaande uitdrukking

$$\mathcal{V}(|\vec{r} - \vec{r}_1|) = \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}_1)/\hbar} \bar{\mathcal{V}}(|\vec{q}|)$$

zodat

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}_1 \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}_1)/\hbar} \bar{\mathcal{V}}(|\vec{q}|) \int \frac{d^3\vec{p}_1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\vec{p}_1\vec{r}/\hbar} \\ &\quad \int \frac{d^3\vec{p}_2}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\vec{p}_2\vec{r}_1/\hbar} \int \frac{d^3\vec{p}_4}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{p}_4\vec{r}_1/\hbar} \int \frac{d^3\vec{p}_3}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{p}_3\vec{r}/\hbar} \\ &a^\dagger(\vec{p}_3, s_1) a^\dagger(\vec{p}_4, s_2) a(\vec{p}_2, s_2) a(\vec{p}_1, s_1) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3\vec{p}_1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3\vec{p}_2}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\vec{p}_3 \int d^3\vec{p}_4\, \delta^{(3)}(\vec{q} - \vec{p}_1 + \vec{p}_3) \\ &\delta^{(3)}(\vec{q} + \vec{p}_2 - \vec{p}_4) a^\dagger(\vec{p}_3, s_1) a^\dagger(\vec{p}_4, s_2) a(\vec{p}_2, s_2) a(\vec{p}_1, s_1) \bar{\mathcal{V}}(|\vec{q}|) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{s_1,s_2}\int \frac{d^3\vec{p}_1 d^3\vec{p}_2 d^3\vec{p}_3 d^3\vec{p}_4}{(2\pi\hbar)^{12}}(2\pi\hbar)^3\delta^{(3)}(\vec{p}_1+\vec{p}_2-\vec{p}_3-\vec{p}_4)\,\bar{\mathcal{V}}(|\vec{p}_1-\vec{p}_3|)$$

$$a^\dagger(\vec{p}_3,s_1)a^\dagger(\vec{p}_4,s_2)a(\vec{p}_2,s_2)a(\vec{p}_1,s_1)$$

De Hamiltoniaan in de plaatsrepresentatie wordt nu

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{s_1}\int d^3\vec{r}_1\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{r}_1,s_1)\vec{\nabla}\psi(\vec{r}_1,s_1) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{s_1,s_2}\int d^3\vec{r}_1\int d^3\vec{r}_2\mathcal{V}(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)\psi^\dagger(\vec{r}_1,s_1)\psi^\dagger(\vec{r}_2,s_2)\psi(\vec{r}_2,s_2)\psi(\vec{r}_1,s_1) \end{aligned}$$

het veld $\psi(\vec{r},s)$ is tijdsonafhankelijk en kan worden beschouwd als een operator in het Schrödingerbeeld. In het Heisenbergbeeld wordt de tijdsafhankelijkheid gegeven door

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r},s) &\to \psi(\vec{r},t,s) \\ H(\psi(\vec{r},s)) &\to H_H(\psi(\vec{r},t,s)) \\ \psi(\vec{r},t,s) &= e^{iHt/\hbar}\psi(\vec{r},0,s)e^{-iHt/\hbar} \\ \frac{d\psi(\vec{r},t,s)}{dt} &= \tfrac{1}{i\hbar}[\psi(\vec{r},s,t),H_H] \qquad \text{Heisenberg bewegingsvergelijking} \end{aligned}$$

Na partiële integratie ($\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}=\Delta$)

$$\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{s_1}\int d^3\vec{r}_1\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)\vec{\nabla}\psi(\vec{r}_1,t,s_1) = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{s_1}\int d^3\vec{r}_1\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)\Delta\psi(\vec{r}_1,t,s_1)$$

In de afleiding van het bovenstaande, die nu volgt, maken we gebruik van de volgende relatie die geldt voor tijdsonafhankelijke operatoren.

$$[A,B\,C]=[A,B]\;C+B\;[A,C]$$

Merk op dat de (anti)-commutatie relaties ook blijven gelden als de operatoren tijdsafhankelijk zijn mits zij alle maar op hetzelfde tijdstip gedefinieerd zijn.
Beschouw nu eerst de commutator

$$[\psi(\vec{r},t,s),\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)\Delta\psi(\vec{r}_1,t,s_1)] \;=\; \delta_{ss_1}\delta^{(3)}(\vec{r}-\bar{r}_1)\Delta\psi(\vec{r}_1,t,s_1)$$

Opm. Hierboven is gebruik gemaakt van

$$[\psi(\vec{r},t,s),\Delta_{r_1}\psi(r_1,t,s_1)]=\Delta_{r_1}[\psi(\vec{r},t,s),\psi(\vec{r}_1,t,s_1)]=0$$

Vervolgens berekenen wij de commutator

$$[\psi(\vec{r},t,s),\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)\psi^\dagger(\vec{r}_2,t,s_2)\psi(\vec{r}_2,t,s_2)\psi(\vec{r}_1,t,s_1)]$$

$$=[\psi(\vec{r},t,s),\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)\psi^\dagger(\vec{r}_2,t,s_2)]\psi(\vec{r}_2,t,s_2)\psi(\vec{r}_1,t,s_1)$$

$$= \left\{ [\psi(\vec{r},t,s),\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)]\psi^\dagger(\vec{r}_2,t,s_2) + \psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)[\psi(\vec{r},t,s),\psi^\dagger(\vec{r}_2,t,s_2)] \right\}$$

$$\psi(\vec{r}_2,t,s_2)\psi(\vec{r}_1,t,s_1)$$

$$= \left\{ \delta_{ss_1}\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}_1)\psi^\dagger(\vec{r}_2,t,s_2) + \delta_{ss_2}\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}_2)\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1) \right\} \psi(\vec{r}_2,t,s_2)\psi(\vec{r}_1,t,s_1)$$

Uit het voorafgaande volgt de operatorvergelijking

$$i\hbar \frac{d\psi(\vec{r},t,s)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t,s)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{s_2}\int d^3\vec{r}_2 \mathcal{V}(|\vec{r}-\vec{r}_2|)\psi^\dagger(\vec{r}_2,t,s_2)\psi(\vec{r}_2,t,s_2)\psi(\vec{r},t,s)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{s_1}\int d^3\vec{r}_1 \mathcal{V}(|\vec{r}_1-\vec{r}|)\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)\psi(\vec{r},t,s)\psi(\vec{r}_1,t,s_1)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t,s) + \left[\sum_{s_1}\int d^3\vec{r}_1 \mathcal{V}(|\vec{r}-\vec{r}_1|)\psi^\dagger(\vec{r}_1,t,s_1)\psi(\vec{r}_1,t,s_1)\right]\psi(\vec{r},t,s)$$

Deze vergelijking heeft dezelfde vorm als de Schrödingervergelijking echter hier stelt de ψ een operator voor. Eenvoudig gezegd komt het er op neer dat de term tussen de rechte haken de operator van de potentiële energie voorstelt die een deeltje op plaats $\vec{r}$ voelt t.g.v. de aanwezigheid van andere deeltjes. Deze term is een operator en <u>niet</u> een functie. Dit is vanwege het feit dat een deeltje in een veel-deeltjessysteem voortdurend de potentiaal beïnvloed, die het ondervindt van de andere deeltjes. Een van de consequenties is dat de bovenstaande vergelijking veel moeilijker op te lossen is dan de één- deeltjes- Schrödingervergelijking. Vandaar dat men de operatorvergelijking alleen via benaderingen kan oplossen. Het operatorkarakter van bovenstaande vergelijking geeft aan waarom ψ wel eens het Schrödingerveld wordt genoemd.

IX Quantisatie van het electromagnetische veld

1) **klassieke stralingsveld, Hamilton beschrijving**.

Het klassieke stralingsveld $\vec{A}$ is een oplossing van de Maxwellvergelijkingen. Zijn $\vec{E}$ en $\vec{B}$ respectievelijk het electrische en magnetische veld dan luiden de Maxwellvergelijkingen als volgt

$$\begin{array}{lll} \text{div } \vec{E} = \rho/\varepsilon_0 & \text{div } \vec{B} = 0 & c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \\ \text{rot } \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & \text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & \end{array}$$

voor het vrije veld is $\rho = 0$ en $\vec{J} = 0$

$\vec{E}$ en $\vec{B}$ kunnen worden uitgedrukt in een reëel vectorveld $\vec{A}(\vec{r}, t)$

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\dot{\vec{A}} \qquad \vec{B} = \text{rot}\, \vec{A}$$

Substitutie in de bovenstaande Maxwellvergelijkingen geeft voor $\rho = 0$ en $\vec{J} = 0$

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \quad \text{klassieke golfvergelijking}$$

met div $\vec{A} = 0$ als nevenvoorwaarde
De stralingsveldenergie wordt gegeven door

$$\mathcal{E} = \frac{\varepsilon_0}{2}\int d^3r(E^2 + c^2B^2) = \frac{\varepsilon_0}{2}\int d^3\vec{r}\{\dot{\vec{A}}\dot{\vec{A}} + c^2\text{rot}\vec{A}\,\text{rot}\vec{A}\}$$

De stralingsveldimpuls is gelijk aan

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \int d^3\vec{r}(\vec{E} \times \vec{B}) = -\varepsilon_0 \int d^3\vec{r}\{\dot{\vec{A}} \times (\text{rot}\vec{A})\}$$

In de discrete golfgetal-representatie kunnen we $\vec{A}$ oplossen.

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1,2} A_{\vec{k},\lambda}(t)\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{V}}$$

Volume $V = L^3$ met periodieke randvoorwaarden

De $\vec{k}$ waarden zijn $k_x = \frac{2\pi}{L}n_x \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots$

analoog voor y en z

De $\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}$ (met $\lambda = 1, 2$) zijn reële lineair onafhankelijke eenheidsvektoren.
Dit zijn de polarisatievektoren, die loodrecht staan op $\vec{k}$.

m.a.w. $\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{k} = 0$ (transversaliteit)

Dit laatste volgt uit

$$\mathrm{div}\vec{A} = 0$$

Definieer $\vec{k} = k\hat{\vec{k}}$. Nu gelden de relaties

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k},1} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},2} = \hat{\vec{k}} \qquad \text{(cyclisch)}$$

$$\sum_{\lambda=1,2} \epsilon^{i}_{\vec{k},\lambda}\epsilon^{j}_{\vec{k},\lambda} = \delta_{ij} - \hat{k}_i\hat{k}_j$$

Met behulp van de bovenstaande formules kan men $\vec{A}$ ontwikkelen in lineair gepolariseerde vlakke golven.

Noem de Fouriercoefficiënten : $A_{\vec{k},\lambda}(t)$

$$A_{\vec{k},\lambda}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3\vec{r}\, e^{-i\vec{k}\vec{r}} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{A}(\vec{r},t)$$

(Hierbij is gebruik gemaakt van $\frac{1}{V}\int d^3\vec{r} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$)

De $A_{\vec{k},\lambda}(t)$ voldoen aan

$$\ddot{A}_{\vec{k},\lambda}(t) = -c^2k^2A_{\vec{k},\lambda}(t) = -\omega_k^2 A_{\vec{k},\lambda}(t) \qquad \omega_k = ck$$

(klassiek lineaire harmonische oscillator)

dit volgt uit de klassieke golfvergelijking.
Verder introduceren we de conventie

$$\vec{\epsilon}_{-\vec{k},1} = -\vec{\epsilon}_{\vec{k},1} \qquad \vec{\epsilon}_{-\vec{k},2} = \vec{\epsilon}_{\vec{k},2}$$

Dit is in overeenstemming met

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k},1} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},2} = \hat{\vec{k}}$$

eis : $\vec{A}(\vec{r},t)$ is een reëel vectorveld

$$\Rightarrow \quad A^*_{\vec{k},1}(t) = -A_{-\vec{k},1}(t) \quad , \quad A^*_{\vec{k},2}(t) = A_{-\vec{k},2}(t)$$

De algemene oplossing die aan bovenstaande restricties voldoet is

$$\begin{aligned} A_{\vec{k},1}(t) &= c_{\vec{k},1}e^{-i\omega_k t} - c^*_{-\vec{k},1}e^{i\omega_k t} \\ A_{\vec{k},2}(t) &= c_{\vec{k},2}e^{-i\omega_k t} + c^*_{-\vec{k},2}e^{i\omega_k t} \end{aligned}$$

met willekeurige onafhankelijke complexe getallen $c_{\vec{k},\lambda}$

Conclusie: het klassieke stralingsveld kan beschreven worden in termen van onafhankelijke complexe variabelen $c_{\vec{k},\lambda}(t)$ en $c^*_{\vec{k},\lambda}(t)$ die gedefinieerd worden door

$$c_{\vec{k},\lambda}(t) = e^{-i\omega_k t} c_{\vec{k},\lambda} \;\rightarrow\; c^*_{\vec{k},\lambda}(t) = e^{i\omega_k t} c^*_{\vec{k},\lambda}$$

met $\dot{c}_{\vec{k},\lambda}(t) = -i\omega_k c_{\vec{k},\lambda}(t) \qquad c_{\vec{k},\lambda}(0) = c_{\vec{k},\lambda}$

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{1}{2}(\vec{A}(\vec{r},t) + \vec{A}^*(\vec{r},t))$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}\sum_{\lambda=1,2}\frac{\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}}{\sqrt{V}}\{A_{\vec{k},\lambda}(t)e^{i\vec{k}\vec{r}} + A^*_{\vec{k},\lambda}(t)e^{-i\vec{k}\vec{r}}\}$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}}[\vec{\epsilon}_{\vec{k},1}c_{\vec{k},1}e^{-i\omega_k t}e^{i\vec{k}\vec{r}} - \vec{\epsilon}_{\vec{k},1}c^*_{-\vec{k},1}e^{i\omega_k t}e^{i\vec{k}\vec{r}} + \vec{\epsilon}_{\vec{k},1}c^*_{\vec{k},1}e^{i\omega_k t}e^{-i\vec{k}\vec{r}}$$

$$-\vec{\epsilon}_{\vec{k},1}c_{-\vec{k},1}e^{-i\omega_k t}e^{-i\vec{k}\vec{r}} + \vec{\epsilon}_{\vec{k},2}c_{\vec{k},2}e^{-i\omega_k t}e^{i\vec{k}\vec{r}} + \vec{\epsilon}_{\vec{k},2}c^*_{-\vec{k},2}e^{i\omega_k t}e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$+\vec{\epsilon}_{\vec{k},2}c^*_{\vec{k},2}e^{i\omega_k t}e^{-i\vec{k}\vec{r}} + \vec{\epsilon}_{\vec{k},2}c_{-\vec{k},2}e^{-i\omega_k t}e^{-i\vec{k}\vec{r}}]$$

Merk op dat de polarisatievectoren $\epsilon_{\vec{k},\lambda}$ reëel zijn. Ook geldt dat $\sum\limits_{\vec{k}} = \sum\limits_{-\vec{k}}$. We kunnen dan schrijven door gebruik te maken van $\vec{\epsilon}_{-\vec{k},1} = -\vec{\epsilon}_{\vec{k},1}$ en $\vec{\epsilon}_{-\vec{k},2} = \vec{\epsilon}_{\vec{k},2}$

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}}\sum_{\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\{c_{\vec{k},\lambda}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)} + c^*_{\vec{k},\lambda}e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)}\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}}\sum_{\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\{c_{\vec{k},\lambda}(t)e^{i\vec{k}\vec{r}} + c^*_{\vec{k},\lambda}(t)e^{-i\vec{k}\vec{r}}\}$$

$\mathcal{E}$ en P kan men nu in $c_{\vec{k},\lambda}$ en $c^\star_{\vec{k},\lambda}$ uitdrukken

$$\vec{E} = \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}}\sum_{\lambda}\omega_k\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\{c_{\vec{k},\lambda}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)} - c^\star_{\vec{k};\lambda}e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)}\}$$

$$\vec{B} = \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{\vec{k}}\sum_{\lambda}(\vec{k}\times\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})\{c_{\vec{k},\lambda}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)} - c^\star_{\vec{k},\lambda}e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)}\}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \mathcal{E} &= 2\varepsilon_0 \textstyle\sum_{\vec{k},\lambda} c^*_{\vec{k},\lambda}c_{\vec{k},\lambda}\omega_k^2 \\ \vec{P} &= 2\varepsilon_0 \textstyle\sum_{\vec{k},\lambda} c^*_{\vec{k},\lambda}c_{\vec{k},\lambda}\omega_k\vec{k} \end{aligned}$$

In termen van reële variabelen

$$q_{\vec{k},\lambda} = (c_{\vec{k},\lambda} + c^*_{\vec{k},\lambda})\sqrt{\varepsilon_0} \qquad p_{\vec{k},\lambda} = -i\omega_k(c_{\vec{k},\lambda} - c^*_{\vec{k},\lambda})\sqrt{\varepsilon_0}$$

uit

$$\dot{c}_{\vec{k},\lambda}(t) = -i\omega_k c_{\vec{k},\lambda}(t) \quad \text{en} \quad \dot{c}^*_{\vec{k},\lambda}(t) = i\omega_k c^*_{\vec{k},\lambda}(t)$$

leiden we af

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda}(p^2_{\vec{k},\lambda} + \omega_k^2 q^2_{\vec{k},\lambda}) \equiv H(\{q_{\vec{k},\lambda}\},\ \{p_{\vec{k},\lambda}\})$$

en

$$\dot{q}_{\vec{k},\lambda} = p_{\vec{k},\lambda} \qquad \dot{p}_{\vec{k},\lambda} = -\omega_k^2 q_{\vec{k},\lambda}$$

Dit zijn de Hamiltonvergelijkingen die corresponderen met de hamiltoniaan H. Dus de $q_{\vec{k},\lambda}$ en $p_{\vec{k},\lambda}$ zijn kanonieke variabelen. In de Hamiltonbeschrijving is een klassiek stralingsveld een aftelbare oneindig aantal onafhankelijke harmonische oscillatoren die elk door een bepaalde golfvektor $\vec{k} = k\hat{\vec{k}}$ (golflengte $= 2\pi/k$), polarisatierichting λ (met $\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \perp \vec{k}$) en frequentie $\omega_k = c|\vec{k}| = ck$ gekarakteriseerd worden.

voor $\vec{P}$ geldt

$$\vec{P} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda}(p^2_{\vec{k},\lambda} + \omega_k^2 q^2_{\vec{k},\lambda})\frac{\vec{k}}{\omega_k}$$

Conclusie: een klassiek veld is dus een systeem met een oneindig aantal vrijheidsgraden (vanwege $-\infty < \ k \ < \infty$).

2) <u>**Quantisatie van het stralingsveld**</u>.

Voor een systeem, met een <u>eindig</u> aantal vrijheidsgraden hebben we eerste quantisatie toegepast (bijv. een puntdeeltje).

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad i,j = 1,2,3$$

Dit generaliseren we tot een systeem met een oneindig aantal vrijheidsgraden. In dit geval het stralingsveld.

<u>veldquantisatie of tweede quantisatie</u>

$q_{k,\lambda}$ en $p_{\vec{k},\lambda}$ worden operatoren.

In het Schrödinger beeld krijgen we

$$\begin{aligned}
[\hat{q}_{\vec{k},\lambda}, \hat{p}_{\vec{k}',\lambda'}] &= i\hbar\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \quad [\hat{q}_{\vec{k},\lambda}, \hat{q}_{\vec{k}',\lambda'}] = 0 \\
[\hat{p}_{\vec{k},\lambda}, \hat{p}_{\vec{k}',\lambda'}] &= 0
\end{aligned}$$

In het Heisenberg beeld krijgen we commutatierelaties bij gelijke tijden

$$\begin{aligned}
[\hat{q}_{\vec{k},\lambda}(t), \hat{p}_{\vec{k}',\lambda'}(t)] &= i\hbar\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \quad [\hat{q}_{\vec{k},\lambda}(t), \hat{q}_{\vec{k}',\lambda'}(t)] = 0 \\
[\hat{p}_{\vec{k},\lambda}(t), \hat{p}_{\vec{k}',\lambda'}(t)] &= 0
\end{aligned}$$

De Heisenberg-bewegingsvergelijkingen worden

$$\dot{\hat{q}}_{\vec{k},\lambda} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_{\vec{k},\lambda}} \qquad \dot{\hat{p}}_{\vec{k},\lambda} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}_{\vec{k},\lambda}}$$

met als energie-operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda} \left(\hat{p}^2_{\vec{k},\lambda} + \omega_k^2 \hat{q}^2_{\vec{k},\lambda}\right) \qquad \text{(provisorisch)}$$

dus

$$\dot{\hat{q}}_{\vec{k},\lambda} = \hat{p}_{\vec{k},\lambda} \qquad \dot{\hat{p}}_{\vec{k},\lambda} = -\omega_k^2 \hat{q}_{\vec{k},\lambda}$$

Verder hebben we de impulsoperator

$$\hat{\vec{P}} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda}(\hat{p}^2_{\vec{k},\lambda} + \omega_k^2\ \hat{q}^2_{\vec{k},\lambda})\frac{\vec{k}}{\omega_k} \qquad \text{(provisorisch)}$$

of in termen van de "natuurlijke" oscillatoroperatoren

$$\begin{aligned} a_{\vec{k},\lambda}(t) &= \sqrt{\frac{2\omega_k}{\hbar}}(\hat{q}_{\vec{k},\lambda}(t) + \frac{i}{\omega_k}\hat{p}_{\vec{k},\lambda}(t)) \\ a^\dagger_{\vec{k},\lambda}(t) &= \sqrt{\frac{2\omega_k}{\hbar}}(\hat{q}_{\vec{k},\lambda}(t) - \frac{i}{\omega_k}\hat{p}_{\vec{k},\lambda}(t)) \end{aligned}$$

Dit betekent dat we $c_{\vec{k},\lambda}(t)$ en $c^*_{\vec{k},\lambda}(t)$ vervangen door de operatoren

$$c_{\vec{k},\lambda}(t) \to \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0}}a_{\vec{k},\lambda}(t) \qquad c^*_{\vec{k},\lambda}(t) \to \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0}}a^\dagger_{\vec{k},\lambda}(t)$$

met de commutatierelaties

$$[a_{\vec{k},\lambda}(t), a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}(t)] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \quad [a_{\vec{k},\lambda}(t), a_{\vec{k}',\lambda'}(t)] = 0 \quad [a^\dagger_{\vec{k},\lambda}(t), a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}(t)] = 0$$

en de Heisenberg-bewegingsvergelijkingen zien eruit als

$$\dot{a}_{\vec{k},\lambda} = -i\omega_k a_{\vec{k},\lambda} \qquad \dot{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda} = i\omega_k a^\dagger_{\vec{k},\lambda}$$

met als oplossingen

$$a_{\vec{k},\lambda}(t) = e^{-i\omega_k t}a_{\vec{k},\lambda} \quad a^\dagger_{\vec{k},\lambda}(t) = e^{i\omega_k t}a^\dagger_{\vec{k},\lambda}$$

Analoog in het Schrödingerbeeld

$$a_{\vec{k},\lambda} = a_{\vec{k},\lambda}(0) \quad a^\dagger_{\vec{k},\lambda} = a^\dagger_{\vec{k},\lambda}(0)$$

De energie- en impulsoperatoren worden

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda}(a^\dagger_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k},\lambda} + a_{\vec{k},\lambda}a^\dagger_{\vec{k},\lambda})\ \hbar\omega_k \qquad \text{(provisorisch)}$$

$$\vec{P} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda}(a^\dagger_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k},\lambda} + a_{\vec{k},\lambda}a^\dagger_{\vec{k},\lambda})\ \hbar\vec{k} \qquad \text{(provisorisch)}$$

Dus $\vec{A}(\vec{r},t)$ wordt vervangen door een Heisenberg-operatorveld

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}(a_{\vec{k},\lambda}e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)} + a^\dagger_{\vec{k},\lambda}e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega_k t)})$$

Schrödingerbeeldformulering

De fundamentele operatoren zijn $a_{\vec{k},\lambda}$, $a^\dagger_{\vec{k},\lambda}$ met de commutatierelaties

$$[a_{\vec{k},\lambda}, a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \quad [a_{\vec{k},\lambda}, a_{\vec{k}',\lambda'}] = 0 \quad [a^\dagger_{\vec{k},\lambda}, a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}] = 0$$

Definitie $N_{\vec{k},\lambda} = a^\dagger_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k},\lambda}$ getalsdichtheidsoperatoren

$$\Rightarrow [N_{\vec{k},\lambda}, a_{\vec{k},\lambda'}] = -a_{\vec{k},\lambda'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}\ ;\ [N_{\vec{k},\lambda}, a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}]\ =\ a^\dagger_{\vec{k},\lambda'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}(\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}(a_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\vec{r}} + a^\dagger_{\vec{k},\lambda}e^{-i\vec{k}\vec{r}})$$

In de bovenstaande uitdrukkingen zijn $a^\dagger$ en a respectievelijk creatie- en annihilatie-operatoren. We hebben nu een veel-deeltjessysteem die een Fockruimte opspannen. De deeltjes zijn hier fotonen. Merk op dat fotonen bosonen zijn!
Als we anticommutatie-relaties voor a en $a^\dagger$ hadden gekozen dan kan A niet meer als een som van een oneindig aantal harmonische oscillatoren opgevat worden. De reden dat a en $a^\dagger$ aan commutatie-relaties moeten voldoen volgt uit het spin statistiek theorema in de relativistische quantumveldentheorie. In quantumtheorie 2 zullen we zien dat als men andere relativistische veldentheorieën wil quantiseren het handiger is om het Lagrangeformalisme te gebruiken dan het Hamiltoniaanformalisme.

Een veel-fotontoestand wordt aangegeven door de notatie

$$|\{n_{\vec{k},\lambda}\}\ \rangle =\ |\ n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}, \cdots\rangle = \prod_{\vec{k}_i,\lambda_i}\frac{(a^\dagger_{\vec{k}_i,\lambda_i})^{n_{\vec{k}_i,\lambda_i}}}{\sqrt{n_{\vec{k}_i,\lambda_i}!}}|\ 0\ \rangle$$

$$\begin{aligned}
&a^\dagger_{\vec{k}_i,\lambda_i}|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}, \cdots\ \rangle \\
=\ \ &\sqrt{n_{\vec{k}_i,\lambda_i}+1}|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}+1, \cdots\ \rangle \\
&a_{\vec{k}_i,\lambda_i}|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}, \cdots\ \rangle \\
=\ \ &\sqrt{n_{\vec{k}_i,\lambda_i}}|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}-1, \cdots\rangle
\end{aligned}$$

De provisorische energie-operator wordt

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda}(a^\dagger_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k},\lambda} + a_{\vec{k},\lambda}a^\dagger_{\vec{k},\lambda})\hbar\omega_k \\ &= \sum_{\vec{k},\lambda}(N_{\vec{k},\lambda} + 1/2)\hbar\omega_k \end{aligned}$$

zou leiden tot

$$H|0\rangle = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda}\hbar\omega_k|0\rangle = \infty|0\rangle$$

idem voor de impulsoperator $\vec{P}$

Fysische eis: vacuüm toestand $\equiv$ "geen straling" toestand $\equiv$ toestand met stralingsenergie en stralingsimpuls gelijk aan nul
Daarom passen we normale ordening toe

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda} :(a^\dagger_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k},\lambda} + a_{\vec{k},\lambda}a^\dagger_{\vec{k},\lambda}): \hbar\omega_k = \sum_{\vec{k},\lambda} N_{\vec{k},\lambda}\hbar\omega_k$$

$$P = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\lambda} :(a^\dagger_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k},\lambda} + a_{\vec{k},\lambda}a^\dagger_{\vec{k},\lambda}): \hbar\vec{k} = \sum_{\vec{k},\lambda} N_{\vec{k},\lambda}\hbar\vec{k}$$

$$:aa^\dagger: = a^\dagger a$$

nu is

$$H|0\rangle = 0|0\rangle \qquad \vec{P}|0\rangle = \vec{0}|0\rangle$$

$$H|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}, \cdots\rangle = \sum_{\vec{k},\lambda} n_{\vec{k},\lambda}\hbar\omega_k|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}, \cdots\rangle$$

$$\vec{P}|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}, \cdots\rangle = \sum_{\vec{k},\lambda} n_{\vec{k},\lambda}\hbar\vec{k}|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}, \cdots, n_{\vec{k}_i,\lambda_i}, \cdots\rangle$$

In plaats van lineair gepolariseerde vlakke golven kunnen we ook circulair gepolariseerde vlakke golven bestuderen.

<u>def.</u> $\vec{\epsilon}_{\vec{k},R} = -\frac{\vec{\epsilon}_{\vec{k},1} + i\vec{\epsilon}_{\vec{k},2}}{\sqrt{2}}$ rechtsdraaiende polarisatie vektor

$\vec{\epsilon}_{\vec{k},L} = \frac{\vec{\epsilon}_{\vec{k},1} - i\vec{\epsilon}_{\vec{k},2}}{\sqrt{2}}$ linksdraaiende polarisatie vektor

$$a_{\vec{k},R} = -\frac{a_{\vec{k},1} - ia_{\vec{k},2}}{\sqrt{2}} \qquad a_{\vec{k},L} = \frac{a_{\vec{k},1} + ia_{\vec{k},2}}{\sqrt{2}}$$

$$\vec{k}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} = 0 \qquad \lambda = R, L$$

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k},R}{}^* = -\vec{\epsilon}_{\vec{k},L} \qquad \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda'}{}^* = \delta_{\lambda\lambda'} \qquad \lambda,\lambda' = L,R$$

maar

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} = 0 \quad \text{en} \quad \vec{\epsilon}_{-\vec{k},L} = \vec{\epsilon}_{\vec{k},R}$$

De electromagnetische veld-operator wordt nu in het Schrödingerbeeld

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=L,R} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k \varepsilon_0 V}} \left(\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}{}^* a^\dagger_{\vec{k},\lambda} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)$$

Toepassingen

A) Emissie en absorptie van fotonen door atomen

Naar analogie met de klassieke electrodynamica bekijken we geladen deeltjes in wisselwerking met het stralingsveld. Dit wordt als een gekoppeld systeem beschouwd.

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{atoom}} + \hat{H}_{\text{foton}} + \hat{H}_{\text{int}} \qquad \text{(hamiltoniaan)}$$

voor een (quasi) één electron-atoom.

$$\hat{H}_{\text{atoom}} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$$

$$\hat{H}_{\text{atoom}} \rightarrow \text{ basis } \{|a\rangle\} \text{ spant de Hilbertruimte } \mathcal{H}^{\text{atoom}} \text{op}$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{\text{atoom}} \otimes \mathcal{H}^{\text{foton}} \text{opgespannen door}$$

$$\{|a; n_{\vec{k},\lambda}\rangle\} = \{|a\rangle\}\{|n_{\vec{k},\lambda}\rangle\} \epsilon \mathcal{H}$$

Als a een aangeslagen gebonden atoomtoestand voorstelt dan is $|a; 0_{\vec{k},\lambda}\rangle$ in het algemeen geen stabiele toestand. H_{int} zorgt ervoor dat er overgangen plaats kunnen vinden naar $|b; 1_{\vec{k},\lambda}\rangle$. M.a.w er is een overgang $a \rightarrow b$ (met $E_b < E_a$) mogelijk gepaard gaande met spontane emissie van straling. Merk op dat in de Schrödinger-theorie de aangeslagen gebonden toestanden stationair (stabiel) zijn.

$\hat{H}_{\text{int}}$ wordt geconstrueerd door in $\hat{H}_{\text{atoom}}$ de volgende substitutie uit te voeren. Dit is analoog aan de klassieke modificatie $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}$ (De electronlading $= -e$)

$$\hat{\vec{p}} \rightarrow \hat{\vec{p}} + e\vec{A}(\hat{\vec{r}}) \qquad \text{(minimale substitutie)}$$

Waarbij $\vec{A}(\hat{\vec{r}})$ nu de stralings-veldoperator is (tweede quantisatie)

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{e}{2m}\{\, \hat{\vec{p}}\vec{A}(\hat{\vec{r}}) + \vec{A}(\hat{\vec{r}})\hat{\vec{p}} \,\} + \frac{e^2}{2m}\vec{A}(\hat{\vec{r}})\vec{A}(\hat{\vec{r}})$$

In het geval de spin van het electron ook nog meegenomen wordt kunnen we aan $\hat{H}_{\text{int}}$ toevoegen

$$\hat{H}^{(\text{spin})}_{\text{int}} = \frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma}\vec{B}(\hat{\vec{r}}) = \frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma} \text{ rot } \vec{A}(\hat{\vec{r}}) = H^{(3)}_{\text{int}}$$

Omdat div $\vec{A}(\hat{\vec{r}}) = 0$ geldt

$$\hat{\vec{p}}\vec{A}(\hat{\vec{r}}) = \vec{A}(\hat{\vec{r}})\hat{\vec{p}}$$

dus

$$\hat{H}^{(1)}_{\text{int}} = \frac{e}{m}\hat{\vec{p}}\vec{A}(\hat{\vec{r}}) = \frac{e}{m}\sum_{\vec{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}\;\;\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\;\;(a_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}} + a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}})$$

$$\hat{H}^{(3)}_{\text{int}} = \frac{ie\hbar}{2m}\sum_{\vec{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}\;\;\vec{\sigma}(\vec{k}\times\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})\;\;(a_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}} - a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}})$$

$$\hat{H}^{(2)}_{\text{int}} = \frac{e^2}{2m}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k},\lambda}\sum_{\vec{k}',\lambda'}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}\frac{1}{\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}}\;\;\{a_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k}',\lambda'}e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\hat{\vec{r}}}$$

$$+a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}a^{\dagger}_{\vec{k}',\lambda'}e^{-i(\vec{k}+\vec{k}')\hat{\vec{r}}} + a_{\vec{k},\lambda}a^{\dagger}_{\vec{k}',\lambda'}e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\hat{\vec{r}}} + a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k}',\lambda'}e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\hat{\vec{r}}}\;\}\;.$$

laat $|i\rangle$ en $|f\rangle$ de begin- en eindtoestand zijn van het type $|a;\{n_{k,\lambda}\}\rangle$.

$\hat{H}^{(1)}_{\text{int}}$ en $\hat{H}^{(3)}_{\text{int}}$ hebben respectievelijk matrixelementen $\langle f|H^{(1)}_{\text{int}}|i\rangle \neq 0$ en $\langle f|H^{(3)}_{\text{int}}|i\rangle \neq 0$ slechts voor toestanden $|f\rangle$ die één foton meer of minder bevatten dan $|i\rangle$.

$\hat{H}^{(2)}_{\text{int}}$ heeft matrix elementen $\langle f|H^{(2)}_{\text{int}}|i\rangle \neq 0$ slechts voor toestanden $|f\rangle$ die evenveel fotonen bevatten als $|i\rangle$ of twee fotonen meer of minder bevatten dan $|i\rangle$.

In laagste orde storingsrekening, waarbij de overgangswaarschijnlijkheid $P(i\to f) \sim |\langle f|\hat{H}_{\text{int}}|i\rangle|^2$, kan men dus voor overgangen $|i\rangle \to |f\rangle$, met één foton meer of minder (één-fotonprocessen), $H^{(2)}_{\text{int}}$ buiten beschouwing laten

Voor overgangen $|i\rangle \to |f\rangle$ waarbij $|f\rangle$ evenveel fotonen heeft dan $|i\rangle$ of twee fotonen meer of minder heeft dan $|i\rangle$ kan men $\hat{H}^{(1)}_{\text{int}}$ en $\hat{H}^{(3)}_{\text{int}}$ buiten beschouwing laten

B) Spontane emissie in de dipoolbenadering

Het matrixelement voor het absorptieproces $(n-1)(\gamma)+\gamma(k)+a \to (n-1)(\gamma)+b$ wordt gegeven door

$$\langle b;n_{\vec{k},\lambda}-1|\hat{H}^{(1)}_{\text{int}}|a;n_{\vec{k},\lambda}\rangle = \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}\langle b;n_{\vec{k},\lambda}-1|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}a_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}|a;n_{\vec{k},\lambda}\rangle$$

$$= \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar n_{\vec{k},\lambda}}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}\langle b|e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\rangle$$

Voor het emissieproces $n(\gamma)+a \to n(\gamma)+\gamma(k)+b$ wordt het matrixelement gelijk aan

$$\langle b; n_{\vec{k},\lambda}+1|\hat{H}^{(1)}_{\rm int}|a; n_{k,\lambda}\rangle = \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar(n_{\vec{k},\lambda}+1)}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}\langle b|e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\rangle$$

Voor de overgangswaarschijnlijkheid gebruiken we de Lippmann-Schwinger vergelijking De overgangsamplitude wordt

$$T_{fi} = \langle f|\hat{T}|i\rangle = \langle f|\hat{V}|i\rangle + \ldots \text{ met } \hat{V} = \hat{H}_{\rm int} \qquad \text{(Bornbenadering)}$$

De overgangswaarschijnlijkheid wordt gegeven door

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f - E_i)|\langle f|\hat{H}_{\rm int}|i\rangle|^2$$

Laten wij eerst het emissieproces behandelen

De energie voor en na de emissie van het foton worden gegeven door

$$E_i = n_{\vec{k},\lambda}\hbar\omega_k + E_a \qquad E_f = (n_{\vec{k},\lambda}+1)\hbar\omega_k + E_b$$

Dus $E_a > E_b$

$W_{fi} = \int\, w_{fi} dN_f$ is de totale overgangswaarschijnlijkheid per tijdseenheid

dN_f = aantal eindtoestanden met $\vec{p}$ in het volume element $d^3\vec{p}$ waarbij $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Dit is gelijk aan

$$dN_f = \frac{\hbar^3 d^3\vec{k}}{(2\pi\hbar)^3\rho_f} \text{ met } \rho_f = \frac{1}{L^3} = \frac{1}{V}$$

$$dN_f = V\frac{k^2 dk d\Omega_k}{(2\pi)^3} = V\frac{\omega_k^2 d\omega_k d\Omega_k}{(2\pi c)^3} \qquad k = \omega_k/c$$

voor emissie hebben we dus na integratie over ω_k

$$\begin{aligned} W_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{m^2}\frac{\hbar(n_{\vec{k},\lambda}+1)}{2\omega_k\varepsilon_0 V}|\langle b|e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\rangle|^2\frac{V\omega_k^2 d\Omega_k}{\hbar(2\pi c)^3} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon_0 c}(n_{\vec{k},\lambda}+1)\frac{\omega_k}{2\pi m^2 c^2}d\Omega_k|\langle b|e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\rangle|^2 \end{aligned}$$

Merk op dat $\delta(E_f - E_i) = \delta(E_a - E_b - \hbar\omega_k) = \frac{1}{\hbar}\delta(\frac{E_a - E_b}{\hbar} - \omega_k)$ hetgeen impliceert $E_a = \hbar\omega_k + E_b$. Verder voeren wij de fijnstructuurconstante in

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon_0 c}$$

met $\alpha = 1/137$

$$\text{als } \lambda = \frac{2\pi}{k} \gg r_{\rm atoom} \quad \text{met}$$

$$r_{\text{atoom}} \sim 1\dot{A} \qquad \lambda \sim 10^3\ddot{\mathrm{A}}$$

dan kunnen we de dipoolbenadering maken

$$k \ll \frac{2\pi}{r} \to e^{-i\vec{k}\vec{r}} = 1 - i\vec{k}\vec{r} - (\vec{k}\vec{r})^2/2! + \cdots$$

Als nu alleen de leidende term (gegeven door 1) meegenomen wordt dan spreken wij van de electrische dipoolbenadering of wel E_1-benadering (E_1-straling).

Het volgende matrixelement wordt gegeven door

$$\langle b; n_{\vec{k},\lambda} + 1 | H_{\text{int}}^{(3)} | a, n_{\vec{k},\lambda} \rangle = \frac{-ie\hbar}{2m} \sqrt{\frac{\hbar(n_{\vec{k},\lambda}+1)}{2\omega_k \varepsilon_0 V}} \langle b | \vec{\sigma}(\vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}) e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}} | a \rangle$$

Dit leidt tot de totale overgangswaarschijnlijkheid

$$W_{fi} = \alpha(n_{\vec{k},\lambda} + 1) \frac{\omega_k \hbar^2}{8\pi m^2 c^2} d\Omega_k |\langle b | \vec{\sigma}(\vec{k} \times \bar{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}) e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}} | a \ \rangle \ |^2$$

Als we hier de 1 in de exponent meenemen dan blijkt dat het bovenstaande matrix-element met een factor k ($k << 1/r$) onderdrukt is t.o.v. de E_1-benadering.

Wij gaan nu met de E_1-benadering verder zodat alleen $H_{\text{int}}^{(1)}$ in de storingsreeks meegenomen wordt.

Nu moet het matrixelement $\langle b | e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}} \hat{\vec{p}} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} | a \rangle$ berekend worden. Hierbij wordt gebruik gemaakt van de volgende gegevens

$$\langle b | e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}} \hat{\vec{p}}\, \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} | 0 \rangle \underset{E_1}{\sim} \langle b | \hat{\vec{p}} | a \rangle \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}$$

$$\hat{H}_{\text{atoom}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$$

$$\hat{H}_{\text{atoom}} | a \rangle = E_a | a \rangle \qquad \hat{H}_{\text{atoom}} | b \rangle = E_b | b \rangle$$

$$[\hat{p}^2, \hat{\vec{r}}] = -2i\hbar \hat{\vec{p}} \qquad [V(\hat{\vec{r}}), \hat{\vec{r}}] = 0$$

$$\to [\hat{H}_{\text{atoom}}, \hat{\vec{r}}] = \frac{-i\hbar}{m} \hat{\vec{p}}$$

$$\langle b | \hat{\vec{p}} | a \rangle = \frac{im}{\hbar} \langle b | [\hat{H}_{\text{atoom}}, \hat{\vec{r}}] | a \rangle$$

$$= \frac{im}{\hbar}(E_b - E_a) \langle b | \hat{\vec{r}} | a \rangle = \frac{im}{\hbar}(E_b - E_a) \vec{r}_{ba}$$

$$= -im\omega_k \vec{r}_{ba}$$

De totale overgangswaarschijnlijkheid wordt nu

$$\begin{aligned} W_{fi} &= \alpha(n_{\vec{k},\lambda}+1)\tfrac{\omega_k^3}{2\pi c^2}d\Omega_k|\vec{r}_{ba}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|^2 \\ \vec{k} &= |k|(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \\ \vec{\epsilon}_{k,1} &= (\sin\phi, -\cos\phi, 0) \\ \epsilon_{\vec{k},2} &= (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta) \end{aligned}$$

Controleer dat $\vec{k}$ en $\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}$ aan alle eigenschappen voldoen.

$$d\Omega_k = \sin\theta d\theta d\phi = d\cos\theta d\phi$$

Neem nu aan dat de straling isotroop is. Dit houdt in dat $n_{\vec{k},\lambda}$ onafhankelijk is van de richting van $\vec{k}$. Dus kunnen we schrijven $n_{\vec{k},\lambda} = n(\omega_k)$.
We kunnen dan vrij over $d\Omega_k$ integreren

$$\vec{r}_{ba} = (x_{ba}, y_{ba}, z_{ba})$$

De berekening wordt nu zeer eenvoudig.

$$\sum_{i,j}\sum_{\lambda=1,2} r_{ba}^i r_{ba}^j \epsilon_{\vec{k},\lambda}^i \epsilon_{\vec{k},\lambda}^j = |\vec{r}_{ba}|^2 - |\vec{r}_{ba}\hat{\vec{k}}|^2$$

$$\int d\Omega_k\ \hat{k}_i\hat{k}_j = \frac{1}{3}\delta_{ij}\int d\Omega_k = \frac{4\pi}{3}\delta_{ij} \to \sum_{\lambda=1}^{2}\int d\Omega_k|\vec{r}_{ba}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|^2 = \frac{8\pi}{3}|\vec{r}_{ba}|^2$$

$$\sum_{\lambda=1}^{2} W_{fi} = \alpha(n(\omega_k)+1)\frac{\omega_k^3}{2\pi c^2}\{x_{ba}^2(\sin^2\phi$$

$$+\cos^2\theta\cos^2\phi) + y_{ba}^2(\cos^2\phi + \cos^2\theta\sin^2\phi) + z_{ba}^2\sin^2\theta$$

$$-x_{ba}y_{ba}\sin\ 2\phi\sin^2\theta - x_{ba}z_{ba}\cos\phi\sin\ 2\theta - y_{ba}z_{ba}\sin\phi\sin\ 2\theta\}\sin\theta d\theta d\phi$$

$$W_{a\to b} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sum_{\lambda=1}^{2} W_{fi} = \alpha(n(\omega_k)+1)\frac{4}{3}\frac{\omega_k^3}{c^2}|\vec{r}_{ba}|^2$$

Als $n(\omega_k) = 0$, wat inhoudt dat er geen foton in de begintoestand van het proces $a \to b + \gamma(k)$ aanwezig is, dan spreken we van spontane emissie. Dit is een typisch quantumeffect dat klassiek niet verklaard kan worden. Bovenstaande formule geldt ook als de straling niet isotroop is. De term evenredig met $n(\omega_k)$ wordt geïnduceerde emissie genoemd. Deze kan ook m.b.v. de klassieke electrodynamica worden uitgerekend. In het algemeen kan men dus schrijven

$$W_{a\to b}^{\text{emissie}} = W_{a\to b}^{\text{geinduceerd}} + W_{a\to b}^{\text{spontaan}}$$

De levensduur van het atoom a wordt gegeven door

$$\tau_a = 1/\sum_b W_{a\to b}$$

We gaan dit berekenen voor het niet relativistische waterstofatoom.

$$|a\ \rangle\ = |n,l,m\rangle \quad \langle r,\theta,\varphi|n,l,m\rangle = Y_l^{(m)}(\theta,\phi)R_{n,l}(r)$$

$$|\vec{r}_{ba}|^2 = |x_{ba}|^2 + |y_{ba}|^2 + |z_{ba}|^2$$

$$= |-\frac{(x_{ba}+iy_{ba})}{\sqrt{2}}|^2 + |\frac{x_{ba}-iy_{ba})}{\sqrt{2}}|^2 + |z_{ba}|^2$$

De verwachtingswaarden zijn gelijk aan

$$-\frac{(x_{ba}+iy_{ba})}{\sqrt{2}} = \langle b|-\frac{(\hat{x}+i\hat{y})}{\sqrt{2}}|a\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\langle b|Y_1^{(1)}(\theta,\phi)\hat{r}|a\rangle$$

$$\frac{(x_{ba}-iy_{ba})}{\sqrt{2}} = \langle b|\frac{(\hat{x}-i\hat{y})}{\sqrt{2}}|a\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\langle b|Y_1^{(-1)}(\theta,\phi)\hat{r}|a\rangle$$

$$z_{ba} = \langle b|\hat{z}|a\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\langle b|Y_1^{(0)}(\theta,\phi)|\hat{r}|a\rangle$$

Het bovenstaande is gemakkelijk af te leiden uit

$$x = r\sin\theta\cos\phi \quad y = r\sin\theta\sin\phi \quad z = r\cos\theta$$

Vervolgens moeten wij berekenen

$$\langle b|Y_1^{(m)}(\theta,\phi)\hat{r}|a\rangle$$

$$= \int d\Omega\, Y_{l_a}^{(m_a)}(\theta,\phi)Y_1^{(m)}(\theta,\phi)Y_{l_b}^{(m_b)\,*}(\theta,\phi)\int r^3 dr R_{n_a,l_a}(r)R_{n_b,l_b}(r)$$

In de literatuur kan men vinden

$$\int d\Omega\, Y_{l_a}^{(m_a)}Y_l^{(m)}Y_{l_b}^{(m_b)\,*} = \left[\frac{(2l_a+1)(2l+1)}{4\pi(2l_b+1)}\right]^{1/2} C^{l_a\ \ l\ \ l_b}_{m_a\ m\ m_b}\, C^{l_a\ l\ l_b}_{0\ \ 0\ \ 0}$$

Met $m_a + m = m_b$ anders is de bovenstaande integraal gelijk aan nul

De selectieregels voor E_1-straling zijn $(l=1)$

$$C^{l_a\ \ 1\ \ l_b}_{m_a\ m\ m_b} \neq 0 \qquad \text{als} \qquad |l_a-1| \leq l_b \leq |l_a+1|$$

$$\to |l_b - l_a| = 1 \text{ of } 0 \qquad \text{echter niet} \qquad l_b = l_a = 0$$

Dus er is geen $l_a = 0 \rightarrow l_b = 0$ overgang want $C^{0\ 1\ 0}_{0\ m\ 0} = 0$. Echter het feit dat we met een één-electronatoom te maken hebben leidt tot de aanwezigheid van de Clebsch-Gordon-coeffiënt $C^{l_a\ l\ l_b}_{0\ 0\ 0}$ in bovenstaande formule. Deze heeft de eigenschap

$$C^{l_a\ 1\ l_b}_{0\ \ 0\ 0} = 0 \quad \text{als} \quad l_a = l_b$$

Dus voor een één-electron-atoom is alleen $l_b = l_a \pm 1$ mogelijk.

$$|\vec{r}_{ba}|^2 = \frac{4\pi}{3} \sum_{m=-1}^{1} |\langle b|\hat{r}Y_1^{(m)}|a\rangle|^2$$

$$= \frac{2l_a+1}{2l_b+1} |C^{l_a\ 1\ l_b}_{0\ 0\ 0}|^2 \sum_{m=-1}^{1} |C^{l_a\ \ 1\ \ l_b}_{m_a\ m\ m+m_a}|^2 | \int dr r^3 R_{n_a,l_a}(r) R_{n_b,l_b}(r)|^2$$

Nu zijn de Clebsch-Gordon-coefficiënten orthogonaal

$$\frac{2l_a+1}{2l_b+1} \sum_{m=-1}^{1} |C^{l_a\ \ 1\ \ l_b}_{m_a\ m\ m+m_a}|^2 = 1 \qquad \text{onafhankelijk van } m_a$$

$$C^{l_a\ 1\ l_b}_{0\ 0\ 0} = \begin{cases} \sqrt{\frac{l_a+1}{2l_a+1}} & \text{als} \quad l_b = l_a + 1 \\ -\sqrt{\frac{l_a}{2l_a+1}} & \text{als} \quad l_b = l_a - 1 \end{cases}$$

$$W_{a\to b} = \alpha(n(\omega_k)+1)\frac{4}{3}\frac{\omega_k^3}{c^2} \left\{ \begin{array}{c} \frac{l_a+1}{2l_a+1} \\ \frac{l_a}{2l_a+1} \end{array} \right\} | \int_0^\infty dr r^3 R_{n_a,l_a}(r) R_{n_b,l_b}(r)|^2$$

Laten we nu de levensduur van een H-atoom in de 2p-toestand ($l_a = 1, n_a = 2$) berekenen. Dit vervalt onder het uitzenden van een foton naar de 1s-toestand ($l_b = 0, n_b = 1$). Dit houdt in dat $n(\omega_k) = 0$ zodat wij met spontane emissie te maken hebben.

Het resultaat van de berekening is

$$R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \qquad R_{1,0} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c} = 5,29.10^{-11} m \qquad \text{Bohrse straal}$$

$$\int_0^\infty dr\, r^3 R_{2,1} R_{1.0} = \frac{1}{a_0^4}\frac{1}{\sqrt{6}} \int_0^\infty dr\, r^4 e^{-3r/2a_0} = \frac{1}{a_0^4}\frac{1}{\sqrt{6}} 24 \frac{2^5}{3^5} a_0^5 = \frac{a_0^5}{\sqrt{6}} \frac{2^8}{3^4}$$

$$l_b = l_a - 1 \;\rightarrow \qquad W_{a\to b} = \frac{4}{3}\alpha \frac{\omega_k^3}{c^2} \frac{1}{3} \frac{a_0^2}{6} \frac{2^{16}}{3^8} = \alpha \frac{\omega_k^3}{c^2} a_0^2 \frac{2^{17}}{3^{11}}$$

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\alpha^2 m_e c^2 = -\frac{1}{n^2} R_\infty \qquad R_\infty = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2} = \frac{\hbar\alpha c}{2a_0}$$

Met $1eV = 1,6.10^{-19}\ J$ en $R_\infty = 13,6\ eV$ (constante van Rydberg).

$$\omega_k = \frac{E_a - E_b}{\hbar} \qquad E_2 = -\frac{1}{4}R_\infty \qquad E_1 = -R_\infty$$

$$\omega_k = \frac{3}{4\hbar}R_\infty = \frac{3\alpha c}{8a_0}$$

$$W_{a\to b} = \frac{2^8}{3^8}\frac{\alpha^4 c}{a_0} \to \tau_{a\to b} = \frac{1}{W_{a\to b}} = \frac{1}{\alpha^4}\frac{3^8}{2^8}\frac{a_0}{c} = 1,6.10^{-9}s$$

Voordat we naar de hogere orde multipoolstraling kijken willen we nog iets meer over E_1-straling vertellen.

verklaring van de naam <u>dipoolstraling</u>

Het electrisch dipoolmoment is gegeven door $\vec{D} = e\vec{r}$. De energie van het electrisch dipoolmoment is $\mathcal{E}_{\text{dip}} = e\vec{r}\vec{E}$

$$\langle\ b; n_{\vec{k},\lambda}+1|\hat{\mathcal{E}}_{\text{dip}}|a; n_{\vec{k},\lambda}\ \rangle = \langle\ b; n_{\vec{k},\lambda}+1|e\hat{\vec{r}}\vec{E}|a; n_{\vec{k},\lambda}\ \rangle$$

$$= -ie\omega_k\sqrt{\frac{\hbar(n_{\vec{k},\lambda}+1)}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}\ \langle\ b|e^{-i\vec{k}\vec{r}}\hat{\vec{r}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\ \rangle$$

vergelijk dit met de uitdrukking

$$\frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar(n_{\vec{k},\lambda}+1)}{2\omega_k\varepsilon_0 V}}\ \langle\ b|e^{-i\vec{k}\vec{r}}\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\ \rangle$$

die wij eerder afgeleid hebben als $\hat{\vec{p}}$ vervangen wordt door $-im\omega_k\hat{\vec{r}}$

Behalve de selectieregels die uit de Clebsch-Gordon-coefficiënten volgen is er ook nog een pariteits-selectieregel.

Zij $\hat{\Pi}$ de pariteitsoperator, die als volgt op de atomaire toestand werkt dan

$$\hat{\Pi}|n,l,m\rangle = (-1)^l|n,l,m\rangle \qquad\qquad \hat{\Pi}\ |a\rangle = \Pi_a\ |a\rangle$$

Verder geldt dat $\hat{\vec{r}}$ onder pariteit transformeert als volgt

$$\hat{\Pi}^{-1}\hat{\vec{r}}\hat{\Pi} = -\hat{\vec{r}} \qquad \text{en} \qquad \hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi}^{-1} \qquad \Pi \text{ is unitair}$$

Dit betekent dat een vector onder inversie $\hat{\vec{r}} \to -\hat{\vec{r}}$ een negatieve pariteit heeft.

$$\langle b|\hat{\vec{r}}|a\rangle = -\langle b|\hat{\Pi}^{-1}\hat{\vec{r}}\hat{\Pi}|a\rangle = -\langle\hat{\Pi}b|\hat{\vec{r}}|\hat{\Pi}a\rangle = -\Pi_a\Pi_b\langle b|\hat{\vec{r}}|a\rangle$$

Hieruit volgt dat $\Pi_a\Pi_b = -1$. Dus $|a\rangle$ heeft de omgekeerde pariteit van $|b\rangle$. In de literatuur wordt de pariteitsverandering met "Yes" aangegeven. Is er geen pariteitsverandering dan wordt dit aangegeven door "No". Resumerend kunnen wij zeggen.

De selectieregels voor E_1-straling zijn

$$|l_a - l_b| \leq 1 \qquad \text{echter } 0 \to 0 \text{ is verboden}$$

pariteitsverandering : "Yes"

Dit kan men generaliseren tot ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ als de spin van het electron in rekening wordt gebracht. In het bovenstaande wordt dan L door J of l door j vervangen.

Stel dat de symmetrie van de atomaire toestand zodanig is dat E_1-overgangen verboden zijn. In dit geval moeten we hogere orde termen in de reeks $e^{-i\vec{k}\vec{r}} = 1 - i\vec{k}\vec{r} - (\vec{k}\vec{r})^2/2! + \cdots$ meenemen. Echter ook $\mathcal{H}_{\rm int}^{(3)}$ moet in rekening worden gebracht.

We beginnen bij $\mathcal{H}_{\rm int}^{(1)}$.

E_2-benadering. In dit geval wordt de term $-i\vec{k}\vec{r}$ meegenomen.

$$\langle b|e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\rangle \underset{E_2}{\rightarrow} -i\langle b|(\vec{k}\,\hat{\vec{r}})\,(\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})|a\rangle$$

We kunnen deze operator schrijven als

$$(\vec{k}\ \hat{\vec{r}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{p}}) = \frac{1}{2}\left\{(\vec{k}\ \hat{\vec{r}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{p}}) + (\vec{k}\ \hat{\vec{p}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{r}})\right\} + \frac{1}{2}\left\{(\vec{k}\ \hat{\vec{r}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{p}}) - (\vec{k}\ \hat{\vec{p}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{r}})\right\}$$

We beginnen met de eerste term

$$\frac{1}{2}\ \left\{(\vec{k}\ \hat{\vec{r}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{p}}) + (\vec{k}\ \hat{\vec{p}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{r}})\right\} = \frac{1}{2}\ \sum_{i,j} k_i(\hat{x}_i\hat{p}_j + \hat{p}_i\hat{x}_j)\epsilon_j$$

We leiden de volgende relaties af

$$\left[\hat{H}_{\rm atoom}, \hat{x}_i\hat{x}_j\right] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}}), \hat{x}_i\hat{x}_j\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2, \hat{x}_i\hat{x}_j\right]$$

$$= \frac{1}{2m}\ \left\{\left[\hat{p}^2, \hat{x}_i\right]\hat{x}_j + \hat{x}_i\left[\hat{p}^2, \hat{x}_j\right]\right\} = -\frac{i\hbar}{m}\ (\hat{p}_i\hat{x}_j + \hat{x}_i\hat{p}_j)$$

Dus we kunnen schrijven

$$-\frac{i}{2}\sum_{i,j}\ k_i\ \langle b|\hat{x}_i\hat{p}_j + \hat{p}_i\hat{x}_j|a\rangle\epsilon_j = -\frac{i}{2}\sum_{i,j}\ k_i\ \langle b|\frac{im}{\hbar}\ \left[\hat{H}_{\rm atoom}, \hat{x}_i\hat{x}_j\right]\ |a\rangle\epsilon_j$$

$$= \frac{m}{2\hbar}\ (E_b - E_a)\ \sum_{i,j}\ k_i\ \langle b|\hat{x}_i\hat{x}_j|a\rangle\epsilon_j = -\frac{m\omega_k}{2}\ \sum_{i,j}\ k_i\ \langle b|\hat{T}_{ij}|a\rangle\epsilon_j$$

$$\hat{T}_{ij} = \hat{x}_i\hat{x}_j - \frac{1}{3}\ \delta_{ij}\hat{\vec{r}}\hat{\vec{r}} \qquad \hat{\vec{\vec{T}}} \text{ is een irreducibele tensor.}$$

Deze tensor is een operator. Verder is hij van rang 2, spoorloos en symmetrisch. De componenten van deze tensor worden gegeven door $\hat{T}_{ij}$.
De δ_{ij} termen mogen we in het matrix element toevoegen omdat $\vec{\epsilon}\,\vec{k} = 0$.

De tweede term wordt gelijk aan

$$\frac{1}{2}\ \left\{(\vec{k}\ \hat{\vec{r}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{p}}) - (\vec{k}\ \hat{\vec{p}})(\vec{\epsilon}\ \hat{\vec{r}}\right\} = \frac{1}{2}\ \left(\vec{k}\times\vec{\epsilon}\right)\left(\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}\right)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\vec{k} \times \vec{\epsilon}\right) \vec{L} \qquad \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \qquad \text{(impulsmoment-operator)}$$

De bovenstaande relatie is voor klassieke vectoren triviaal te bewijzen. Echter nu zijn $\hat{\vec{r}}$ en $\hat{\vec{p}}$ operatoren, die niet met elkaar commuteren.

Gebruik $(\vec{A} \times \vec{B})_i = \epsilon_{ijk} A_j B_k \qquad i, j, k = 1, 2, 3$

$$\begin{array}{lll} \epsilon_{ijk} = 1 & \text{even permutaties van} & 1,2,3 \\ \epsilon_{ijk} = -1 & \text{oneven permutaties van} & 1,2,3 \end{array}$$

Verder $\epsilon_{ijk}\epsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$.

Als de twee termen opgeteld worden krijgen we

$$-i\langle b|(\vec{k}\hat{\vec{r}})\,(\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\hat{\vec{p}})\,|a\rangle = \langle b| \left(-\frac{m\omega_k}{2} \sum_{i,j} \hat{T}_{ij}\; k^i \epsilon^j_{\vec{k},\lambda} - \frac{i}{2}\,(\vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})\vec{L} \right) |a\rangle$$

Nemen we nu ook nog $\mathcal{H}^{(3)}_{\text{int}}$ (bijdrage spin van het electron) in de benadering $e^{-i\vec{k}\vec{r}} \sim 1$ mee dan

$$I = \langle b; n_{\vec{k},\lambda} + 1| H^{(1)}_{\text{int}} + H^{(3)}_{\text{int}} |a; n_{\vec{k},\lambda}\rangle =$$

$$\frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar(n_{\vec{k},\lambda}+1)}{2\omega_k \varepsilon_0 V}}\; \langle b| \left\{ -\frac{m\omega_k}{2} \sum_{i,j} \hat{T}_{ij}\; k^i \epsilon^j_{\vec{k},\lambda} - \frac{i}{2} \left(\vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\right) \left(\hbar\hat{\vec{\sigma}} + \hat{\vec{L}}\right) \right\} |a\rangle$$

Merk op dat dat het totale impulsmoment gegeven wordt door $\hat{\vec{J}} = \frac{1}{2}\,\hbar\hat{\vec{\sigma}} + \hat{\vec{L}}$ waarbij de spin van het electron gelijk is aan $\hat{\vec{S}} = \hbar\hat{\vec{\sigma}}/2$.

$$|a\rangle = |j, m_j; l, s\rangle \qquad \text{is een eigentoestand van } J^2, J_z, L^2, S^2$$

De eerste term en tweede term van I worden respectievelijk een E_2-overgang (electrische quadrupoolstraling) en een M_1-overgang (magnetische dipoolstraling) genoemd.

$$\begin{array}{llll} E_2 & \leftrightarrow & T_{ij} & \text{tensor van rang 2} \\ E_1 & \leftrightarrow & x_i & \text{tensor van rang 1 (vector)} \\ & & & \\ M_1 & \leftrightarrow & \vec{L} + \hbar\vec{\sigma} & \text{pseudotensor van rang 1 (pseudovector)} \\ & & \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} & \end{array}$$

Laten wij de totale overgangswaarschijnlijkheid van een E_2-overgang berekenen.

$$
\begin{aligned}
\hat{T}_{xx} &= \left\{\sqrt{\tfrac{2\pi}{15}}\ \left(Y_2^{(2)} + Y_2^{(-2)}\right) - \tfrac{1}{6}\ \sqrt{\tfrac{16\pi}{5}}\ Y_2^{(0)}\right\} \hat{r}^2 \\
\hat{T}_{yy} &= \left\{-\sqrt{\tfrac{2\pi}{15}}\ \left(Y_2^{(2)} + Y_2^{(-2)}\right) - \tfrac{1}{6}\ \sqrt{\tfrac{16\pi}{5}}\ Y_2^{(0)}\right\} \hat{r}^2 \\
\hat{T}_{zz} &= \left\{\tfrac{1}{3}\ \sqrt{\tfrac{16\pi}{5}}\ Y_2^{(0)}\right\} \hat{r}^2 \\
\hat{T}_{zy} &= \left\{i\ \sqrt{\tfrac{2\pi}{15}}\ \left(Y_2^{(1)} + Y_2^{(-1)}\right)\right\} \hat{r}^2 \\
\hat{T}_{zx} &= \left\{\sqrt{\tfrac{2\pi}{15}}\ \left(Y_2^{(-1)} - Y_2^{(1)}\right)\right\} \hat{r}^2 \\
\hat{T}_{xy} &= \left\{i\ \sqrt{\tfrac{2\pi}{15}}\ \left(Y_2^{(-2)} - Y_2^{(2)}\right)\right\} \hat{r}^2
\end{aligned}
$$

omgekeerd.

$$
\begin{aligned}
\hat{r}^2 Y_2^{(0)} &= 3\ \sqrt{\tfrac{5}{16\pi}}\ \hat{T}_{zz} \\
\hat{r}^2 Y_2^{(\pm 1)} &= -\sqrt{\tfrac{15}{8\pi}}\ \left(i\hat{T}_{zy} \pm \hat{T}_{zx}\right) \\
\hat{r}^2 Y_2^{(\pm 2)} &= \sqrt{\tfrac{15}{32\pi}}\ \left(\hat{T}_{xx} - \hat{T}_{yy}\right) \pm i\sqrt{\tfrac{15}{8\pi}}\hat{T}_{xy}
\end{aligned}
$$

De totale overgangswaarschijnlijkheid wordt gegeven door

$$
W_{fi} = \alpha\ (n_{\vec{k},\lambda} + 1)\ \frac{\omega_k}{2\pi m^2 c^2}\ \frac{m^2 \omega_k^2}{4}\ d\Omega_k\ \sum_{i,j} |T_{ba}^{ij}|^2\ |k_i \epsilon_j|^2
$$

Gebruik

$$
k_i = \frac{\omega_k}{c}\hat{k}_i \quad \text{en} \quad \int d\Omega_k\ \hat{k}_i \hat{k}_j \hat{k}_l \hat{k}_m = \frac{4\pi}{15}\ (\delta_{ij}\delta_{lm} + \delta_{il}\delta_{jm} + \delta_{im}\delta_{jl})
$$

Wij vinden dan met behulp van

$$
\int d\Omega_k \sum_{i,j,k,l} \sum_{\lambda}\ T_{ba}^{ij} T_{ba}^{lm}\ \hat{k}^i \hat{k}^l\ \epsilon_{\vec{k},\lambda}^{j} \epsilon_{\vec{k},\lambda}^{m} = \frac{4\pi}{5} \sum_{i,j}\ T_{ba}^{ij} T_{ba}^{ij} = \frac{4\pi}{5}\ |T_{ba}|^2
$$

de totale overgangswaarschijnlijkheid

$$
W_{a \to b} = \alpha (n_{\vec{k},\lambda} + 1)\ \frac{\omega_k^3}{8\pi c^2}\ \frac{\omega_k^2}{c^2}\ \frac{4\pi}{5}\ |T_{ba}|^2
$$

waarbij $|T_{ba}|^2$ gegeven wordt door

$$
|T_{ba}|^2 = \frac{8\pi}{15}\ \sum_{m=-2}^{2}\ |\langle b|\hat{r}^2 Y_2^{(m)}|a\rangle|^2 = \frac{2}{3}\ \frac{2l_a + 1}{2l_b + 1}\ \left| C\ \begin{matrix} l_a & 2 & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right|^2
$$

$$
\sum_{m=-2}^{2} \left| C\ \begin{matrix} l_a & 2 & l_b \\ m_a & m & m + m_a \end{matrix} \right|^2\ \left| \int dr\ r^4\ R_{n_a,l_a}(r) R_{n_b,l_b}(r) \right|^2
$$

Uit de orthogonaliteit van de Clebsch-Gordon-coëfficienten volgt

$$\frac{2l_a+1}{2l_b+1}\sum_{m=-2}^{2}\left|C\begin{array}{ccc} l_a & 2 & l_b \\ m_a & m & m+m_a \end{array}\right|^2 = 1$$

Verder kunnen we in de literatuur de volgende waarden voor de Clebsch-Gordon-coëfficient vinden

$$C\begin{array}{ccc} l_a & 2 & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{array} = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{2}\,\frac{(l_a+1)(l_a+2)}{(2l_a+1)(2l_a+3)}} & l_b = l_a+2 \\ -\sqrt{\frac{l_a(l_a+1)}{(2l_a+3)(2l_a-1)}} & l_b = l_a \\ \sqrt{\frac{3}{2}\,\frac{l_a(l_a-1)}{(2l_a+1)(2l_a-1)}} & l_b = l_a-2 \end{cases}$$

De totale overgangswaarschijnlijkheid wordt

$$W_{a\to b} = \alpha(n_{\vec{k},\lambda}+1)\,\frac{\omega_k^5}{15c^4}\left|C\begin{array}{ccc} l_a & 2 & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right|^2 \left|\int dr\; r^4\; R_{n_a,l_a}(r)R_{n_b,l_b}(r)\right|^2$$

$$W_{a\to b}(E_2) \;<<\; W_{a\to b}(E_1) \quad\to\quad \tau_{a\to b}(E_2) \;>>\; \tau_{a\to b}(E_1)$$

<u>selectie regels</u>

E_2-straling $\to C\begin{array}{ccc} l_a & 2 & l_b \\ m_a & m & m_b \end{array} \neq 0$

Dit is waar als aan de voorwaarde $|l_a - l_b| \leq 2$ is voldaan. Echter $l_a = 0 \to l_b = 0$ is verboden.

Voor een één-electronatoom is er het speciale geval: $C\begin{array}{ccc} l_a & 2 & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \neq 0$ als $l_b = l_a \pm 2$ of $l_b = l_a$.

Pariteit-selectieregel: $\hat{x}_i \to -\hat{x}_i$ dan $\hat{T}_{ij} \to \hat{T}_{ij}$. De pariteit van een tensor van rang 2 is plus.

$$\hat{\Pi}^{-1}\,\hat{\vec{\vec{T}}}\,\hat{\Pi} = \hat{\vec{\vec{T}}} \quad \text{substitueer dit laatste in } \langle b|\hat{\vec{\vec{T}}}|a\rangle \quad\to\quad \Pi_a = \Pi_b$$

Toestand a heeft dezelfde pariteit als toestand b. Dus is er geen pariteitsverandering. Dit wordt aangegeven met "No".

Tenslotte iets in het kort over <u>M_1-straling</u>.

$\vec{L} + \hbar\vec{\sigma}$ is een pseudovector zodat analoog aan E_1-straling de overgangs-operator evenredig is met $Y_1^{(m)}$

De selectieregels voor M_1-straling zijn: $|j_a - j_b| \leq 1$ echter $j_a = 0 \to j_b = 0$ verboden

Speciaal geval voor een één-electronatoom: $j_b = j_a \pm 1$

Echter de selectieregel voor de pariteit verschilt van die voor E_1-straling.

$$\left.\begin{array}{ccc} x_i & \to & -x_i \\ p_i & \to & -p_i \end{array}\right\} L_i \to L_i$$

pariteit van een pseudovector is plus
in tegenstelling tot een vector
(die pariteit min heeft)

$$\hat{\Pi}^{-1}\left(\hat{\vec{L}}+\hbar\hat{\vec{\sigma}}\right)\hat{\Pi}=\hat{\vec{L}}+\hbar\vec{\sigma}\rightarrow\Pi_a\Pi_b=1$$

Dus toestand a heeft dezelfde pariteit als toestand b. Dus geen pariteits verandering wat wordt aangegeven met "No".

De berekening van de waarschijnlijkheid voor M_1-straling is analoog aan die uitgevoerd voor E_1-straling (zie Messiah opgave 12, hfst. XXI).

$$W_{a\rightarrow b}=\alpha\left(n_{\vec{k},\lambda}+1\right)\ \frac{4}{3}\ \frac{\omega_k^3}{c^2}\ |\langle b|\vec{L}+\hbar\vec{\sigma}|a\rangle|^2$$

$$W_{a\rightarrow b}\ (M_1)\ <<W_{a\rightarrow b}\ (E_1)\ \rightarrow\ \tau_{a\rightarrow b}\ (M_1)>>\tau_{a\rightarrow b}(E_1)$$

C Afleiding Planckse stralingswet

Neem aan dat atomen met een stralingsveld energie uitwisselen via het reversibele process

$$a\rightleftarrows\gamma+b$$

op een zodanig wijze dat er een thermisch evenwicht bestaat.
Het aantal atomen in toestand a en b is respectievelijk N_a. en N_b.

Evenwichtsvoorwaarde: $N_bW_{abs}=N_aW_{emis}$

$$\frac{N_b}{N_a}=\frac{e^{-\frac{E_b}{\mathbf{k}T}}}{e^{-\frac{E_a}{\mathbf{k}T}}}=e^{\hbar\omega/\mathbf{k}T}$$

$$\hbar\omega=E_a-E_b$$

$$W_{abs}\ :b+\gamma\rightarrow a\qquad W_{emis}\ :a\rightarrow b+\gamma$$

$$\frac{W_{emis}}{W_{abs}}=\frac{(n_{\vec{k},\lambda}+1)\ \sum\limits_{l=1}^{N_a}\ |\langle b|e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}_l}\hat{\vec{p}}_l\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\rangle|^2}{n_{\vec{k},\lambda}\quad\sum\limits_{l=1}^{N_b}\ |\langle a|e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}_l}\hat{\vec{p}}_l\vec{\epsilon}_{k,\lambda}|b\rangle|^2}$$

Vervang in de teller

$$\langle b|e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}_l}\hat{\vec{p}}_l\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\rangle=\langle a|\hat{\vec{p}}_l\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}_l}|b\rangle^*=\langle a|e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}_l}\hat{\vec{p}}_l\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|b\rangle^*$$

In de bovenstaande afleiding hebben wij de volgende relatie gebruikt

$$e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}}=\hat{\vec{p}}+i\sum_{m=1}^{3}k_m[\hat{x}_m,\hat{\vec{p}}]+0=\hat{\vec{p}}-\hbar\vec{k}\hat{1}$$

$$e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}e^{-i\vec{k}\hat{\vec{r}}}=\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}$$

Het laatste is waar vanwege de transversaliteitsconditie $\vec{k}\vec{\epsilon}_{k,\lambda} = 0$. De verhouding van de overgangswaarschijnlijkheden wordt

$$\frac{W_{emis}}{W_{abs}} = \frac{n_{\vec{k},\lambda} + 1}{n_{\vec{k},\lambda}} = \frac{N_b}{N_a} = e^{\hbar\omega/\mathbf{k}T}$$

$$\rightarrow \; n_{\vec{k},\lambda} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/\mathbf{k}T} - 1} \qquad \text{met} \qquad \hbar\omega = E_a - E_b$$

Veronderstel dat het stralingsveld is ingesloten door zwarte wanden, die bestaan uit atomen die fotonen met willekeurige energie kunnen uitzenden of absorberen.
De energie van het stralingsveld per volume V in het frequentie interval $(\omega, \omega + d\omega)$ is gelijk aan

$$\mathcal{E}(\omega)d\omega = \; 2 \; \frac{1}{V} \; \left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/\mathbf{k}T} - 1}\right) \; \frac{V\omega^2}{(2\pi c)^3} \; d\omega \int d\Omega_k$$

$$= \frac{8\pi\hbar}{c^3} \; \left(\frac{\omega}{2\pi}\right)^3 \; \frac{1}{e^{\hbar\omega/\mathbf{k}T} - 1} \; d\omega \qquad \omega = 2\pi\nu$$

De stralingswet van Planck luidt nu

$$\mathcal{E}(\nu) = \mathcal{E}(\omega) \; \frac{d\omega}{d\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \; \frac{1}{e^{h\nu/\mathbf{k}T} - 1}$$

D) Rayleigh-verstrooiing, Thomson-verstrooiing, Raman-effect

Beschouw de verstrooiing van een foton γ aan een elektron e die gebonden is in een atoom.

$$\gamma(\vec{k}, \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}) + e_a \rightarrow \gamma(\vec{k}', \vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}) + e_b$$

Hierbij zijn e_a en e_b de electronen die zich respectievelijk bevinden in een atoom in toestand a en toestand b.

De verstrooiingsamplitude wordt gegeven door de Lippman-Schwinger-vergelijking.

$$\langle f|\hat{T}|i\rangle = \langle f|\hat{V}|i\rangle + \sum_n \frac{\langle f|\hat{V}|n\rangle\langle n|\hat{V}|i\rangle}{E_i - E_n + i\epsilon}$$

$$\hat{V} = \hat{H}^{(1)}_{\text{int}} + \hat{H}^{(2)}_{\text{int}}$$

We verwaarlozen de spin van het electron dus de term $\hat{H}^{(3)}_{\text{int}}$ is niet aanwezig. Merk op dat $\hat{H}^{(1)}_{\text{int}}$ slechts een foton kan vernietigen of slechts een foton kan produceren.
In bovenstaand proces moet zowel een foton vernietigd worden nl. $\gamma(\vec{k}, \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})$ alswel een foton geproduceerd worden nl. $\gamma(\vec{k}', \vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})$. Verder kan $\hat{H}^{(2)}_{\text{int}}$ tegelijkertijd een foton vernietigen en een foton produceren.

$$\hat{H}^{(1)}_{\text{int}} \sim e \qquad\qquad \hat{H}^{(2)}_{\text{int}} \sim e^2$$

Tot op orde e^2 kan de verstrooiingsamplitude geschreven worden als

$$T_{fi} = \langle f|\hat{T}|i\rangle = \langle b; 1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{T}|a; 1_{\vec{k},\lambda}\rangle$$

$$= \langle b; 1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(2)}_{\text{int}}|a; 1_{\vec{k},\lambda}\rangle$$

$$+\frac{1}{n!}\sum_{I,\vec{k}_n,\lambda_n}\frac{\langle b; 1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(1)}_{\text{int}}|I; n_{\vec{k}_n,\lambda_n}\rangle\langle I; n_{\vec{k}_n,\lambda_n}|\hat{H}^{(1)}_{\text{int}}|a; 1_{\vec{k},\lambda}\rangle}{E_a + \hbar\omega_k - E_I - n_{\vec{k}_n,\lambda_n}\hbar\omega_{k_n} + i\epsilon}$$

De eerste term wordt als volgt uitgerekend

$$\langle b; 1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(2)}_{\text{int}}|a; 1_{\vec{k},\lambda}\rangle = \frac{e^2}{2m}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k}_1,\lambda_1}\sum_{\vec{k}_2,\lambda_2}\vec{\epsilon}_{\vec{k}_1,\lambda_1}\ \vec{\epsilon}_{\vec{k}_2,\lambda_2}\frac{1}{\sqrt{\omega_{k_1}\omega_{k_2}}}$$

$$\langle b; 1_{\vec{k}',\lambda'}|\left(a_{\vec{k}_1,\lambda_1}a^\dagger_{\vec{k}_2,\lambda_2}e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\hat{\vec{r}}} + a^\dagger_{\vec{k}_1,\lambda_1}a_{\vec{k}_2,\lambda_2}e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\hat{\vec{r}}}\right)|a; 1_{\vec{k},\lambda}\rangle$$

De producten van de creatie- en annihilatie-operatoren geven de volgende bijdragen

$$\langle 1_{\vec{k}',\lambda'}|a_{\vec{k}_1,\lambda_1}a^\dagger_{\vec{k}_2,\lambda_2}|1_{\vec{k},\lambda}\rangle = \langle 1_{\vec{k}',\lambda'}|\left(\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\delta_{\lambda_1\lambda_2} + a^\dagger_{\vec{k}_2,\lambda_2}a_{\vec{k}_1,\lambda_1}\right)|1_{\vec{k},\lambda}\rangle$$

$$= \delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\vec{k}'\vec{k}}\delta_{\lambda\lambda'} + \delta_{\vec{k}'\vec{k}_2}\delta_{\lambda'\lambda_2}\delta_{\vec{k}_1\vec{k}}\delta_{\lambda_1\lambda}$$

$$\langle 1_{\vec{k}',\lambda'}|a^\dagger_{\vec{k}_1,\lambda_1}a_{\vec{k}_2,\lambda_2}|1_{\vec{k},\lambda}\rangle = \delta_{\vec{k}_1\vec{k}'}\delta_{\lambda_1\lambda'}\delta_{\vec{k}_2\vec{k}}\delta_{\lambda_2\lambda}$$

zodat de eerste term gelijk is aan

$$\langle b; 1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(2)}_{\text{int}}|a; 1_{\vec{k},\lambda}\rangle = \frac{e^2}{2m}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\langle b|\left\{\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\sum_{\vec{k}_1,\lambda_1}\frac{1}{\omega_{k_1}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}_1\lambda_1}\vec{\epsilon}_{\vec{k}_1,\lambda_1}\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\hat{\vec{r}}} + \frac{1}{\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\ e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\hat{\vec{r}}}\right\}|a\rangle$$

$$= \frac{e^2}{2m}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\left\{\sum_{\vec{k}_1,\lambda_1}\frac{1}{\omega_{k_1}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}_1,\lambda_1}\vec{\epsilon}_{\vec{k}_1,\lambda_1}\right\}\langle b|a\rangle$$

$$+\frac{e^2}{2m}\frac{\hbar}{\varepsilon_0 V}\frac{1}{\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}\langle b|\ e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\hat{\vec{r}}}|a\rangle$$

1e deel (geen verstrooiing) 2e deel (verstrooiing)

Nu berekenen wij de tweede term. Deze luidt

$$\frac{1}{n!}\sum_{I,\vec{k}_n,\lambda_n}\frac{\langle b;1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(1)}_{\mathrm{int}}|I;n_{\vec{k}_n,\lambda_n}\rangle\ \langle I;n_{\vec{k}_n,\lambda_n}|\hat{H}^{(1)}_{\mathrm{int}}|a;1_{\vec{k},\lambda}\rangle}{E_a+\hbar\omega_k-E_I-n_{\vec{k}_n,\lambda_n}\hbar\omega_{k_n}+i\epsilon}$$

Er zijn nu weer twee mogelijkheden

a $|n_{\vec{k}_n,\lambda_n}\rangle = |0_{\vec{k}_n,\lambda_n}\rangle$

$$\sum_I\frac{\langle b;1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(1)}_{\mathrm{int}}|I;0_{\vec{k}_n,\lambda_n}\rangle\ \langle I;0_{\vec{k}_n,\lambda_n}|\hat{H}^{(1)}_{\mathrm{int}}|a;1_{\vec{k},\lambda}\rangle}{E_a+\hbar\omega_k-E_I+i\epsilon}$$

$$=\sum_I\frac{e^2}{m^2}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\frac{1}{\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}}\left\{\frac{\langle b|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}e^{-i\vec{k}'\hat{\vec{r}}}|I\rangle\ \langle I|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}|a\rangle}{E_a+\hbar\omega_k-E_I+i\epsilon}\right\}$$

b $|n_{\vec{k}_n,\lambda_n}\rangle = |1_{\vec{k}_1,\lambda_1},1_{\vec{k}_2,\lambda_2}\rangle$

$$\frac{1}{2!}\sum_I\frac{\langle b;1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(1)}_{\mathrm{int}}|I;1_{\vec{k}_1,\lambda_1},1_{\vec{k}_2,\lambda_2}\rangle\ \langle I;1_{\vec{k}_1,\lambda_1},1_{\vec{k}_2,\lambda_2}|\hat{H}^{(1)}_{\mathrm{int}}|a;1_{\vec{k},\lambda}\rangle}{E_a+\hbar\omega_k-E_I-\hbar\omega_{k_1}-\hbar\omega_{k_2}+i\epsilon}$$

nu is

$$\langle b;1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(1)}_{\mathrm{int}}|I;1_{\vec{k}_1,\lambda_1},1_{\vec{k}_2,\lambda_2}\rangle$$

$$=\frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}}\sum_{\vec{k}'',\lambda''}\frac{1}{\sqrt{\omega_{k''}}}\langle b;1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}'',\lambda''}\,a_{\vec{k}'',\lambda''}e^{i\vec{k}''\hat{\vec{r}}}|I;1_{\vec{k}_1\lambda_1},1_{\vec{k}_2,\lambda_2}\rangle$$

$$=\frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}}\sum_{\vec{k}'',\lambda''}\frac{1}{\sqrt{\omega_{k''}}}\langle b|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}'',\lambda''}\,e^{i\vec{k}''\hat{\vec{r}}}|I\rangle\left(\delta_{\vec{k}''\vec{k}_1}\delta_{\lambda''\lambda_1}\delta_{\vec{k}'\vec{k}_2}\delta_{\lambda'\lambda_2}+\delta_{\vec{k}''\vec{k}_2}\delta_{\lambda''\lambda_2}\delta_{\vec{k}'\vec{k}_1}\delta_{\lambda'\lambda_1}\right)$$

$$=\frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}}\left\{\frac{1}{\sqrt{\omega_{k_1}}}\langle b|e^{i\vec{k}_1\hat{\vec{r}}}\,\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}_1,\lambda_1}|I\rangle\delta_{\vec{k}'\vec{k}_2}\delta_{\lambda'\lambda_2}+\frac{1}{\sqrt{\omega_{k_2}}}\langle b|e^{i\vec{k}_2\hat{\vec{r}}}\,\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}_2,\lambda_2}|I\rangle\delta_{\vec{k}'\vec{k}_1}\delta_{\lambda'\lambda_1}\right\}$$

idem voor $\langle I;1_{\vec{k}_1,\lambda_1},1_{\vec{k}_2,\lambda_2}|\hat{H}^{(1)}_{\mathrm{int}}|a;1_{\vec{k},\lambda}\rangle$. Dit laatste wordt verkregen via complexe conjungatie van de bovenstaande uitdrukking

Het eindresultaat van de tweede term is

$$\frac{1}{2!}\sum_I \frac{\langle b; 1_{\vec{k}',\lambda'}|\hat{H}^{(1)}_{\text{int}}|I; 1_{\vec{k}_1,\lambda_1}, 1_{\vec{k}_2,\lambda_2}\rangle \ \langle I; 1_{\vec{k}_1,\lambda_1}, 1_{\vec{k}_2,\lambda_2}|\hat{H}^{(1)}_{\text{int}}|a; 1_{\vec{k},\lambda}\rangle}{E_a + \hbar\omega_k - E_I - \hbar\omega_{k_1} - \hbar\omega_{k_2} + i\epsilon}$$

$$= \sum_I \frac{e^2}{m^2}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\left[\frac{1}{\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}}\frac{\langle b|e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|I\rangle \ \langle I|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}e^{-i\vec{k}'\hat{\vec{r}}}|a\rangle}{E_a - E_I - \hbar\omega_{k'} + i\epsilon}\right.$$

$$\left.+\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}\sum_{\vec{k}_1,\lambda_1}\frac{1}{\omega_{k_1}}\frac{\langle b|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}_1,\lambda_1}|I\rangle \ \langle I|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}_1,\lambda_1}|a\rangle}{E_b - E_I - \hbar\omega_{k_1} + i\epsilon}\right]$$

We hebben in bovenstaande uitdrukking gebruik gemaakt van energiebehoud.

$$E_a + \hbar\omega_k = E_b + \hbar\omega_{k'}$$

1e deel (verstrooiing) 2e deel (geen verstrooiing)

Als de impuls en polarisatie van het inkomende foton verschilt van die van het uitgaande foton dan verdwijnen de bijdragen die geen verstrooiing beschrijven (zelf-energiebijdragen).

In het laatste geval wordt de verstrooiingsamplitude gelijk aan.

$$T_{fi} = \frac{e^2\hbar}{2m\varepsilon_0 V}\frac{1}{\sqrt{\omega_k\omega_{k'}}}\left[\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda'}\langle b|e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\hat{\vec{r}}}|a\rangle\right.$$

$$+\frac{1}{m}\sum_I\left\{\frac{\langle b|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}e^{-i\vec{k}'\hat{\vec{r}}}|I\rangle\langle I|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}|a\rangle}{E_a + \hbar\omega_k - E_I + i\epsilon}\right.$$

$$\left.\left.\frac{\langle b|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}|I\rangle \ \langle I|\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}e^{-i\vec{k}'\hat{\vec{r}}}|a\rangle}{E_a - \hbar\omega_{k'} - E_I + i\epsilon}\right\}\right]$$

In diagrammatische taal ziet de bovenstaande verstrooiingsamplitude eruit als (Feynman-diagrammen)

We gaan nu in de dipoolbenadering de werkzame doorsnede voor foton-electron-verstrooiing afleiden.

$$d\sigma(i \to f) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{\rho_E}{v\rho_i}|T_{fi}|^2 \qquad \text{zie de definitie in hfst. VII}$$

$$\rho_E dE_f = dN_f = \frac{d^3\vec{k}_f}{(2\pi)^3\rho_f} = \frac{V d^3\vec{k}'}{(2\pi)^3} \qquad k' = \frac{\omega_{k'}}{c}$$

$$\rho_E \hbar d\omega_{k'} = \frac{V\omega_k'^2 d\omega_{k'} d\Omega_{k'}}{(2\pi c)^3} \;\to\; \rho_E = \frac{V\omega_{k'}^2}{\hbar(2\pi c)^3} d\Omega_{k'}$$

$$v = c \quad \rho_i = \frac{1}{V}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \frac{\omega_{k'}^2 V^2}{4\pi^2\hbar^2 c^4} \;\; |T_{fi}|^2$$

In de dipoolbenadering van $|T_{fi}|^2$ wordt $e^{i\vec{k}\vec{r}} \sim 1$ en $e^{-i\vec{k}'\vec{r}} \sim 1$. In deze benadering wordt de werkzame doorsnede gegeven door de Kramers-Heisenberg-formule, die luidt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \frac{\omega_{k'}}{\omega_k} r_0^2 \left| \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}\langle b|a\rangle \right.$$

$$\left. +\frac{1}{m}\sum_I \left\{ \frac{\langle b|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|I\rangle \; \langle I|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|a\rangle}{E_a + \hbar\omega_k - E_I + i\epsilon} \;+\; \frac{\langle b|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|I\rangle \; \langle I|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|a\rangle}{E_a - \hbar\omega_{k'} - E_I + i\epsilon} \right\} \right|^2$$

Waarbij de klassieke straal van het electron gedefinieerd is door

$$r_0 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mc^2} = \alpha\frac{\hbar}{mc}$$

Bijzondere gevallen

1. Rayleigh-verstrooiing

Dit is elastische verstrooiing : $a = b$ en $\hbar\omega_k = \hbar\omega_{k'}$.

$$\langle b|\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|a\rangle \;=\; \sum_{i,j} \langle b|\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}{}^i\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}{}^j\delta_{ij}|a\rangle$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\hat{1}\delta_{ij}$$

$$\langle b|\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|a\rangle \;=\; \frac{1}{i\hbar}\langle b|\left\{(\hat{\vec{r}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})(\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}) - (\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})(\hat{\vec{r}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})\right\}|a\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\sum_I \left\{\langle b|\hat{\vec{r}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|I\rangle \; \langle I|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|a\rangle \;-\; \langle b|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|I\rangle \; \langle I|\hat{\vec{r}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|a\rangle\right\}$$

$$\begin{aligned}\langle I|\hat{\vec{p}}|a\rangle &= im\omega_{Ia}\langle I|\hat{\vec{r}}|a\rangle \\ \langle b|\hat{\vec{p}}|I\rangle &= im\omega_{bI}\langle b|\hat{\vec{r}}|I\rangle\end{aligned}$$

$$\omega_{Ia} = \frac{(E_I - E_a)}{\hbar} \qquad \omega_{bI} = \frac{(E_b - E_I)}{\hbar}$$

Neem nu $a = b$ en $\omega_{k'} = \omega_k = \omega$. De matrixelementen worden

$$\langle a|\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|a\rangle = \frac{2}{m\hbar}\sum_I \frac{1}{\omega_{Ia}}\langle a|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|I\rangle\ \langle I|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|a\rangle$$

Dit is ook waar als $\lambda \leftrightarrow \lambda'$ en $k \leftrightarrow k'$. Substitueer dit in de Kramers-Heisenberg-formule $\omega_k = \omega_{k'}$ en $a = b$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \frac{r_0^2}{m^2\hbar^2}\left|\sum_I \frac{1}{\omega_{Ia}}\left\{(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{Ia} + (\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{Ia}\right\}\right.$$

$$\left. -\left\{\frac{(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{Ia}}{\omega_{Ia}-\omega} + \frac{(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{k',\lambda'})_{Ia}}{\omega_{Ia}+\omega}\right\}\right|^2$$

$$= \frac{r_0^2}{m^2\hbar^2}\left|\sum_I\left\{\frac{\omega(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{Ia}}{\omega_{Ia}(\omega_{Ia}-\omega)} - \frac{\omega(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{Ia}}{\omega_{Ia}(\omega_{Ia}+\omega)}\right\}\right|^2$$

met de definitie

$$(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{aI} = \langle a|\hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}|I\rangle$$

Neem aan dat de golflengte van het verstrooide licht zeer groot is hetgeen impliceert dat $\omega \ll \omega_{Ia}$. Hier zijn $\hbar\omega$ en $\hbar\omega_{Ia}$ respectievelijk de energie van het verstrooide licht en de atomaire bindingsenergie.

Voor atomen in kleurloze gassen ligt ω_{Ia} in het ultraviolette gebied. De benadering $\omega \ll \omega_{Ia}$ is dus goed voor ω in het optische gebied (zichtbare licht)

$$\frac{1}{\omega_{Ia}\pm\omega} = \frac{1}{\omega_{Ia}}\frac{1}{1\pm\frac{\omega}{\omega_{Ia}}} \sim \frac{1}{\omega_{Ia}}(1\mp\frac{\omega}{\omega_{Ia}})$$

Uit de bovenstaande benadering volgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \frac{r_0^2}{m^2\hbar^2}\,\omega^2\left|\sum_I \frac{1}{\omega_{Ia}^2}\left\{(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{Ia} - (\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{Ia}\right\}\right.$$

$$\left.+\sum_I \frac{\omega}{\omega_{Ia}^3}\left\{(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{Ia} + (\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{Ia}\right\} + \cdots\right|^2$$

Nu is de term die tussen het eerste paar accouladen voorkomt gelijk aan nul.

$$\sum_I(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{Ia} - (\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{aI}(\vec{p}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{Ia}$$

$$= \quad \langle\ a| \ \ [\ \hat{\vec{p}}\ \vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}\ ,\ \hat{\vec{p}}\ \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\ ]\ \ |a\ \rangle = 0$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \left(\frac{r_0}{m\hbar}\right)^2 \omega^4 \left|\sum_I \left(\frac{1}{\omega_{Ia}}\right)^3 \left\{(\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{aI}(\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{Ia} + (\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{aI}(\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{Ia}\right\}\right|^2$$

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda} \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} \sim \frac{1}{\lambda^4}$$

De werkzame doorsnede bij grote golflengtes gedraagt zich als de inverse van de vierde macht van de golflengte (wet van Rayleigh).

2.Thomson-verstrooiing

Laten we nu het tegenovergestelde geval bestuderen waarbij de energie van het inkomend foton $\hbar\omega_k$ veel en veel groter is dan de atomaire bindingsenergie $\hbar\omega_{Ia}$. We mogen dan de tweede en derde term in de Kramers-Heisenberg-formule verwaarlozen. In dit geval hebben we

$$a = b \ \text{ en } \ \hbar\omega_k = \hbar\omega_{k'} = \hbar\omega \ \text{ de verstrooiing is elastisch}$$

en

$$1 >> \frac{1}{m\hbar\omega}\sum_I (\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{bI}(\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{Ia}$$

$$1 >> \frac{1}{m\hbar\omega}\sum_I (\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})_{bI}(\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'})_{Ia}$$

Dus alleen de eerste term gegeven door

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'} \quad \langle\ b|a\ \rangle$$

draagt bij.

de Thomson werkzame doorsnede wordt gegeven door

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = r_0^2|\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\vec{\epsilon}_{\vec{k}',\lambda'}|$$

Laten we voor een bepaalde keuze voor de impulsen en polarisaties van het inkomende en uitgaande foton de werkzame doorsnede uitrekenen.

Neem voor de impuls en polarisaties van het inkomende foton

$$\vec{k} = \frac{\omega}{c}\ (0,0,1) \quad \vec{\epsilon}_{\vec{k},1} = (1,0,0) \quad \vec{\epsilon}_{\vec{k},2} = (0,1,0)$$

en voor de impuls en polarisaties van het uitgaande foton.

$$\vec{k}' = \frac{\omega}{c}\ (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k}',1} = (\sin\phi, -\cos\phi, 0) \qquad \vec{\epsilon}_{\vec{k}',2} = (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta)$$

Als het inkomende foton de polarisatie $\lambda = 1$ heeft dan

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} &= r_0^2 \; \sin^2\phi & \lambda' = 1 \\
\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} &= r_0^2 \; \cos^2\phi \cos^2\theta & \lambda' = 2
\end{aligned}$$

Als het inkomende foton de polarisatie $\lambda = 2$ heeft dan

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} &= r_0^2 \; \cos^2\phi & \lambda' = 1 \\
\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} &= r_0^2 \; \sin^2\phi \cos^2\theta & \lambda' = 2
\end{aligned}$$

Als de inkomende fotonen ongepolariseerd zijn ($\epsilon_{\vec{k},\lambda}$ ligt hier in het $x - y$ vlak voor $\lambda = 1$ en $\lambda = 2$) dan

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}}\right)_{unpol} \underset{D}{=} \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^{2} \frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \begin{cases} \frac{1}{2}\; r_0^2 & \lambda' = 1 \\ \\ \frac{1}{2}\; r_0^2 \cos^2\theta & \lambda' = 2 \end{cases}$$

In het bovenstaande hebben we de werkzame doorsnedes voor $\lambda = 1$ en $\lambda = 2$ opgeteld en gedeeld door het aantal polarisaties, die een foton bezit (hier twee). In dit geval is het inkomende foton ongepolariseerd. Het gevolg is dat zelfs als de inkomende fotonen ongepolariseerd zijn het uitgaande foton nog steeds gepolariseerd is zolang $\theta \neq 0$ $\theta \neq \pi$.

Het uitgaande foton is compleet gepolariseerd als $\theta = \pi/2$. In dit laatste geval nemen de inkomende impuls en de impuls en polarisatie van het uitgaande foton de volgende waarden aan

$$\left.\begin{aligned}
\vec{k} &= (0,0,1) \\
\vec{k}\,' &= \tfrac{\omega}{c}\,(\cos\phi, \sin\phi, 0) \\
\epsilon_{\vec{k}',1} &= (\sin\phi, -\cos\phi, 0) \\
\epsilon_{\vec{k}',2} &= (0,0,-1)
\end{aligned}\right\} \epsilon_{\vec{k}',1} \perp \vec{k}, \vec{k}\,'$$

<u>Conclusie</u>: een volledige ongepolariseerde lichtstraal, die verstrooid wordt over $\theta = \pi/2$, produceert een 100% lineair gepolariseerde lichtstraal waarvan de polarisatievektor loodrecht op het vlak, opgespannen door $\vec{k}$ en $\vec{k}'$, staat.

Als het inkomende foton gepolariseerd is maar de polarisatie van het foton in de eindtoestand wordt niet waargenomen dan moeten we over alle polarisaties in de eindtoestand sommeren.

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}}\right|_{pol} = \sum_{\lambda'=1}^{2} \frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \begin{cases} r_0^2(\sin^2\phi + \cos^2\phi\ \cos^2\theta) & \lambda = 1 \\ \\ r_0^2(\cos^2\phi + \sin^2\phi\ \cos^2\theta) & \lambda = 2 \end{cases}$$

Als het inkomende foton niet gepolariseerd is en de eindpolarisatie wordt niet gemeten dan is het resultaat gelijk aan

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}}\right|_{unpol} = \frac{1}{2}\sum_{\lambda'=1}^{2}\sum_{\lambda=1}^{2} \frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \frac{1}{2}\ r_0^2(1+\cos^2\theta)$$

De totale werkzame doorsnede wordt nu

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{2}\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{\lambda'=1}^{2}\int \frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}}\, d\Omega_{k'} = \frac{8\pi}{3}\ r_0^2 = 6,65.10^{-29}\mathrm{m}^2$$

Als ω te groot wordt dan gaat de niet relativistische benadering van het electron $v_e << c$ niet meer op. Is het electron relativistisch dan wordt het proces $\gamma + e \rightarrow \gamma' + e'$ Compton-verstrooiing genoemd.

3. Raman-effect

De Kramers-Heisenberg-formule kan ook worden toegepast voor inelastische processen waarbij $\omega_k \neq \omega_{k'}$ en $a \neq b$.
In de atoom fysica wordt dit het Raman-effect genoemd.

Raman nam een verschuiving in de frequentie waar als licht aan vloeibare oplossingen werd verstrooid.

$$\hbar\omega_k + E_a = \hbar\omega_{k'} + E_b$$

a is de grondtoestand en b is de aangeslagen toestand van het atoom.

Het uitgaande foton heeft een lagere frequentie dan het inkomende foton.
$E_a < E_b$ $\omega_{k'} < \omega_k$. Men ziet dan de Stokes-lijn.

a is de grondtoestand en b is de aangeslagen toestand van het atoom.

Het uitgaande foton heeft een hogere frequentie dan het inkomende foton.
$E_a > E_b \qquad \omega_{k'} > \omega_k \qquad$. Men ziet dan de anti-Stokes-lijn.

E foto-electrisch effect

Dit wordt beschreven door het proces $\gamma + a \to b + e$

Hierbij absorbeert een atoom die zich in de toestand a bevindt een foton en vervalt, onder uitzending van een electron, in een toestand b waarvoor geldt $E_a > E_b$.

Laten wij het voorbeeld nemen dat het atoom in de de s-toestand $(n_a = 1, l_a = 0)$ zit.
Neem aan dat de energie van het inkomende foton zo groot is dat het electron in de eintoestand van het proces vrij is zodat de golffunctie van het uitgezonden electron kan worden benaderd door een vlakke golf. Neem ook aan dat het inkomende foton gepolariseerd is.

$$\vec{p} = p(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$

$$\vec{k} = (0, 0, k)$$

$$\epsilon_{k,1} = (1, 0, 0)$$

Hier zijn $\vec{k}$ en $\vec{p}$ respectievelijk de impulsen van het inkomende foton en het uitgaande electron. Het matrixelement, dat het foto-electrisch effect beschrijft, wordt gegeven door

$$\langle b, n_{\vec{k},\lambda} - 1 | \hat{H}^{(1)}_{\text{int}} | a, n_{\vec{k},\lambda}\rangle = \frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar n_{\vec{k},\lambda}}{2\omega_k \varepsilon_0 V}}\ \langle b | e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\,\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} | a\rangle$$

met $n_{\vec{k},\lambda} = 1$ voor $\lambda = 1$

De totale overgangswaarschijnlijkheid wordt gegeven door

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\ \frac{e^2}{m^2}\ \frac{\hbar}{2\omega_k\varepsilon_0 V}\ \left|\langle b | e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},1} | a\rangle\right|^2 \delta(E_e + E_b - E_a - \hbar\omega_k)\ \frac{V\ p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}\ d\Omega_p$$

We moeten nu de volgende verwachtingswaarde berekenen

$$\langle b | e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\hat{\vec{p}}\,\vec{\epsilon}_{\vec{k},1} | a\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3\vec{r}\ e^{\frac{-i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}\ e^{i\vec{k}\vec{r}}\vec{p}\,\vec{\epsilon}_{k,1}\ \psi_{100}(r)$$

De golffunctie van het atoom in de s-toestand wordt gegeven door

$$\psi_{1,0,0} = Y_0^{(0)}\ R_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\ \frac{2}{a_0^{3/2}}\ e^{-r/a_0}$$

Waarbij a_0 de Bohrse straal is.

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$$

We moeten nu de volgende integraal uitrekenen

$$\int d^3\vec{r}\ e^{-r/a_0}\ e^{i\left(\vec{k}-\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)\vec{r}} = 4\pi \int_0^\infty dr\ r\ e^{-r/a_0}\ \frac{\sin|\vec{k}-\frac{\vec{p}}{\hbar}|r}{|\vec{k}-\frac{\vec{p}}{\hbar}|}$$

$$= \frac{4\pi}{q}\ \int_0^\infty dr\ r\ e^{-r/a_0}\sin qr$$

met

$$q = |\vec{q}| = |\vec{k} - \frac{\vec{p}}{\hbar}| \qquad r = |\vec{r}|$$

De bovenstaande integraal rekenen wij uit

$$\int_0^\infty dr\ r\ e^{-r/a_0 + iqr} = \int_0^\infty dr\ r\ e^{-(\frac{1}{a_0} - iq)r}$$

$$= -r\ \frac{e^{-(\frac{1}{a_0}-iq)r}}{\frac{1}{a_0} - iq}\ |_0^\infty + \int_0^\infty dr\ \frac{1}{\frac{1}{a_0} - iq}\ e^{-(\frac{1}{a_0}-iq)r}$$

$$= \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} - iq\right)^2}$$

$$\Rightarrow \ \int dr\ r\ e^{-r/a_0}\ \sin(qr) = \frac{1}{2i}\ \left\{ \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} - iq\right)^2} - \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} + iq\right)^2} \right\}$$

$$= \frac{2q/a_0}{(1/a_0^2 + q^2)^2}\ \Rightarrow\ \langle b | e^{i\vec{k}\hat{\vec{r}}}\ \hat{\vec{p}}\vec{\epsilon}_{\vec{k},1} | a \rangle = 8\sqrt{\frac{\pi}{V}}\ \frac{(\vec{p}\ \vec{\epsilon}_{\vec{k},1})}{a_0^{5/2}}\ \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0^2} + q^2\right)^2}$$

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{p}/\hbar \quad q^2 = k^2 + \frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{2kp}{\hbar}\ \cos\theta$$

Neem aan dat de energie van het foton klein is t.o.v. de electron massa m_e zodat $\hbar\omega_k << m_e c^2$. Anderzijds is $\hbar\omega_k$ veel groter dan de ionisatie-energie I vanwege het feit dat het electron in de eindtoestand vrij moet zijn.

De waarden van de parameters luiden als volgt

$$\hbar\omega_k = E_b - E_a + E_e \quad E_b = 0 \quad E_a = -\frac{1}{n^2}\ R_\infty \quad n_{\vec{k},1} = 1$$

De ionisatie-energie is gelijk aan

$$I = E_b - E_a = \frac{1}{2}\ \alpha^2 m_e c^2 = R_\infty \qquad \text{(constante van Rydberg)}$$

en de kinetische energie van het electron wordt gegeven door

$$E_e = \frac{p^2}{2m_e}$$

De totale overgangswaarschijnlijkheid is nu gelijk aan

$$W_{fi} = 64\ \pi^2\ \frac{e^2}{m_e^2}\ \frac{1}{a_0^5\ \omega_k\ \varepsilon_0}\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\ \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0^2} + q^2\right)^4}\ |\vec{\epsilon}_{\vec{k},1}\,\vec{p}|^2$$

$$\delta\left(-\hbar\omega_k + \frac{1}{2}\ \alpha^2 m_e c^2 + \frac{p^2}{2m_e}\right)\ p^2 dp\ d\Omega_p$$

Verder is

$$|\vec{\epsilon}_{\vec{k},1}\ \vec{p}|^2 = p^2 \sin^2\theta \cos^2\phi$$

$$\hbar\omega_k = \hbar kc = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{1}{2}\ \alpha^2 m_e c^2 = \frac{p^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2}{2a_0^2 m_e}$$

$$\to\ k = \frac{1}{2m_e\hbar c}\ \left(p^2 + \frac{\hbar^2}{a_0^2}\right)$$

$$q^2 + \frac{1}{a_0^2} = \frac{1}{a_0^2} + k^2 + \frac{p^2}{\hbar^2} - \frac{2kp}{\hbar}\ \cos\theta$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\ \left[\frac{\hbar^2}{a_0^2} + \hbar^2 k^2 + p^2 - 2\hbar kp\cos\theta\right]$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}\ \left[2m_e\hbar kc + \hbar^2 k^2 - 2\hbar kp\cos\theta\right]$$

Nu is $\hbar k << m_e c$ waaruit volgt $(\hbar k)^2 << \hbar k m_e c$

$$\to q^2 + \frac{1}{a_0^2} = \frac{2km_e c}{\hbar}\ \left[1 - \frac{v_e}{c}\cos\theta\right] \qquad v_e = \frac{p}{m_e}$$

Als nu de energie van het electron groter is dan de ionisatie-energie, dan

$$\frac{p^2}{2m_e}\ >>\ \frac{1}{2}\ \alpha^2 m_e c^2 = \frac{\hbar^2}{2a_0^2 m_e}\ \to\ k = \frac{1}{2m_e\hbar c}\ \left(p^2 + \frac{\hbar^2}{a_0^2}\right) \sim\ \frac{p^2}{2m_e\hbar c}$$

zodat we kunnen schrijven

$$q^2 + \frac{1}{a_0^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}\ (1 - \frac{v_e}{c}\ \cos\theta)$$

In de bovenstaande benadering wordt de totale overgangswaarschijnlijkheid gelijk aan

$$W_{fi} = 8\ \frac{e^2\hbar}{\omega_k\varepsilon_0\pi m_e^2}\ \frac{1}{a_0^5}\ \frac{\sin^2\theta\cos^2\phi}{(1 - \frac{v_e}{c}\ \cos\theta)^4}\ \left(\frac{\hbar}{p}\right)^4\ \frac{1}{V}$$

$$\delta\left(-\hbar\omega_k + \frac{1}{2}\ \alpha^2 m_e c^2 + \frac{p^2}{2m_e}\right)\ dp\ d\Omega_p$$

met

$$\alpha = \frac{e^2}{4x\hbar\epsilon_0 c} \qquad E = \frac{p^2}{2m_e} \qquad \to dE = \frac{p}{m_e}\ dp$$

Met behulp van het bovenstaande kunnen wij W_{fi} herschrijven als

$$W_{fi} = 32\ \alpha\ \frac{\hbar^2 c}{\omega_k m_e^2}\ \frac{1}{a_0^5}\ \frac{\sin^2\theta\cos^2\phi}{(1 - ve/c\ \cos\theta)^4}\ \left(\frac{\hbar}{p}\right)^4$$

$$\delta(-\hbar\omega_k + \frac{1}{2}\ \alpha^2 m_e c^2 + E)\ \frac{m_e}{p}\ dE\ d\Omega_p$$

Integreer de totale overgangswaarschijnlijkheid over E

$$W_{fi} = 32\ \alpha\ \left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)\ \left(\frac{c^2}{\omega_k}\right)\ \frac{1}{V}\ \left(\frac{\hbar}{p a_0}\right)^5\ \frac{\sin^2\theta\cos^2\phi}{(1 - \frac{v_e}{c}\ \cos\theta)^4}\ d\Omega_p$$

Met de definitie van de differentiële werkzame doorsnede

$$d\sigma_{fi} = W_{fi}\frac{V}{c}$$

krijgen we tenslotte

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\Omega_p} = 32\alpha\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)\ \left(\frac{c}{\omega_k}\right)\ \left(\frac{\hbar}{p\ a_0}\right)^5\ \frac{\sin^2\theta\cos^2\phi}{(1 - \frac{v_e}{c}\cos\theta)^4}$$

Het $y - z$-vlak ($\phi = \pi/2$) is verboden gebied voor het electron vanwege de term $\vec{\epsilon}_{\vec{k},1}\ \vec{p} = 0$ die voorkomt in $H_{\rm int}^{(1)}$
Deze uitspraak is niet meer waar als we ook $H_{\rm int}^{(3)}$ (de term die de spin van het electron beschrijft) in onze beschouwing meenemen. Echter het $y - z$-vlak blijft verboden als we de extra eis opleggen dat voor en na de botsing de spin van het electron niet verandert.