

Erkenning van auteursrechten

Dit document is een verzameling van potentiële theorie examenvragen en hun uitwerkingen gebaseerd op de syllabus van prof. dr. Dimitri Van Neck en prof. dr. Nick Bultinck via de cursus *Kwantummechanica II* door prof. dr. Henri Verschelde, en het boek *MANY-BODY THEORY EXPOSED! Propagator Description of Quantum Mechanics in Many-Body Systems* van prof. dr. Willem H. Dickhoff en prof. dr. Dimitri Van Neck. Alle auteursrechten behoren dan ook tot de rechtmatige individu's en organisaties.

De auteur van dit document erkent dat eender welke docent van het vak, of eender welke rechtmatige auteur van de inhoud, het recht heeft dit document van eender welke website van studentenverenigingen te verwijderen, indien zij dat wensen. Verder erkent de auteur dat enige poging tot het verkopen van dit document strikt illegaal is, mits de inhoud auteursrechtmatig beschermd is. Dit document is dan ook enkel bedoeld voor studenten die ingeschreven zijn voor het betreffende vak van de Universiteit van Gent.

Voorwoord

Ik kan als auteur van deze samenvatting niet garanderen dat de onderwerpen behandeld hierin altijd behandeld zullen blijven binnen de context van dit vak, noch kan ik garanderen dat de vragen altijd hetzelfde blijven, of dat de cursus dezelfde zal blijven. Wees echter niet getreurd, wegens de aard van het vak is het onvermijdelijk dat er overlap zal blijven bestaan tussen dit document en eventuele toekomstige vragen en syllabi. In dat geval kan dit document nog altijd nuttig blijven, in die zin dat eventuele incomplete of onduidelijke uitwerking mogelijk hier verhelderd zijn.

Doorheen dit document zult u af en toe *schuingedrukte tekst* vinden, dit zijn persoonlijke commentaren op de uitwerking, of mogelijke waarschuwingen waar studenten voor moeten oppassen. Ze maken echter geen deel uit van de uitwerkingen zelf.

Moge dit document u van pas komen.

Inhoudsopgave

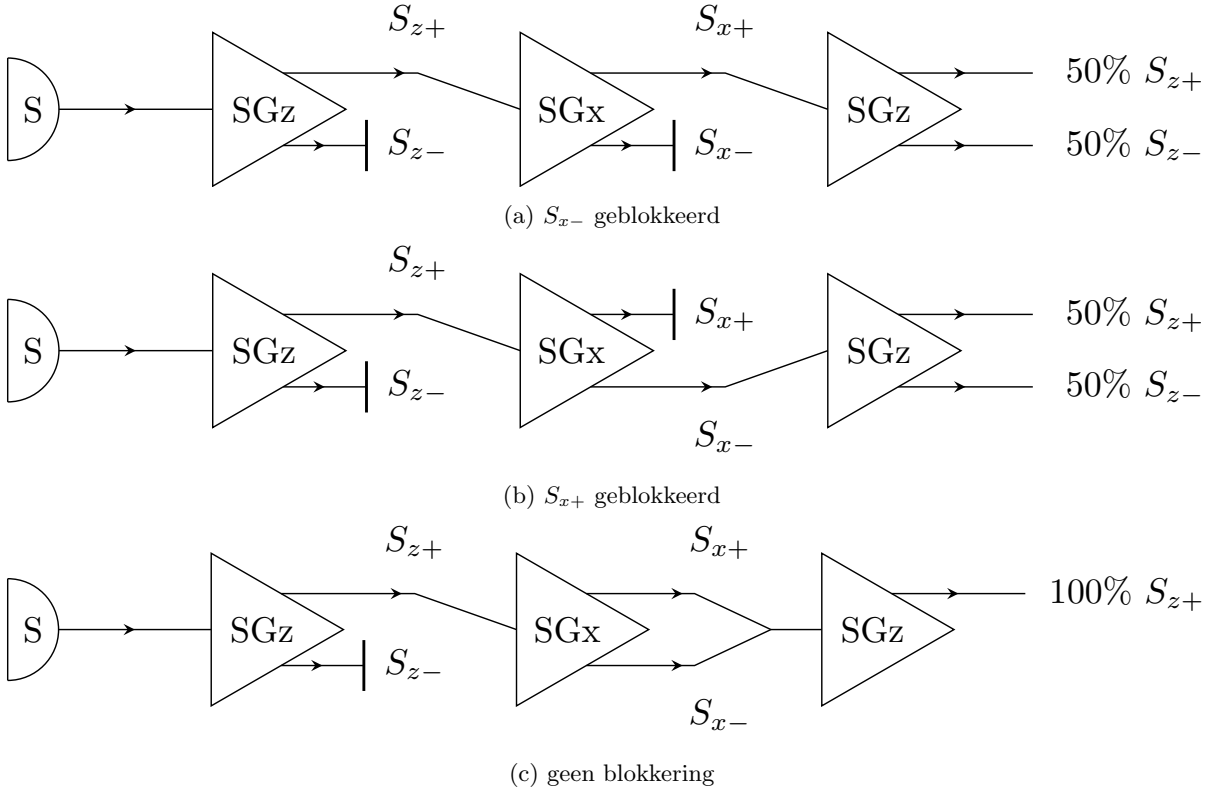
1	Formele ontwikkeling van de kwantummechanica	3
1.1	Superpositiebeginsel en interferentie	3
1.2	Verstrengeling en kwantuminformatie	4
2	Symmetrieën en behoudswetten in de kwantummechanica	6
2.1	Translatiesymmetrie	6
2.2	Rotatiesymmetrie	7
3	Driedimensionale vraagstukken in de kwantummechanica	13
3.1	Deeltje in centrale potentiaal	13
3.2	Waterstofatoom	16
3.3	Het ijkprincipe	19
4	Verstrooiingstheorie	21
4.1	Verstrooiingsexperimenten	21
4.2	Greense functies	21
4.3	Lippmann-Schwinger theorie	24
4.4	Partiële golfanalyse	26
5	Benaderingstechnieken	29
5.1	Niet-ontaaarde storingsrekening	29
5.2	Ontaaarde storingsrekening	30
5.3	Tijdsafhankelijke storingstheorie	31
5.4	Variationele methode	35
6	Relativistische kwantummechanica: de Dirac vergelijking	38
6.1	Dirac vergelijking	38
6.2	Covariante vorm van de Dirac vergelijking	40
6.3	Toegoege spinoren	42
6.4	Vrij deeltje	45
7	Tweede kwantisatie	47
	Appendices	51
A	Tensor index notatie	51
A.1	De conventie	51
A.2	De kronecker-delta en het levi-civita symbool	51
A.3	Het inwendige- en uitwendige product	52
A.4	Metrische tensoren: index raising en lowering	52
B	Commutator eigenschappen	54
C	Gradiënt, divergentie en laplaciaan in sferische coördinaten	55
C.1	Gradiënt en divergentie	55
C.2	Laplaciaan	55
D	Uitwerking afgeleiden vraag 15	57
E	Complexe integralen	58
E.1	De residustelling	58
E.2	Lemma van Jordan	58
F	Greense functies door complexe integralen	59
G	Referentielijst	61

1 Formele ontwikkeling van de kwantummechanica

1.1 Superpositiebeginsel en interferentie

1. Bespreek de uitkomst van het SGz na SGx na SGz experiment bij (a) blokkering van de S_{x-} -bundel, (b) blokkering van de S_{x+} -bundel, en (c) samenvoeging van beide bundels gegeven

$$|S_z, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, +\rangle \mp \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, -\rangle \quad \text{en} \quad |S_x, \pm\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z, +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z, -\rangle$$



Figuur 1: Het Stern-Gerlach experiment

We berekenen wat de kans is op het meten van $|S_z, \pm\rangle$ bij doorgang door het tweede SGz-apparaat wanneer we enkel de S_{x+} -bundel bewaren zoals in figuur 1a. We vinden het volgende (we werken in de orthogonale basis van S_x):

$$P_{\pm} = |\langle S_x, + | S_z, \pm \rangle|^2 = \left| \langle S_x, + | \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, +\rangle \mp \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, -\rangle \right) \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (1.1)$$

De kans op het meten van S_{z+} is dus even groot als de kans op het meten van S_{z-} .

We berekenen wat de kans is op het meten van $|S_z, \pm\rangle$ bij doorgang door het tweede SGz-apparaat wanneer we enkel de S_{x-} -bundel bewaren zoals in figuur 1b. We vinden het volgende (we werken in de orthogonale basis van S_x):

$$P_{\pm} = |\langle S_x, - | S_z, \pm \rangle|^2 = \left| \langle S_x, - | \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, +\rangle \mp \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, -\rangle \right) \right|^2 = \left| \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (1.2)$$

De kans op het meten van S_{z+} is dus even groot als de kans op het meten van S_{z-} .

In het derde geval breken we de superpositie van de S_{x+} - en de S_{x-} -bundel niet, zoals weergegeven

in figuur 1c, de golffunctie van het systeem voor doorgang door het tweede SGz-apparaat wordt dus gegeven door $|\psi\rangle = |S_z, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, +\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, -\rangle$. De kans op het meten van $|S_z, \pm\rangle$ bij doorgang door het tweede SGz-apparaat wordt in dit geval dus gegeven door (nog steeds werkende in de orthogonale S_x -basis):

$$\begin{aligned} P_{\pm} &= |\langle\psi|S_z, \pm\rangle|^2 = \left| \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, +\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, -\rangle \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, +\rangle \mp \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, -\rangle \right) \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right|^2 \\ \implies P_+ &= 1 \quad \wedge \quad P_- = 0 \end{aligned} \tag{1.3}$$

We zien dat in de eerste twee gevallen alle informatie over de oorspronkelijke SGz-meting verloren is gegaan; er kwam enkel een S_{z+} -bundel binnen in het SGx-apparaat, en toch komen er zowel een S_{z+} als een S_{z-} bundel uit het tweede SGz-apparaat. Dit fenomeen nemen we niet waar in het derde geval, waar we de superpositie van de S_x -bundels niet braken, we spreken in de eerste twee gevallen dan van wave function collapse, de oorspronkelijke S_{z+} -toestand is ‘verloren gegaan’.

1.2 Verstrengeling en kwantuminformatie

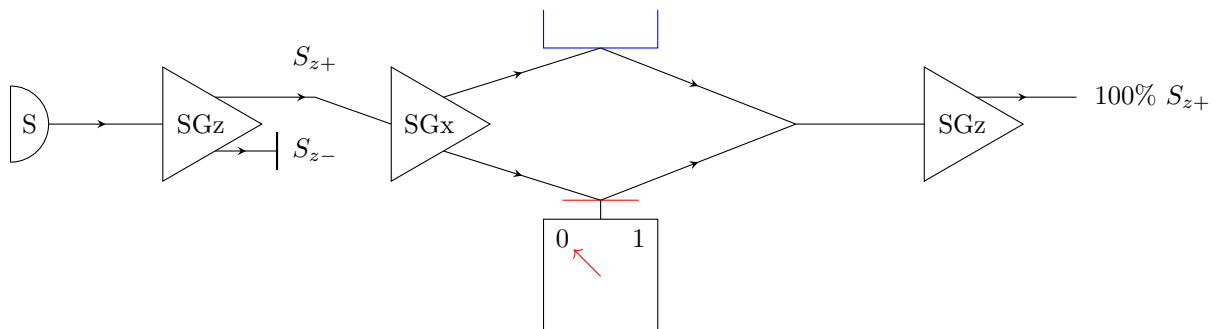
2. Introduceer het which-way experiment.

Beschouw opnieuw een SGz na SGx na SGz opstelling zoals weergegeven in figuur 2. We blokkeren nog steeds de eerste S_{z-} -bundel, maar bij het SGx-apparaat hebben we nu de volgende opstelling: We blokkeren de bundels bij het SGx-apparaat niet; we laten de S_{x+} -bundel afketsen langs een vaste spiegel en de S_{x-} -bundel langs een spiegel op een zeer gevoelige detector die 0 geeft wanneer geen elektron erop afkettst en 1 wanneer er wel een elektron op afkettst. Hierbij treedt geen wave-function collapse op, verder worden beide bundels samengebracht zonder faseverschil ertussen. In tegenstelling tot wat we verwachten uit ons eerder experiment vinden we dat na doorgang door het SGz-apparaat $P_+ = P_- = 0, 5!$

3. Toon aan dat in de direct product Hilbert ruimte van elektron en detector we dezelfde resultaten vinden, en dus dat het postulaat van wave-function collapse na meting overbodig is.

De totale Hilbertruimte is nu het direct product van die van het elektron en die van de detector: $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_e \otimes \mathcal{H}_D$. Zij nu $|D\rangle$ de detectortoestand op t_1 voor het which-way experiment en $|S_z, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, +\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, -\rangle$ de elektron toestand op t_1 , dan is $|\psi(t_1)\rangle = |S_z, +\rangle |D\rangle$ de totale golffunctie op tijdstip t_1 . Tussen $t = t_1$ en $t = t_2$ (het tijdstip van het which-way experiment) ondergaat de toestandfunctie een unitaire evolutie $|\psi(t_1)\rangle \rightarrow |\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_1, t_2) |\psi(t_1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, +\rangle |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |S_x, -\rangle |1\rangle$. De elektron toestand en de detector toestand zijn nu met elkaar gecorreleerd, dit is kwantum verstrengeling.

Gegeven dat de 2 detectortoestanden $|0\rangle$ en $|1\rangle$ orthogonaal zijn (ze kunnen niet beide tegelijk voorkomen), vinden we nu voor de waarschijnlijkheid om $|S_z, \pm\rangle$ terug te vinden na doorgang van het SGz-



Figuur 2: Het which-way experiment

apparaat:

$$\begin{aligned}
P_{\pm}(t_2) &= |\langle \psi(t_2) | S_z, \pm \rangle|^2 = \left| \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_x, + | \langle 0 | - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_x, - | \langle 1 | \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} | S_x, + \rangle \mp \frac{1}{\sqrt{2}} | S_x, - \rangle \right) \right|^2 \\
&= \left| \frac{1}{2} \langle 0 | \pm \frac{1}{2} \langle 1 | \right|^2 = \left(\frac{1}{2} \langle 0 | \pm \frac{1}{2} \langle 1 | \right) \left(\frac{1}{2} | 0 \rangle \pm \frac{1}{2} | 1 \rangle \right) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \\
&= \frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{1.4}$$

Voor we het which-way experiment uitvoeren, maar uiteraard wel nog de bundels samenvoegen, (op t_1) zou men echter vinden dat:

$$\begin{aligned}
P_{\pm}(t_1) &= |\langle \psi(t_1) | S_z, \pm \rangle|^2 = \left| \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_x, + | \langle D | - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_x, - | \langle D | \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} | S_x, + \rangle \mp \frac{1}{\sqrt{2}} | S_x, - \rangle \right) \right|^2 \\
&= \left| \frac{1}{2} \langle D | \pm \frac{1}{2} \langle D | \right|^2 = \left(\frac{1}{2} \langle D | \pm \frac{1}{2} \langle D | \right) \left(\frac{1}{2} | D \rangle \pm \frac{1}{2} | D \rangle \right) = \frac{1}{4} \pm \frac{1}{4} \pm \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \\
&\implies P_+(t_1) = 1 \quad \wedge \quad P_-(t_1) = 0
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Dit is precies wat we eerder vonden! Het postulaat van wave-function collapse is dus overbodig.

2 Symmetrieën en behoudswetten in de kwantummechanica

2.1 Translatiesymmetrie

4. Bewijs dat $[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ vertrekkend vanaf $\hat{T}(\mathrm{d}\vec{r}) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}} \cdot \mathrm{d}\vec{r}$

We laten de infinitesimale translatie-operator $\hat{T}(\mathrm{d}\vec{r}')$ inwerken op een toestand $|\vec{r}'\rangle$ en vervolgens laten we de positie-operator $\hat{\vec{r}}$ inwerken op deze toestand:

$$\hat{T}(\mathrm{d}\vec{r}') |\vec{r}'\rangle = |\vec{r}' + \mathrm{d}\vec{r}'\rangle \rightarrow \hat{\vec{r}} \left(\hat{T}(\mathrm{d}\vec{r}') |\vec{r}'\rangle \right) = \hat{\vec{r}} |\vec{r}' + \mathrm{d}\vec{r}'\rangle = (\vec{r}' + \mathrm{d}\vec{r}') |\vec{r}' + \mathrm{d}\vec{r}'\rangle \quad (2.1)$$

Nu laten we eerst de positie-operator $\hat{\vec{r}}$ inwerken, en dan pas $\hat{T}(\mathrm{d}\vec{r}')$:

$$\hat{\vec{r}} |\vec{r}'\rangle = \vec{r}' |\vec{r}'\rangle \rightarrow \hat{T}(\mathrm{d}\vec{r}') (\hat{\vec{r}} |\vec{r}'\rangle) = \vec{r}' \hat{T}(\mathrm{d}\vec{r}') |\vec{r}'\rangle = \vec{r}' |\vec{r}' + \mathrm{d}\vec{r}'\rangle \quad (2.2)$$

Trekken we nu vergelijking 2.2 af van vergelijking 2.1, dan vinden we:

$$\begin{aligned} & \left[\hat{\vec{r}}, \hat{T}(\mathrm{d}\vec{r}') \right] |\vec{r}'\rangle = \mathrm{d}\vec{r}' |\vec{r}' + \mathrm{d}\vec{r}'\rangle - \vec{r}' |\vec{r}' + \mathrm{d}\vec{r}'\rangle = \mathrm{d}\vec{r}' |\vec{r}'\rangle + \mathcal{O}((\mathrm{d}\vec{r}')^2) \\ \Rightarrow & \left[\hat{r}_i, \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^3 \hat{p}_j \mathrm{d}r_j \right] = \mathrm{d}r_i \\ \Rightarrow & -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^3 [\hat{r}_i, \hat{p}_j] \mathrm{d}r_j = \mathrm{d}r_i \\ \Rightarrow & -\frac{i}{\hbar} [\hat{r}_i, \hat{p}_j] = \delta_{ij} \\ \Rightarrow & [\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.3)$$

5. Bewijs de onzekerheidsrelatie van Heisenberg.

Definieer de onzekerheid op de hermitische observabele $\hat{A}$ als $\Delta\hat{A} := \left\langle \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \right)^2 \right\rangle^{1/2}$ waarbij $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ de verwachtingswaarde van de operator $\hat{A}$ is. In dit geval vinden we dat $(\Delta\hat{A})^2 = \left\langle \hat{A}^2 - 2\hat{A} \langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$.

Introduceer nu de hermitische operatoren $\hat{\hat{A}} := \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$ en $\hat{\hat{B}} := \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$ waarvoor geldt dat

$$\left\langle \hat{\hat{A}}^2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^2 - 2\hat{A} \langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \right\rangle = (\Delta\hat{A})^2 \quad (\text{en analoog voor } \hat{\hat{B}}) \quad (2.4)$$

Bovendien geldt dat

$$\begin{aligned} [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}] &= [\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle] \\ &= \hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle \hat{B} \rangle - \hat{B}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle - \hat{B}\hat{A} + \hat{B}\langle \hat{A} \rangle + \hat{A}\langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \\ &= [\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned} \quad (2.5)$$

Als laatste tussenstap bewijzen we nu nog dat $\left\langle [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}] \right\rangle$ zuiver imaginair is. Mits $\hat{A}$ en $\hat{B}$ hermitisch zijn, geldt altijd dat

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = -[\hat{A}, \hat{B}] \quad (2.6)$$

Bovendien geldt ook altijd dat

$$\begin{aligned} \left\langle [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}]^\dagger \right\rangle &= \left\langle [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}] \right\rangle^* \\ \Rightarrow 2\operatorname{Re}\left\{ \left\langle [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}] \right\rangle \right\} &= \left\langle [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}] \right\rangle + \left\langle [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}] \right\rangle^* \stackrel{(2.6)}{=} -\left\langle [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}]^\dagger \right\rangle + \left\langle [\hat{\hat{A}}, \hat{\hat{B}}]^\dagger \right\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$ is dus zuiver imaginair, waaruit volgt dat

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 = -|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 \quad (2.8)$$

Definieer nu de niet-hermitische operator $\hat{C} := \hat{A} + i\lambda\hat{B}$. Er geldt dat

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}\hat{C}^\dagger \rangle &= \langle \psi | \hat{C}\hat{C}^\dagger | \psi \rangle = \langle \hat{C}^\dagger \psi | \hat{C}^\dagger \psi \rangle \geq 0 \\ \Rightarrow \langle (\hat{A} + i\lambda\hat{B})(\hat{A} - i\lambda\hat{B}) \rangle &= \langle \hat{A}^2 - i\lambda\hat{A}\hat{B} + i\lambda\hat{B}\hat{A} + \lambda^2\hat{B}^2 \rangle \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \hat{B}^2 \rangle - i\lambda \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \\ &\stackrel{(2.4),(2.5)}{=} (\Delta\hat{A})^2 + \lambda^2(\Delta\hat{B})^2 - i\lambda \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

waarbij we in de eerste regel gebruik hebben gemaakt van het feit dat het inproduct per definitie positief definit is.

Beschouw nu de functie $f(\lambda) := \langle \hat{C}\hat{C}^\dagger \rangle$, deze heeft een minimum bij $\lambda_0 = \frac{i}{2} \frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle}{(\Delta\hat{B})^2}$ waarbij $f(\lambda_0)$ dus minimaal is. We vinden uit vergelijking 2.9

$$\begin{aligned} f(\lambda_0) &= (\Delta\hat{A})^2 - \frac{1}{4} \frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{(\Delta\hat{B})^2} + \frac{1}{2} \frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{(\Delta\hat{B})^2} \geq 0 \\ \Rightarrow (\Delta\hat{A})^2(\Delta\hat{B})^2 &\geq -\frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \stackrel{(2.8)}{=} \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 \\ \Rightarrow (\Delta\hat{A})(\Delta\hat{B}) &\geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.2 Rotatiesymmetrie

6. Bewijs dat $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$ gebruikmakend van $[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ ¹.

Analoog als bij de klassieke mechanica geldt dat $\hat{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ of $\hat{L}_i = \epsilon_{ijk}\hat{r}_j\hat{p}_k$, waarbij ϵ_{ijk} het levi-civita symbool is. We vinden dan via wat commutator algebra (zie appendix B) dat

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= \epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}[\hat{r}_k\hat{p}_l, \hat{r}_m\hat{p}_n] \\ &= \epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}(\hat{r}_k\hat{r}_m[\hat{p}_l, \hat{p}_n] + \hat{r}_k[\hat{p}_l, \hat{r}_m]\hat{p}_n + \hat{r}_m[\hat{r}_k, \hat{p}_n]\hat{p}_l + [\hat{r}_k, \hat{r}_m]\hat{p}_n\hat{p}_l) \\ &= \epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}(-i\hbar\hat{r}_k\hat{p}_n\delta_{lm} + i\hbar\hat{r}_m\hat{p}_l\delta_{kn}) = i\hbar(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jnl}\hat{r}_k\hat{p}_n - \epsilon_{ilk}\epsilon_{jmk}\hat{r}_m\hat{p}_l) \end{aligned} \quad (2.11)$$

waarbij we in de laatste overgang gebruik hebben gemaakt van het feit dat

$$\epsilon_{abc} = \epsilon_{cab} \quad \wedge \quad \epsilon_{abc} = -\epsilon_{bac} \quad (2.12)$$

i.e. cyclische permutatie van de indices verandert het teken niet, transponeren van 2 naburige indices wijzigt het teken.

Om verder te gaan maken we gebruik van nog een tweede eigenschap van de levi-civita symbolen (zonder bewijs):

$$\epsilon_{ijk}\epsilon^{mnk} = \delta_i^m\delta_j^n - \delta_i^n\delta_j^m \quad (2.13)$$

Merk op dat het niet uitmaakt of we met covariante (subscript) of contravariante (superscript) indices werken, zolang we in de Euclidische metriek werken². We zullen dan ook telkens alle indices *loweren*. Dit wordt allemaal meer verduidelijkt in appendix A.

Als we deze eigenschap toepassen, dan vinden we dat

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= i\hbar[(\delta_{ij}\delta_{kn} - \delta_{in}\delta_{jk})\hat{r}_k\hat{p}_n - (\delta_{ij}\delta_{lm} - \delta_{im}\delta_{lj})\hat{r}_m\hat{p}_l] \\ &= i\hbar(\hat{r}_k\hat{p}_k\delta_{ij} - \hat{r}_j\hat{p}_i - \hat{r}_l\hat{p}_l\delta_{ij} + \hat{r}_i\hat{p}_j) = i\hbar(\hat{r}_i\hat{p}_j - \hat{r}_j\hat{p}_i) \\ &= i\hbar\hat{r}_m\hat{p}_n(\delta_{mi}\delta_{nj} - \delta_{mj}\delta_{ni}) = i\hbar\epsilon_{mnk}\epsilon_{ijk}\hat{r}_m\hat{p}_n = i\hbar\epsilon_{ijk}(\epsilon_{kmn}\hat{r}_m\hat{p}_n) \\ &= i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \end{aligned} \quad (2.14)$$

¹Vanaf hier maken we volop gebruik van tensor index notatie. Wanneer een index dus twee keer verschijnt, wordt sommatie over die index verondersteld. De range van de index wordt verondersteld duidelijk te zijn aan de context. Meer uitleg staat in appendix A

²Dit zal niet meer het geval zijn in hoofdstuk 6

7. Voor een algemeen draaimoment $\hat{J}$: bewijs dat de spectra van $\hat{J}^2$ en $\hat{J}_z$ gegeven worden door $\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$ en $\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$.

Beschouw een algemeen draaimomentoperator $\hat{J}$ die voldoet aan $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k$. Definieer dan $\hat{J}^2 := \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ waarvoor geldt dat

$$\begin{aligned} [\hat{J}^2, \hat{J}_i] &= [\hat{J}_j \hat{J}_j, \hat{J}_i] = \hat{J}_j [\hat{J}_j, \hat{J}_i] + [\hat{J}_j, \hat{J}_i] \hat{J}_j \\ &= i\hbar (\varepsilon_{jik} \hat{J}_j \hat{J}_k + \varepsilon_{jil} \hat{J}_l \hat{J}_j) = i\hbar (-\varepsilon_{ijk} \hat{J}_j \hat{J}_k + \varepsilon_{ilj} \hat{J}_l \hat{J}_j) \\ &= i\hbar [-(\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}}) + (\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}})] \\ &= \hat{0} \quad \forall i \end{aligned} \quad (2.15)$$

Er bestaat bij gevolg een gemeenschappelijke eigenbasis waarin $\hat{J}^2$ en $\hat{J}_z$ tegelijk gediagonaliseerd kunnen worden³, we noteren $\hat{J}^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle$ en $\hat{J}_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle$.

Merk op dat

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \frac{1}{2} [(\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) + (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y)] \\ &= \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) \end{aligned} \quad (2.16)$$

Mits $\hat{J}_i$ hermitisch is $\forall i$, geldt dat $(\hat{J}_\pm)^\dagger = \hat{J}_\mp$ met $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$, en dus

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{J}_- \hat{J}_+ | \psi \rangle &= \langle \hat{J}_+ \psi | \hat{J}_+ \psi \rangle \geq 0 \\ \langle \psi | \hat{J}_+ \hat{J}_- | \psi \rangle &= \langle \hat{J}_- \psi | \hat{J}_- \psi \rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (2.17)$$

Hieruit volgt dat ook $\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2$ positief definit is, waaruit volgt dat

$$\begin{aligned} \langle a, b | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | a, b \rangle &\geq 0 \\ \implies a - b^2 &\geq 0 \\ \implies a &\geq b^2 \end{aligned} \quad (2.18)$$

of dus, voor een vaste a is b begrensd.

Verder vinden we ook nog de volgende commutatierelaties

$$\begin{aligned} 1. \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= [\hat{J}_z, \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_y \mp (-\hbar \hat{J}_x) = \pm \hbar (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) \\ &= \pm \hbar \hat{J}_\pm \\ 2. \quad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= [\hat{J}_x + i\hat{J}_y, \hat{J}_x - i\hat{J}_y] = \hbar \hat{J}_z - \hbar (-\hat{J}_z) \\ &= 2\hbar \hat{J}_z \end{aligned} \quad (2.19)$$

We vinden hieruit dat

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \hat{J}_\pm |a, b\rangle &= [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] |a, b\rangle + \hat{J}_p m \hat{J}_z |a, b\rangle = \pm \hbar \hat{J}_\pm |a, b\rangle + b \hat{J}_\pm |a, b\rangle \\ &= (b \pm \hbar) \hat{J}_\pm |a, b\rangle \end{aligned} \quad (2.20)$$

De operator $\hat{J}_+$ verhoogt dus de eigenwaarde van $\hat{J}_z$ met $\hbar$ terwijl $\hat{J}_-$ de eigenwaarde doet zakken met $\hbar$. Mits b voor vaste a begrensd is, impliceert dit dat

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |a, b_{max}\rangle &= 0 \\ \implies \hat{J}_- \hat{J}_+ |a, b_{max}\rangle &= 0 \\ \implies (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) |a, b_{max}\rangle &= (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i[\hat{J}_x, \hat{J}_y]) |a, b_{max}\rangle \\ &= (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) |a, b_{max}\rangle = (a - b_{max}^2 - \hbar b_{max}) |a, b_{max}\rangle \\ &= 0 \\ \implies a &= b_{max}(b_{max} + \hbar) \end{aligned} \quad (2.21)$$

³Oprissing uit de algebra: twee diagonaliseerbare endomorfismen uit dezelfde vectorruimte die met elkaar commuteren, hebben een gemeenschappelijke spectrale decompositie, en bijgevolg ook een gemeenschappelijke eigenbasis

Analoog vindt men dus ook

$$\begin{aligned}
& \hat{J}_- |a, b_{min}\rangle = 0 \\
& \implies \hat{J}_+ \hat{J}_- |a, b_{min}\rangle = 0 \\
& \implies \left([\hat{J}_+, \hat{J}_-] + \hat{J}_- \hat{J}_+ \right) |a, b_{min}\rangle \stackrel{(2.19)}{=} \left(2\hbar \hat{J}_z + \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z \right) |a, b_{min}\rangle \\
& \quad = (a - b_{min}^2 + \hbar b_{min}) |a, b_{min}\rangle = 0 \\
& \implies a = b_{min}(b_{min} - \hbar)
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Uit vergelijkingen 2.21 en 2.22 volgt nu

$$\begin{aligned}
& a - a = 0 \\
& \iff b_{max}^2 - b_{min}^2 + \hbar(b_{max} + b_{min}) = 0 \\
& \iff (b_{max} + b_{min})(b_{max} - b_{min} + \hbar) = 0 \\
& \implies b_{min} = -b_{max} \quad (\text{mits } b_{min} < b_{max})
\end{aligned} \tag{2.23}$$

We moeten via $\hat{J}_+$ in een eindig aantal stappen $n \in \mathcal{N}$ van b_{min} naar b_{max} kunnen gaan zodat

$$b_{max} = -b_{min} + n\hbar \implies b_{max} = \frac{n\hbar}{2} = j\hbar \tag{2.24}$$

Mits $\hat{J}_+$ b telkens met $\hbar$ verhoogt, en het feit dat $-j\hbar \leq b \leq j\hbar$ is het duidelijk dat $b = m\hbar$. Wanneer j heeltallig is, is m dat ook. Wanneer j half-tallig is, is m dat ook.

Uit vergelijkingen 2.21 en 2.24 volgt nu

$$a = j\hbar(j\hbar + \hbar) = \hbar^2 j(j+1) \tag{2.25}$$

We herlabelen nu de eigentoestand $|a, b\rangle$ naar $|j, m\rangle$ en vatten samen:

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad \wedge \quad \hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \tag{2.26}$$

8. Bereken de matrixelementen van de ladderoperatoren $\hat{J}_\pm$ in de basis $|j, m\rangle$.

We weten al dat de operatoren $\hat{J}^2$ en $\hat{J}_z$ diagonaal zijn in deze basis, we hebben dus

$$\begin{aligned}
\langle j', m' | \hat{J}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) \langle j', m' |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \\
\langle j', m' | \hat{J}_z |j, m\rangle &= \hbar m \langle j', m' |j, m\rangle = \hbar m \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}
\end{aligned} \tag{2.27}$$

De ladderoperatoren verhogen of verlagen de waarde van m zodat $\hat{J}_\pm |j, m\rangle = c_{j,m,\pm} |j, m \pm 1\rangle$ en dus

$$\begin{aligned}
\langle j, m | \left(\hat{J}_\pm \right)^\dagger \hat{J}_\pm |j, m\rangle &= \left\langle \hat{J}_\pm(j, m) \middle| \hat{J}_\pm(j, m) \right\rangle \\
&= c_{j,m,\pm}^* c_{j,m,\pm} \langle j, m \pm 1 |j, m \pm 1\rangle \\
&= |c_{j,m,\pm}|^2
\end{aligned} \tag{2.28}$$

verder geldt ook dat

$$\begin{aligned}
\langle j, m | \left(\hat{J}_\pm \right)^\dagger \hat{J}_\pm |j, m\rangle &= \langle j, m | \left(\hat{J}_x \mp i\hat{J}_y \right) \left(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \right) |j, m\rangle \\
&= \langle j, m | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] |j, m\rangle \\
&= \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z |j, m\rangle \\
&= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 \pm m] \\
&= \hbar^2 [(j+m)(j-m) + j \mp m] \\
&= \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1)
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Uit vergelijkingen 2.28 en 2.29 volgt dan

$$|c_{j,m,\pm}|^2 = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1) \tag{2.30}$$

Stellen we vervolgens de complexe fase van de constante gelijk aan 1, dan vinden we

$$\begin{aligned}\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \\ \Rightarrow \langle j', m' | \hat{J}_{\pm} |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j', m' | j, m \pm 1\rangle \\ \Rightarrow \langle j', m' | \hat{J}_{\pm} |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \delta_{j',j} \delta_{m',m \pm 1}\end{aligned}\quad (2.31)$$

9. Voer de Clebsch-Gordan coëfficiënten in bij overgang van de ongekoppelde basis $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ naar de gekoppelde basis $|j_1 j_2; j m\rangle$ voor de samenstelling van 2 draaimomenta. Wat zijn de eigenschappen van de CGCs? De recursie relatie hoeft je niet te behandelen.

Beschouw twee deeltjes met respectievelijke spins j_1 en j_2 beschreven door een toestandsvector in de direct-productruimte (ongekoppelde basis) $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ die de commuterende set $\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{z,1}, \hat{J}_{z,2}\}$ diagonaliseert. Beschouw verder de gekoppelde eigenbasis $|j_1 j_2; j m\rangle$ die de commuterende set $\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ diagonaliseert. We wensen nu de unitaire transformatie tussen beide basissen vinden. Algemeen geldt dat

$$|j_1 j_2; j m\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle \quad (2.32)$$

waarbij $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle$ de zogeheten Clebsch-Gordan coëfficiënten zijn, waarvan we nu enkele eigenschappen nader bestuderen.

eigenschap 1: $m = m_1 + m_2$

Om deze eigenschap te bewijzen zullen we de integraal $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \hat{J}_z | j_1 j_2; j m\rangle$ op 2 verschillende manieren uitrekenen. Eerst vinden we dat

$$\begin{aligned}\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \hat{J}_z | j_1 j_2; j m\rangle &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \hat{J}_{z,1} + \hat{J}_{z,2} | j_1 j_2; m'_1 m'_2\rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m\rangle \\ &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \hbar(m'_1 + m'_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; m'_1 m'_2\rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m\rangle \\ &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \hbar(m'_1 + m'_2) \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2} \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle\end{aligned}\quad (2.33)$$

Anderzijds vinden we ook dat

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \hat{J}_z | j_1 j_2; j m\rangle = \hbar m \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle \quad (2.34)$$

Uit vergelijkingen 2.33 en 2.34 zien we dus vrij snel dat $m = m_1 + m_2$.

eigenschap 2: $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$

Om deze eigenschap te bewijzen, maken we gebruik van het klassieke vectormodel.

$$\begin{aligned}\begin{cases} -j \leq m \leq j \\ -j_1 \leq m_1 \leq j_1 \\ -j_2 \leq m_2 \leq j_2 \end{cases} &\stackrel{m=m_1+m_2}{\implies} \begin{cases} -j_1 \leq m - m_2 \leq j_1 \\ -j_2 \leq m - m_1 \leq j_2 \end{cases} \\ \stackrel{m=j, m_1=j_1, m_2=j_2}{\implies} \begin{cases} -j_1 \leq j - j_2 \leq j_1 \\ -j_2 \leq j - j_1 \leq j_2 \end{cases} &\implies \begin{cases} j_2 - j_1 \leq j \leq j_1 + j_2 \\ j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2 \end{cases} \\ \implies |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 &\end{aligned}\quad (2.35)$$

Voor elke j horen er $2j + 1$ lineair onafhankelijke eigentoestanden te bestaan, zodat het totaal aantal eigentoestanden gelijk is aan

$$\begin{aligned}\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} [2j+1] &\stackrel{*}{=} \sum_{j=0}^{2j_2} [2(j+j_1-j_2)+1] = 2 \sum_{j=0}^{2j_2} j + (2j_1-2j_2+1) \sum_{j=0}^{2j_2} 1 \\ &= (2j_2)(2j_2+1) + (2j_1-2j_2+1)(2j_2+1) \\ &= (2j_2+2j_1-2j_2+1)(2j_2+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)\end{aligned}\quad (2.36)$$

substitutie (*) met $j_1 > j_2$: $j' = j - |j_1 - j_2| \implies j' : 0 \rightarrow 2j_2$

eigenschap 3: Unitariteit

De CGCs vormen een unitaire matrix, we kiezen de elementen per conventie reëel zodat de matrices orthogonaal zijn en dat

$$\begin{aligned}
& \langle j_1 j_2; jm | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \\
\Rightarrow & \sum_j \sum_m \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; jm \rangle \\
& = \sum_j \sum_m \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; jm | j_1 j_2; m'_1 m'_2 \rangle \\
& = \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2}
\end{aligned} \tag{2.37}$$

en bovendien

$$\begin{aligned}
& \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \\
& = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; j' m' | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \\
& = \delta_{j' j} \delta_{m' m}
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Uit dit laatste vinden we in het bijzondere geval waarbij $j' = j$ en $m' = m = m_1 + m_2$

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle|^2 = 1 \tag{2.39}$$

10. Toon aan dat de Legendre polynomen $P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l$ **oplossingen zijn van de differentiaalvergelijking** $\left[(1 - z^2) \frac{d^2}{dz^2} - 2z \frac{d}{dz} + l(l+1) \right] P_l(z) = 0$

Beschouw om te beginnen $v(z) = (z^2 - 1)^l$ waarvoor geldt dat

$$(z^2 - 1) \frac{dv(z)}{dz} = (z^2 - 1) l (z^2 - 1)^{l-1} 2z = 2lzv(z) \tag{2.40}$$

Nu zullen we de veralgemeende Leibniz regel voor afgeleiden gebruiken:

$$(fg)^{(n)} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f^{(n-k)} g^{(k)} \tag{2.41}$$

waarbij $f^{(n)}$ de n -de afgeleide van de functie f , en $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$ de binomiaalcoëfficiënt voorstellen. Zij nu in ons geval $f(z) = (z^2 - 1)$ en $g(z) = v^{(1)}(z)$. We zoeken de $l+1$ -ste afgeleide van vergelijking 2.40. We behandelen eerst het linker lid.

$$\left[(z^2 - 1)v^{(1)}(z) \right]^{(l+1)} = \sum_{k=0}^{l+1} \binom{l+1}{k} (z^2 - 1)^{(l+1-k)} v^{(k+1)}(z) \tag{2.42}$$

Men ziet snel in dat

$$(z^2 - 1)^{(l+1-k)} = \begin{cases} z^2 - 1 & \text{als } k = l+1 \\ 2z & \text{als } k = l \\ 2 & \text{als } k = l-1 \\ 0 & \text{elders} \end{cases} \tag{2.43}$$

en we hoeven dus enkel rekening te houden met deze gevallen.

$$\left[(z^2 - 1)v^{(1)}(z) \right]^{(l+1)} = \binom{l+1}{l-1} 2v^{(l)}(z) + \binom{l+1}{l} 2zv^{(l+1)}(z) + \binom{l+1}{l+1} (z^2 - 1)v^{(l+2)}(z) \tag{2.44}$$

We berekenen alvast de binomiaalcoëfficiënten.

$$\begin{aligned}
\binom{l+1}{l-1} &= \frac{(l+1)!}{(l-1)!2!} = \frac{(l+1)l}{2} \\
\binom{l+1}{l} &= \frac{(l+1)!}{l!1!} = l+1 \\
\binom{l+1}{l+1} &= 1
\end{aligned} \tag{2.45}$$

Dit levert ons de finale uitdrukking voor het linker lid.

$$\left[(z^2 - 1)v^{(1)}(z)\right]^{(l+1)} = l(l+1)v^{(l)}(z) + 2(l+1)zv^{(l+1)}(z) + (z^2 - 1)v^{(l+2)}(z) \quad (2.46)$$

We werken nu het rechter lid van vergelijking 2.40 verder uit via 2.41 met $f = z$ en $g = v(z)$.

$$[2lv(z)]^{(l+1)} = 2l \sum_{k=0}^{l+1} \binom{l+1}{k} z^{(l+1-k)} v^{(k)}(z) \quad (2.47)$$

Wederom ziet men snel in dat

$$z^{(l+1-k)} = \begin{cases} z & \text{als } k = l+1 \\ 1 & \text{als } k = l \\ 0 & \text{elders} \end{cases} \quad (2.48)$$

Dit geeft ons het rechterlid van vergelijking 2.40.

$$\begin{aligned} [2lv(z)]^{(l+1)} &= 2l \left[\binom{l+1}{l+1} zv^{(l+1)}(z) + \binom{l+1}{l} v^{(l)}(z) \right] \\ &= 2l \left[zv^{(l+1)}(z) + (l+1)v^{(l)}(z) \right] \end{aligned} \quad (2.49)$$

Gelijkstellen van vergelijkingen 2.46 en 2.49 geeft ons dan

$$\begin{aligned} l(l+1)v^{(l)}(z) + 2(l+1)zv^{(l+1)}(z) + (z^2 - 1)v^{(l+2)}(z) &= 2lv^{(l+1)}(z) + 2l(l+1)v^{(l)}(z) \\ \iff (z^2 - 1)v^{(l+2)}(z) + 2zv^{(l+1)}(z) - l(l+1)v^{(l)}(z) &= 0 \\ \implies (1 - z^2) \frac{d^2}{dz^2} \left(\frac{1}{2^l l!} v^{(l)}(z) \right) - 2z \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{2^l l!} v^{(l)}(z) \right) + l(l+1) \left(\frac{1}{2^l l!} v^{(l)}(z) \right) &= 0 \end{aligned} \quad (2.50)$$

waarin we precies de Legendre polynomen herkennen als oplossingen van de differentiaal vergelijking wetende dat $v(z) = (z^2 - 1)^l$.

3 Driedimensionale vraagstukken in de kwantummechanica

3.1 Deeltje in centrale potentiaal

11. Leid de sferisch-symmetrische Hamiltoniaan af: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\vec{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \right) + V(r)$
 vertrekkende van $\vec{L}^2 = (\vec{r} \times \vec{p})^2$.

Dit bewijs voeren we uit in meerdere stappen.

Stap 1: Klassieke bevindingen

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= (\vec{r} \times \vec{p})^2 = (\varepsilon_{kij} r_i p_j)^2 = \varepsilon_{kij} \varepsilon_{kmn} r_i p_j r_m p_n \stackrel{(2.12)}{=} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{mnk} r_i p_j r_m p_n \\ &\stackrel{(2.13)}{=} (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) r_i p_j r_m p_n = r_i r_i p_j p_j - r_i p_i r_j p_j \\ &= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 = r^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 \\ \Rightarrow \vec{p}^2 &= \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} \right)^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Stap 2: Hermitische operatoren

Men kan niet zomaar de klassieke vectoren vervangen door hun kwantummechanische operatoren. $\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}}$ is bijvoorbeeld niet hermitisch, beschouw dus haar symmetrisch deel, wat wel hermitisch is.

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{\vec{r}}}{r} \cdot \hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}} \cdot \frac{\hat{\vec{r}}}{r} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{\vec{r}}}{r} \cdot \hat{\vec{p}} + \left[\hat{\vec{p}}, \frac{\hat{\vec{r}}}{r} \right] + \frac{\hat{\vec{r}}}{r} \cdot \hat{\vec{p}} \right) \quad (3.2)$$

Nu kan men de commutator verder uitwerken:

$$\begin{aligned} \left[\hat{\vec{p}}, \frac{\hat{\vec{r}}}{r} \right] \psi &= \left[\hat{p}_i, \frac{\hat{r}_i}{r} \right] \psi = [\hat{p}_i, \hat{r}_i] \frac{1}{r} \psi + \hat{r}_i \left[\hat{p}_i, \frac{1}{r} \right] \psi \\ &= -\frac{i\hbar \delta_{ii}}{r} \psi + \hat{r}_i \left[\hat{p}_i, (r_j r_j)^{-1/2} \right] \psi \\ &= -3 \frac{i\hbar}{r} \psi + (-i\hbar) \hat{r}_i \left[\partial_i \left((r_j r_j)^{-1/2} \psi \right) - (r_j r_j)^{-1/2} \partial_i \psi \right] \\ &= -3 \frac{i\hbar}{r} \psi - i\hbar \hat{r}_i \psi \left[\partial_i (r_j r_j)^{-1/2} \right] \\ &= -3 \frac{i\hbar}{r} \psi - i\hbar \hat{r}_i \psi \left[-\frac{1}{2} (r_j r_j)^{-3/2} \cdot (\delta_{ij} r_j + r_j \delta_{ij}) \right] \\ &= -3 \frac{i\hbar}{r} \psi + i\hbar \frac{\hat{r}_i r_i}{r^3} \psi \stackrel{(*)}{=} -3 \frac{i\hbar}{r} \psi + i\hbar \frac{r_i r_i}{r^3} \psi \\ &= -3 \frac{i\hbar}{r} \psi + \frac{i\hbar}{r} \psi = -2 \frac{i\hbar}{r} \psi \end{aligned} \quad (3.3)$$

waarbij in (*) de definitie van de positie-operator gebruikt werd: $\hat{\vec{r}}\psi = \vec{r}\psi$. Dit resultaat invullen in vergelijking 3.2 levert

$$\begin{aligned} \hat{p}_r &= \frac{1}{2} \left(2 \frac{\hat{\vec{r}}}{r} \cdot \hat{\vec{p}} - 2i\hbar \frac{1}{r} \right) = -i\hbar \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{\nabla} + \frac{1}{r} \right) \\ &= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \end{aligned} \quad (3.4)$$

waarbij we in de laatste vergelijking gebruik hebben gemaakt van de nabla-operator in sferische coördinaten (voor een afleiding, zie appendix C):

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\varphi \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \vec{e}_\theta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (3.5)$$

Stap 3: $\hat{p}_r^2$

We moeten nu enkel nog $\hat{p}_r$ kwadrateren.

$$\begin{aligned}\hat{p}_r^2 \psi &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \psi \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \psi + \frac{1}{r^2} \psi \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi - \frac{1}{r^2} \psi + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \psi + \frac{1}{r^2} \psi \right) = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi\end{aligned}\quad (3.6)$$

Stap 4: afwerken

Uit het vorige volgt nu dat

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2}\quad (3.7)$$

Als de potentiaal sferisch symmetrisch is, dan vinden we de gevraagde Hamiltoniaan.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \right) + V(r)\quad (3.8)$$

12. Introduceer $R_{El}(r)$ als eigentoestand van de sferisch symmetrische Hamiltoniaan met $\hat{\mathbf{L}}^2 |R_{El}(r)\rangle = \hbar^2 l(l+1) |R_{El}(r)\rangle$ en bewijs dat $R_{El}(r) \propto r^l$ in de limiet $r \rightarrow 0$.

Uit de gegevens weten we dat

$$\begin{aligned}\hat{H} R_{El}(r) &= E R_{El}(r) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{El}(r) + (V(r) - E) R_{El}(r) &= 0 \\ \Rightarrow \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] R_{El}(r) &= 0\end{aligned}\quad (3.9)$$

We beschouwen nu een potentiaal die naar nul gaat op oneindig: $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$. We kunnen vergelijking 3.9 dan herschrijven door $u_{El}(r) = r R_{El}(r)$ te introduceren, waarvoor we de eerste 2 afgeleiden gegeven worden door de onderstaande uitdrukking.

$$\begin{aligned}u'_{El}(r) &= R_{El}(r) + r R'_{El}(r) \quad \wedge \quad u''_{El}(r) = 2R'_{El}(r) + r R''_{El}(r) \\ \Rightarrow \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{El}(r) &= \left(\frac{u''_{El}(r)}{r} - \frac{2}{r} R'_{El}(r) \right) + \frac{2}{r} R'_{El}(r) = \frac{u''_{El}(r)}{r}\end{aligned}\quad (3.10)$$

Als we dit resultaat invullen in vergelijking 3.9, dan vinden we

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dr^2} u_{El}(r) - \left(\frac{2m}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{El}(r) &= -\frac{2m}{\hbar^2} E u_{El}(r) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_{El}(r) + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u_{El}(r) &= E u_{El}(r)\end{aligned}\quad (3.11)$$

Bovenstaande vergelijking is geldig zolang $r > 0$, in $r = 0$ moeten we echter een randvoorwaarde opleggen, namelijk dat $R_{El}(r)$ eindig is in de oorsprong, of dus dat $u_{El}(0) = 0$.

Beschouw de volgende twee ansatzen voor $V(r)$ en $u_{El}(r)$.

$$\begin{aligned}V(r) &= r^p \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \quad (b_0 \neq 0 \quad \wedge \quad p \geq -1) \\ u_{El}(r) &= r^s \sum_{k=0}^{\infty} c_k r^k \quad (c_0 \neq 0)\end{aligned}\quad (3.12)$$

De vereiste dat $p \geq -1$ komt neer op eisen dat de potentiaal $V(r)$ niet meer singulier mag zijn dan $\frac{1}{r}$ in de oorsprong.

Deze ansatzen ingeven in vergelijking 3.11 geeft

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}(s+k)(s+k-1)c_k r^{s+k-2} + \frac{\hbar^2}{2m}l(l+1)c_k r^{s+k-2} + \sum_{n=0}^k b_{k-n}c_n r^{s+p+k} \right\} = E \sum_{k=0}^{\infty} c_k r^{s+k} \quad (3.13)$$

In de laatste term van het linker lid werd gebruik gemaakt van het Cauchy-product van 2 machtreeksen:

$$\left(\sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i x^i \right) \left(\sum_{j=0}^{\infty} \beta_j x^j \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^k \alpha_{k-l} \beta_l x^k \quad (3.14)$$

We willen nu uit de indicieële vergelijking (dit is de vergelijking waaraan de coëfficiënten van de laagste macht in r voldoen) de voorwaarde op s vinden. We zien snel in dat de laagste macht van r $s-2$ bedraagt, waarbij we dan uiteraard kijken naar $k = 0$. Mits $p \geq -1$ dragen enkel de eerste twee termen van vergelijking 3.14 bij aan de indicieële vergelijking. Dit levert, na het weg delen van de gemeenschappelijke factoren

$$\begin{aligned} s(s-1) &= l(l+1) \\ \iff s(s-1) - l(l+1) &= 0 \\ \iff s^2 - l^2 - (s+l) &= 0 \\ \iff (s+l)(s-l-1) &= 0 \\ \implies s = -l \quad \vee \quad s = l+1 \end{aligned} \quad (3.15)$$

Mits $l \geq 0$ voldoet $s = -l$ niet aan de randvoorwaarde dat $R_{El}(r)$ eindig is in $r = 0$, dit wordt een irreguliere oplossing genoemd. De reguliere oplossing $s = l+1$ resulteert in het feit dat in de oorsprong $u_{El}(r) \propto r^{l+1} \implies R_{El}(r) \propto r^l$ in de limiet $r \rightarrow 0$.

13. Toon aan dat voor een vrij deeltje met $l = 0$ de reguliere oplossing $R_{E0}(r) \propto \frac{\sin(kr)}{r}$.

Beschouw opnieuw de radiële golfvergelijking

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] R_{El}(r) = 0 \quad (3.16)$$

Nu is voor een vrij deeltje $V(r) = 0$ zodat we voor $l = 0$ de vergelijking reduceert tot

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 \right] R_{E0}(r) = 0 \quad (3.17)$$

waarbij $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ of equivalent $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Nemen we nu vergelijking 3.10 in acht nemen, dan vinden we een simpele differentiaalvergelijking.

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) u_{E0}(r) = 0 \quad (3.18)$$

Deze vergelijking heeft 2 lineair onafhankelijke oplossingen: $u_{E0}(r) = \sin(kr)$ en $u_{E0}(r) = \cos(kr)$. Merk op dat enkel de eerste oplossing regulier is ($\sin(0) = 0$) zodanig dat enkel voor deze oplossing $R_{E0}(r)$ eindig blijft in de oorsprong. Mits $u_{E0}(r) = r R_{E0}(r)$, vinden we finaal dat

$$R_{E0}(r) \propto \frac{\sin(kr)}{r} \quad \text{met } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (3.19)$$

3.2 Waterstofatoom

14. Toon aan dat voor 2 deeltjes met massa m_1 en m_2 die interageren via een potentiaal $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ dat de Schrödinger vergelijking ontkoppelt tot 2 triviale bewegingen: de massa-middelpuntsbeweging en de relatieve beweging.

De Hamiltoniaan van het systeem wordt gegeven door

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\vec{p}}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (3.20)$$

en de Schrödinger vergelijking is dan

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_{\vec{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_{\vec{r}_2}^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \quad (3.21)$$

Voor een 2-lichaamsprobleem is het makkelijker om over te schakelen tot de relatieve coördinaat $\vec{r}$ en de positie van het massa middelpunt $\vec{R}$.

$$\begin{aligned} \vec{r} &:= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \vec{R} &:= \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Verder introduceren we ook de totale massa M en de gereduceerde massa μ .

$$\begin{aligned} M &:= m_1 + m_2 \\ \mu &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Hiermee zullen we nu de afgeleiden in de Schrödinger vergelijking herschrijven via de kettingregel.

$$\begin{aligned} &\begin{cases} \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} = (\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \vec{r}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} + (\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \vec{R}) \vec{\nabla}_{\vec{R}} = \vec{\nabla}_{\vec{r}} + \frac{m_1}{M} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \\ \vec{\nabla}_{\vec{r}_2} = (\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \vec{r}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} + (\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \vec{R}) \vec{\nabla}_{\vec{R}} = -\vec{\nabla}_{\vec{r}} + \frac{m_2}{M} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \end{cases} \\ \Rightarrow &\begin{cases} \vec{\nabla}_{\vec{r}_1}^2 = \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 + \frac{2m_1}{M} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \frac{m_1^2}{M^2} \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 \\ \vec{\nabla}_{\vec{r}_2}^2 = \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 - \frac{2m_2}{M} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \frac{m_2^2}{M^2} \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 \end{cases} \\ \Rightarrow &-\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_{\vec{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_{\vec{r}_2}^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 \end{aligned} \quad (3.24)$$

De Schrödinger vergelijking 3.21 wordt nu herschreven als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{R}, \vec{r}, t) \quad (3.25)$$

We kunnen nu scheiding der veranderlijken toepassen, we schrijven de golffunctie als een product van 3 functies: één die enkel afhankelijk is van de positie van het massa middelpunt $\vec{R}$, één die enkel afhangt van de relatieve coördinaat $\vec{r}$, en één die de tijdsevolutie beschrijft.

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = \Phi(\vec{R}) \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_{MM} + E) t} \quad (3.26)$$

Dit invullen in de Schrödinger vergelijking 3.21 levert

$$\begin{aligned}
(E_{MM} + E)\Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{MM}+E)t} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Phi(\vec{R})\vec{\nabla}_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{MM}+E)t} \\
&\quad -\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2\Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{MM}+E)t} \\
&\quad + V(\vec{r})\Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{MM}+E)t} \\
\Rightarrow (E_{MM} + E)\Phi(\vec{R})\psi(\vec{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Phi(\vec{R})\vec{\nabla}_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2M}\left(\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2\Phi(\vec{R})\right)\psi(\vec{r}) \\
&\quad + V(\vec{r})\Phi(\vec{R})\psi(\vec{r}) \\
\Rightarrow E_{MM} + E &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi(\vec{r})}\vec{\nabla}_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\Phi(\vec{R})}\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2\Phi(\vec{R}) \\
&\quad + V(\vec{r})
\end{aligned} \tag{3.27}$$

$$\Rightarrow E_{MM} + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\Phi(\vec{R})}\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2\Phi(\vec{R}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi(\vec{r})}\vec{\nabla}_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) - E$$

Het linker lid van de vergelijking is nu enkel afhankelijk van $\vec{R}$, terwijl het rechter lid enkel afhankelijk is van $\vec{r}$. Door de aanwezigheid van de constanten E_{MM} en E kan het niet anders dan dat beide leden apart 0 zijn.

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_{\vec{R}}^2\Phi(\vec{R}) &= E_{MM}\Phi(\vec{R}) \\
\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) &= E\psi(\vec{r})
\end{aligned} \tag{3.28}$$

We zijn er nu in geslaagd de Schrödinger vergelijking te ontkoppelen in 2 triviale beweging: de beweging van het massa middelpunt met energie E_{MM} , en de relatieve beweging met energie E . De totale energie van het systeem bedraagt uiteraard $E_{tot} = E_{MM} + E$.

15. Voer het hoofdkwantumgetal n en het radiaal kwantumgetal n_r in om het finaal spectrum $E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2}\frac{e^4}{n^2}$ van het waterstofatoom te vinden met Hamiltoniaan $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$ via de dimensieloze parameter $\rho = \sqrt{\frac{-8\mu E}{\hbar^2}}r$ en de positief reële parameter $n = \frac{e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{-\mu}{2E}} = \alpha\sqrt{\frac{-\mu c^2}{2E}}$ met $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$.

Beschouw de radiale Schrödinger vergelijking.

$$\begin{aligned}
\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r))\right]R_{El}(r) &= 0 \\
\Rightarrow \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\right]R_{El}(r) &= 0
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Vervolgens schakelen we over tot de dimensieloze parameter ρ .

$$\begin{aligned}
\rho &= \sqrt{\frac{-8\mu E}{\hbar^2}}r \\
\Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{r} = \sqrt{\frac{-8\mu E}{\hbar^2}}\frac{1}{\rho} \\ \frac{d}{dr} = \frac{d\rho}{dr}\frac{d}{d\rho} = \sqrt{\frac{-8\mu E}{\hbar^2}}\frac{d}{d\rho} \end{cases} \\
\Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{r^2} = -\frac{8\mu E}{\hbar^2}\frac{1}{\rho^2} \\ \frac{1}{r}\frac{d}{dr} = -\frac{8\mu E}{\hbar^2}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} \\ \frac{d^2}{dr^2} = -\frac{8\mu E}{\hbar^2}\frac{d^2}{d\rho^2} \end{cases}
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Deze resultaten invullen in de Schrödinger vergelijking 3.29 levert

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{8\mu E}{\hbar^2} \frac{d^2}{d\rho^2} - 2 \cdot \frac{8\mu E}{\hbar^2} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + l(l+1) \frac{8\mu E}{\hbar^2} \frac{1}{\rho^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{\hbar^2} \sqrt{\frac{8\mu E}{\hbar^2}} \frac{1}{\rho} \right] R_{El}(\rho) = 0 \\ \Rightarrow & \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4} - \frac{e^2}{4E} \sqrt{\frac{8\mu E}{\hbar^2}} \frac{1}{\rho} \right] R_{El}(\rho) = 0 \end{aligned} \quad (3.31)$$

Als we rekening houden met het feit dat het elektron gebonden is ($E < 0$), dan kunnen we de laatste term herschrijven

$$-\frac{e^2}{4E} \sqrt{\frac{8\mu E}{\hbar^2}} = +\frac{e^2}{4|E|} \sqrt{\frac{8\mu E}{\hbar^2}} = \frac{e^2}{4\hbar} \sqrt{-\frac{8\mu E}{E^2}} = \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{-\frac{\mu}{2E}} = n \quad (3.32)$$

Dit geeft ons als finale uitdrukking voor de radiale Schrödinger vergelijking 3.29

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} \right) \right] R_{El}(\rho) = 0 \quad (3.33)$$

Voor $\rho \rightarrow 0$ weten we al dat $R_{El}(\rho) \propto \rho^l$. Voor grote ρ vinden we

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\rho^2} R_{El}(\rho) &= \frac{1}{4} R_{El}(\rho) \\ \Rightarrow R_{El}(\rho) &\propto e^{\pm \rho/2} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Als we normeerbare oplossingen willen voor vergelijking 3.33, dan moeten we als randvoorwaarde stellen dat $R_{El}(\rho) \propto e^{-\rho/2}$ in de limiet $\rho \rightarrow \infty$. Om de Schrödinger vergelijking op te lossen stellen we

$$R_{El}(\rho) = C_{El} \rho^l e^{-\rho/2} \omega_{El}(\rho) \quad (3.35)$$

als ansatz voor, waarbij C_{El} een normeringsconstante is. Voordat we deze in vergelijking 3.33 invullen, zoeken we eerst alvast de afgeleiden naar ρ van $R_{El}(\rho)$. Om notatie kort te houden schrijven we in het vervolg ω in plaats van $\omega_{El}(\rho)$.

$$\begin{aligned} R_{El}(\rho) &= C_{El} \rho^{l-2} e^{-\rho/2} [\rho^2 \omega] \\ R'_{El}(\rho) &= C_{El} \rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left\{ l\rho\omega + \rho^2 \left[\omega' - \frac{1}{2}\omega \right] \right\} \\ R''_{El}(\rho) &= C_{El} \rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left\{ l(l-1)\omega + \rho[-l\omega + 2l\omega'] + \rho^2 \left[\frac{1}{4}\omega - \omega' + \omega'' \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Ik heb er hier voor gekozen om de afgeleiden hier niet helemaal uit te werken. Wel heb ik ze in een vorm geschreven waarin ze relatief makkelijk⁴ terug te vinden zijn. Voor zij die dapper of dwaas genoeg zijn staat de volledige uitwerking in appendix D.

We vullen nu deze resultaten in in vergelijking 3.33, waar we onmiddellijk al de gemeenschappelijke voorfactor $C_{El} \rho^{l-2} e^{-\rho/2}$ wegdelzen.

$$\begin{aligned} & \left[l(l-1)\omega + \rho l(2\omega' - \omega) + \rho^2 \left(\frac{1}{4}\omega - \omega' + \omega'' \right) \right] + \left[2l\omega \right. \\ & \quad \left. + 2\rho \left(-\frac{1}{2}\omega + \omega' \right) \right] + \left[-l(l+1)\omega - \frac{1}{4}\rho^2\omega + n\rho\omega \right] = 0 \\ \Rightarrow & \rho^2\omega'' + [(2l+2)\rho - \rho^2] \omega' + \left[l^2 - l - \rho l + \frac{1}{4}\rho^2 + 2l - \rho \right. \\ & \quad \left. - l^2 - l - \frac{1}{4}\rho^2 + n\rho \right] \omega = 0 \\ \Rightarrow & \rho\omega'' + [(2l+2) - \rho] \omega' + [n - l - 1] \omega = 0 \quad (\text{gedeeld door } \rho) \end{aligned} \quad (3.37)$$

Om deze differentiaalvergelijking op te lossen gebruiken we de methode van Frobenius met als ansatz

$$\omega_{El}(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k \quad (3.38)$$

⁴Neem dat met een goede lepel zout

wat leidt tot het onderstaande.

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\infty} [c_k k(k-1)\rho^{k-1} + c_k k(2l+2)\rho^{k-1} - c_k k\rho^k + c_k(n-l-1)\rho^k] = 0 \\ \implies & \sum_{k=0}^{\infty} [c_k k(k+2l+1)\rho^{k-1} + c_k(n-l-k-1)\rho^k] = 0 \end{aligned} \quad (3.39)$$

In de eerste term valt de $k=0$ bijdrage weg, we substitueren daarom $k' = k-1$ die ook van $0 \rightarrow \infty$ gaat.

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\infty} [c_{k+1}(k+1)(k+2l+2) + c_k(n-l-k-1)]\rho^k = 0 \\ \implies & c_{k+1} = \frac{l+k+1-n}{(k+1)(k+2l+2)} c_k \end{aligned} \quad (3.40)$$

We zien dat voor grote k de coëfficiënten elkaar opvolgen als $c_{k+1} = \frac{1}{k} c_k$. Deze asymptotische verhouding van opeenvolgende coëfficiënten komt overeen met die van de reeksontwikkeling van $\rho^p e^\rho$ met $p \in \mathbb{N}$, wat geen normeerbare functie is. Al willen we een fysisch normeerbare functie, dan moet de reeks afbreken na een eindig aantal termen. Dit zal gebeuren wanneer de teller in vergelijking 3.40 nul wordt. Mits $l, k \in \mathbb{N}$, geldt ook dat $n \in \mathbb{N}$. De reeks loopt door zolang

$$k \leq n-1-l \quad (3.41)$$

Dit levert ook meteen de voorwaarde op n opdat de reeks zou kunnen afbreken.

$$\begin{aligned} & k+l+1 \leq n \\ \implies & 1 \leq n \quad (l, k \geq 0) \end{aligned} \quad (3.42)$$

We herlabelen nu k als het radiaal kwantumgetal $n_r \geq 0$, en we verwijzen naar $n = n_r + l + 1$ als het hoofdkwantumgetal.

We kunnen nu ook de energie van het waterstof atoom uitdrukken als functie van n .

$$\begin{aligned} n &:= \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{-\mu}{2E_n}} \\ \implies \frac{2E_n}{\mu} &= -\frac{e^4}{\hbar^2 n^2} \\ \implies E_n &= -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \end{aligned} \quad (3.43)$$

3.3 Het ijkprincipe

16. Toon aan dat de Schrödinger vergelijking voor een deeltje in een elektromagnetisch veld $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 + eV \right] \psi$ invariant gelaten wordt onder de ijkingstransformatie waarin $\vec{A}'(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t) + \vec{\nabla}(\chi'(\vec{x}, t))$, $V'(\vec{x}, t) = V(\vec{x}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \chi(\vec{x}, t)$ en $\psi'(\vec{x}, t) = e^{\frac{ie}{\hbar c} \chi(\vec{x}, t)} \psi(\vec{x}, t)$

We werken dit bewijs uit in 3 stappen. In wat volgt laten we de afhankelijkheid van de functies weg, en schrijven we $\alpha = \frac{ie}{\hbar c}$.

Stap 1: eerste term

$$\begin{aligned} (\vec{\nabla} - \alpha \vec{A}') \psi' &= (\vec{\nabla} - \alpha \vec{A} - \alpha(\vec{\nabla} \chi)) e^{\alpha \chi} \psi \\ &= e^{\alpha \chi} (\alpha(\vec{\nabla} \chi) + \vec{\nabla} - \alpha \vec{A} - \alpha(\vec{\nabla} \chi)) \psi \\ &= e^{\alpha \chi} (\vec{\nabla} - \alpha \vec{A}) \psi \end{aligned} \quad (3.44)$$

Merk op dat we hier met $(\vec{\nabla} \chi)$ bedoelen dat de afgeleide niet meer inwerkt op de golf functie ψ .

Stap 2: kwadrateren

$$\begin{aligned} \left(\vec{\nabla} - \alpha \vec{A}'\right)^2 \psi' &= \left(\vec{\nabla} - \alpha \vec{A} - \alpha(\vec{\nabla}\chi)\right) e^{\alpha\chi} \left(\vec{\nabla} - \alpha \vec{A}\right) \psi \\ &= e^{\alpha\chi} \left(\vec{\nabla} - \alpha \vec{A}\right)^2 \psi \end{aligned} \quad (3.45)$$

Stap 3: tijdsafgeleide en potentiaal

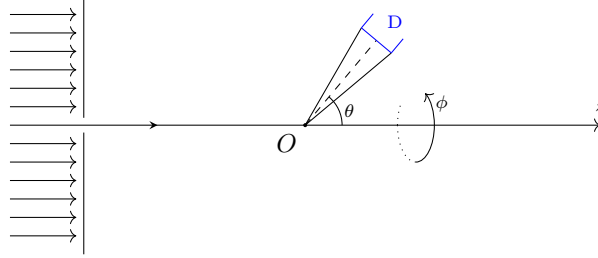
$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eV'\right) \psi' &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{\alpha\chi} \psi) - e \left(V - \frac{1}{c} \left(\frac{\partial}{\partial t} \chi\right)\right) e^{\alpha\chi} \psi \\ &= i\hbar \alpha \left(\frac{\partial}{\partial t} \chi\right) e^{\alpha\chi} \psi + i\hbar e^{\alpha\chi} \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi\right) - eV e^{\alpha\chi} \psi + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial}{\partial t} \chi\right) e^{\alpha\chi} \psi \\ &= e^{\alpha\chi} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eV\right) \psi \quad \left(i\hbar \alpha := -\frac{e}{c}\right) \end{aligned} \quad (3.46)$$

Invoeren van vergelijkingen 3.45 en 3.46 in de Schrödinger vergelijking (en dus het uitvoeren van de ijkingstransformatie) levert terug de Schrödinger vergelijking.

4 Verstrooiingstheorie

4.1 Verstrooiingsexperimenten

17. Beschrijf een verstrooiingsexperiment waarin initieel vrije, mono-energetische deeltjes invallen op een verstrooiingscentrum.



Figuur 3: Een gecollimeerde bundel valt in op een verstrooiingscentrum.

Beschouw een mono-energetische bundel deeltjes die gecollimeerd is zodat ze invalt als een nauwe bundel op een verstrooiingscentrum O zoals weergegeven in figuur 3. De deeltjes die in de richting (θ, ϕ) bewegen worden gemeten in de detector D die een ruimtehoek $d\Omega$ bestrijkt. Het aantal deeltjes dat per tijdseenheid de detector bereikt is $Nd\Omega$ en is evenredig met de invallende flux $F = \rho v$, waarbij ρ de deeltjesdichtheid is en v hun snelheid. De flux F is het aantal deeltjes dat per tijds- en oppervlakte-eenheid een oppervlak loodrecht op de invallende bundel kruist. We hebben dus dat

$$\begin{aligned} Nd\Omega &= Fd\sigma \\ \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{N}{F} \end{aligned} \quad (4.1)$$

dit noemt men de differentiële werkzame doorsnede, een goede naam mits de eenheid van de flux F een aantal deeltjes per tijds- en oppervlakte-eenheid is, waardoor de eenheid van N wegdeelt en oppervlakte overblijft.

De totale werkzame doorsnede wordt gegeven door

$$\sigma_{tot} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (4.2)$$

4.2 Greense functies

18. Introduceer de verstrooiingsamplitude $f(k, \Omega)$ en maak duidelijk dat in de asymptotische limiet $r \rightarrow \infty$ $\psi(\vec{r}) \rightarrow e^{ikz} \frac{e^{ikr}}{r}$ en bewijs dat $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \Omega)|^2$.

Beschouw een elastische verstrooiing in het referentiestelsel van het massa-middelpunt. De Schrödinger vergelijking van de deeltjes is dan

$$(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = \mathcal{U}(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (4.3)$$

met Δ de laplaciaan, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ en $\mathcal{U}(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r})$. Veronderstel verder dat $V(\vec{r})$ van korte dracht is zodat ze sneller afneemt dan r^{-1} wanneer $r \rightarrow \infty$, de Schrödinger vergelijking reduceert in dat geval tot de vrije Schrödinger vergelijking.

$$(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = 0 \quad (4.4)$$

In deze limiet is er zowel een ingaande gecollimeerde golf als een uitgaande verstrooide golf.

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow \psi_{in}(\vec{r}) + \psi_v(\vec{r}) \quad (4.5)$$

De inkomende golf is een gecollimeerde, mono-energetische bundel, die we voor het gemak langs de z -as leggen, en is dus een vlakke golf

$$\psi_{in}(\vec{r}) = e^{ikz} \quad (4.6)$$

met een deeltjesdichtheid $\rho_{in} = |\psi_{in}(\vec{r})|^2 = 1$ zodat de flux gegeven wordt door

$$F_{in} = \rho_{in}v = v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} \quad (4.7)$$

Ver van het verstrooiingscentrum O is de uitgaande golf een radiale stroom van deeltjes.

$$\psi_v(\vec{r}) = f(k, \Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.8)$$

waarbij $f(k, \Omega)$ de verstrooiingsamplitude is die bepaalt hoeveel deeltjes in een bepaalde richting wegstromen. De golf functie die aan de Schrödinger vergelijking voldoet moet dus, volgens vergelijkingen 4.5, 4.6 en 4.8, aan de onderstaande randvoorwaarde voldoen in de limiet $r \rightarrow \infty$.

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow e^{ikz} + |f(k, \Omega)| \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.9)$$

Verder vinden we dat de deeltjesdichtheid van de uitgaande golf gegeven wordt door $\rho_v = |\psi_v(\vec{r})|^2 = \frac{|f(k, \Omega)|^2}{r^2}$. Omdat de verstrooiing elastisch is (en er dus geen kinetische energie verloren gaat), hebben de verstrooide deeltjes een radiale snelheid $v_r = \frac{\hbar k}{m}$. Het aantal deeltjes dat per tijdseenheid in de ruimtehoek $d\Omega$ rond (θ, ϕ) verstrooid wordt is dan

$$N(\Omega)d\Omega = F_v d\sigma = \rho_v v_r (r^2 d\Omega) = \frac{\hbar k}{m} |f(k, \Omega)|^2 d\Omega \quad (4.10)$$

mits de oppervlakte van een fractie van een bol dat een ruimtehoek $d\Omega$ bestrijkt gegeven wordt door

$$d\sigma = 4\pi r^2 \frac{d\Omega}{4\pi} = r^2 d\Omega \quad (4.11)$$

De differentiële werkzame doorsnede is dan

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N}{F_{in}} = |f(k, \Omega)|^2 \quad (4.12)$$

19. Toon aan dat $\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) - \int \mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') \mathcal{U}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r'$ de oplossing is van de Schrödinger vergelijking $(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = \mathcal{U}(\vec{r})\psi(\vec{r})$ waarbij $\varphi(\vec{r})$ de vrije-deeltjes oplossing is en de Greense functie $\mathcal{G}$ gegeven wordt door $(\Delta + k^2)\mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}')$. Bereken verder de Greense functie waarbij je je beperkt tot de oplossing van een uitgaande sferische golf.

We checken eerst dat $\psi(\vec{r})$ een oplossing is. We weten al dat mits $\varphi(\vec{r})$ de vrije-deeltjes oplossing is dat slechts een triviale bijdrage levert.

$$(\Delta + k^2)\varphi(\vec{r}) = 0 \quad (4.13)$$

We hoeven dus enkel de integraal in rekening te brengen.

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) &= - \int (\Delta + k^2)\mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') \mathcal{U}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r' \\ &= \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') \mathcal{U}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r' \\ &= \mathcal{U}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Om de Greense functie te vinden, ontwikkelen we deze eerst in vlakke golven

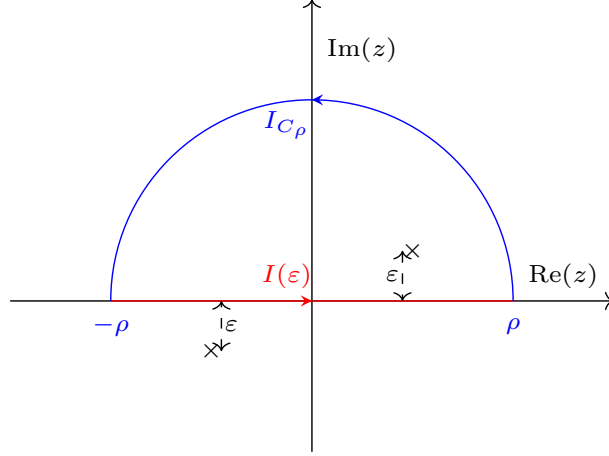
$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \tilde{\mathcal{G}}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 q \\ \implies (\Delta + k^2)\mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int (-q^2 + k^2) \tilde{\mathcal{G}}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 q \\ \text{Nu is ook } \delta(\vec{r} - \vec{r}') &:= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d^3 q = -(\Delta + k^2)\mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') \\ \implies (-q^2 + k^2) \tilde{\mathcal{G}}(\vec{q}) &= -1 \\ \implies \tilde{\mathcal{G}}(\vec{q}) &= \frac{1}{q^2 - k^2} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Kiezen we nu de richting van $\vec{r} - \vec{r}'$ langs de q_z -as zodat $\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') = q|\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta$, dan vinden we

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{q^2 - k^2} d^3 q = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{+\infty} q^2 \frac{e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta}}{q^2 - k^2} dq \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{+\infty} \frac{q^2}{q^2 - k^2} e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta} dq \\ &= \frac{1}{4\pi^2 i} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_0^{+\infty} \frac{q}{q^2 - k^2} \left(e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|} - e^{-iq|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) dq \end{aligned} \quad (4.16)$$

Substitueren we als volgt in de tweede term $q' = -q \implies dq = -dq'$ zodat de grenzen wijzigen naar als $0 \rightarrow 0$ en $+\infty \rightarrow -\infty$, dan vinden we dat

$$\mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi^2 i} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|}}{q^2 - k^2} dq \quad (4.17)$$



Figuur 4: Contour voor de complexe integraal voor een uitgaande radiale golf functie.

Het is overduidelijk dat het integrandum singulier is in de punten $q = \pm k$, om deze integraal uit te rekenen moeten we dus in het complexe vlak werken. Beschouw in plaats van het gegeven integrandum de complexe functie

$$f(z) = \frac{z}{(z - (k + i\varepsilon))(z - (k - i\varepsilon))} e^{iz|\vec{r} - \vec{r}'|} = g(z) e^{iz|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{F(z)}{Q(z)} e^{iz|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (4.18)$$

We berekenen nu de integraal volgens de contour die weergegeven staat in figuur 4. Het is duidelijk dat in de limiet $\varepsilon \rightarrow 0$ en $\rho \rightarrow \infty$ dat de integraal langs $I(\varepsilon)$ overeenkomt met de gewenste integraal. Om de integraal langs de contour te berekenen gebruiken de residustelling (vergelijking E.1 van appendix E) en het lemma van Jordan (vergelijking E.5 van appendix E).

De residustelling geeft ons al dat

$$I(\varepsilon) + I_{C_\rho} = 2\pi i \text{Res}(f, k + i\varepsilon) \quad (4.19)$$

We zien dat $\deg Q(z) = \deg F(z) + 1$ zodat het lemma van Jordan garandeert dat

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} I_{C_\rho} \lim_{\rho \rightarrow \infty} \int_{C_\rho} f(z) dz = 0 \quad (4.20)$$

Nu hoeven we enkel nog maar de residu te berekenen.

$$\begin{aligned} \text{Res}(f, k + i\varepsilon) &= \lim_{z \rightarrow k + i\varepsilon} (z - (k + i\varepsilon)) f(z) = \frac{(k + i\varepsilon) e^{i(k + i\varepsilon)|\vec{r} - \vec{r}'|}}{k + i\varepsilon - (-k - i\varepsilon)} \\ \implies \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \text{Res}(f, k + i\varepsilon) &= \frac{1}{2} e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Tot slot hebben we dat

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{\rho \rightarrow \infty} I(\varepsilon) &= \pi i e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \\ \implies \mathcal{G}^+(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Merk op dat we hier technisch gezien één pool compleet verwaarlozen door deze buiten de contour te laten. Wanneer we de inkomende radiale golfoplossing zoeken, zullen we de andere pool verwaarlozen. Het is pas door beide polen in rekening te brengen dat men de staande golfoplossing bekomt. Dit is tevens

ook het resultaat dat men zou bekomen al gebruik men de standaardmethoden om een complexe integraal op te lossen. Dit illustreer ik kort in appendix F.

20. Toon aan dat het asymptotisch gedrag van $\psi(\vec{r})$ zich inderdaad herleidt tot $\psi(\vec{r}) \rightarrow e^{ikz} + f(k, \Omega) \frac{e^{ikr}}{r}$ en geef een uitdrukking voor de verstrooiingsamplitude $f(k, \Omega)$.

$\varphi(\vec{r}) = e^{ikz}$ is een oplossing van de vrije golfvergelijking $(\Delta + k^2)\varphi(\vec{r}) = 0$. In dit verstrooiingsexperiment is de randvoorwaarde een uitgaande radiale golf, we hebben dus

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\vec{r} - \vec{r}') &= \mathcal{G}^+(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \\ \Rightarrow \psi(\vec{r}) &= \varphi(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int \mathcal{G}^+(\vec{r} - \vec{r}') \mathcal{U}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r' \\ \Rightarrow \psi(\vec{r}) &= e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \mathcal{U}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r'\end{aligned}\tag{4.23}$$

In de asymptotische limiet $r \rightarrow \infty$ kunnen we $|\vec{r} - \vec{r}'|$ in de exponentiële benaderen zoals hieronder.

$$\begin{aligned}|\vec{r} - \vec{r}'| &= [r^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}' + r'^2]^{1/2} = r \left[1 - \frac{2\hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{r}'}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \right]^{1/2} \\ &= r \left(1 - \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{r}'}{r} \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right) \approx r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \vec{r}'\end{aligned}\tag{4.24}$$

Hierbij is $\hat{\mathbf{r}}$ een eenheidsvector, en hebben we gebruik gemaakt van het binomiaal theorema. Om $|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1}$ te benaderen werken we analoog, maar snijden we de reeks vroeger af.

$$|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1} = \frac{1}{r} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right) \right)^{-1/2} \approx \frac{1}{r}\tag{4.25}$$

Nu vullen we vergelijkingen 4.24 en 4.25 in vergelijking 4.23 in, zodat

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= e^{ikz} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \mathcal{U}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r' \\ \Rightarrow f(k, \Omega) &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \mathcal{U}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r'\end{aligned}\tag{4.26}$$

4.3 Lippmann-Schwinger theorie

21. Leidt de Lippmann-Schwinger vergelijking af in de toestandsruimte $|\psi^+\rangle = |\phi\rangle + \hat{\mathcal{G}}_0^+(E) \hat{V} |\psi^+\rangle$. We berken ons dus weer tot een uitgaande radiale golfoplossing.

We splitsen de Hamiltoniaan als $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ met $\hat{H}_0$ de vrije Hamiltoniaan. Zij nu $|\phi\rangle$ en $|\psi\rangle$ eigentoestanden van $\hat{H}_0$ en $\hat{H}$ respectievelijk, beide met dezelfde eigenwaarde E . We veronderstellen dus dat ze beide hetzelfde continuüm spectrum hebben. Er geldt nu dat

$$\begin{aligned}(\hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi\rangle &= E |\psi\rangle \\ \Rightarrow (E - \hat{H}_0) |\psi\rangle &= \hat{V} |\psi\rangle = (E - \hat{H}_0) |\phi\rangle + \hat{V} |\psi\rangle \\ \Rightarrow |\psi\rangle &= |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi\rangle\end{aligned}\tag{4.27}$$

Merk op dat dit slechts een formele oplossing is mits $(E - \hat{H}_0)^{-1}$ singulier is wanneer het inwerkt op een eigentoestand. We geven dus de energie een infinitesimaal klein imaginair deel

$$|\psi^+\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E + i\varepsilon - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi^+\rangle = |\phi\rangle + \hat{\mathcal{G}}_0^+ \hat{V} |\psi^+\rangle\tag{4.28}$$

We wensen nu de matrix elementen $\frac{\delta(\vec{p}' - \vec{p})}{E + i\varepsilon - \frac{p'^2}{2m}}$ van $\hat{\mathcal{G}}_0^+$ te kennen in de configuratieruimte. $\hat{H}_0$ evalueert echter niet zo makkelijk in de configuratieruimte, we maken daarom gebruik van de resolutie van de

identiteit om het matrix element als tussenstap te evalueren in de impulsruimte.

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r} | \hat{\mathcal{G}}_0^+ | \vec{r}' \rangle &= \int d^3 p' \int d^3 p \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \hat{\mathcal{G}}_0^+ | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r}' \rangle \\
&= \int d^3 p' \int d^3 p \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \frac{\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle}{E + i\varepsilon - \frac{p'^2}{2m}} \langle \vec{p} | \vec{r}' \rangle \\
&= \int d^3 p' \int d^3 p \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \frac{\delta(\vec{p}' - \vec{p})}{E + i\varepsilon - \frac{p'^2}{2m}} \langle \vec{p} | \vec{r}' \rangle \\
&= \int d^3 p \frac{\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r}' \rangle}{E + i\varepsilon - \frac{p^2}{2m}}
\end{aligned} \tag{4.29}$$

waar we gebruik hebben gemaakt van de orthonormaliteit van de impulsruimte $\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p})$. Verder herkennen we ook de basisovergang tussen de configuratie- en de impulsruimte in het integrandum.

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \implies \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \\
\implies \langle \vec{r} | \hat{\mathcal{G}}_0^+ | \vec{r}' \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{E + i\varepsilon - \frac{p^2}{2m}}
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Nu gebruiken we de substitutie $\vec{p} = \hbar \vec{q} \implies p_i = \hbar q_i \implies dq_i = \frac{1}{\hbar} dp_i \implies d^3 q = \frac{1}{\hbar^3} d^3 p$. Als we deze substitutie nu doorvoeren en rekening houden met $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, dan vinden we het onderstaande.

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r} | \hat{\mathcal{G}}_0^+ | \vec{r}' \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\varepsilon - \frac{\hbar^2 q^2}{2m}} \\
&= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{k^2 + i\varepsilon' - q^2}
\end{aligned} \tag{4.31}$$

We hebben hier $\varepsilon' = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}$ geschreven, maar in het vervolg laten we apostrof weg, dit omdat het simpelweg een bijdrage is die infinitesimaal klein is, en we ze naar nul zullen doen naderen.

We zien wederom dat er singulariteiten in het integrandum zitten, we herschrijven deze even

$$\begin{aligned}
q^2 &= k^2 + i\varepsilon \\
\implies q &= \pm k \left(1 + \frac{i\varepsilon}{k^2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right)^{1/2} \\
&= \pm \left(k + \frac{i\varepsilon'}{2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right) \\
&\approx \pm \left(k + \frac{i\varepsilon}{2} \right)
\end{aligned} \tag{4.32}$$

waar we opnieuw $\varepsilon' = \frac{i\varepsilon}{2k} \equiv \varepsilon$ hebben toegepast met een analoge redenering. We herschrijven nu finaal de integraal als

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathcal{G}}_0^+ | \vec{r}' \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{(q - (k + \frac{i\varepsilon}{2}))(q + (k + \frac{i\varepsilon}{2}))} \tag{4.33}$$

We zien dat in de limiet $\varepsilon \rightarrow 0$ dat de integraal op een factor $-\frac{\hbar^2}{2m}$ identiek is aan die in vergelijking 4.16, we hebben dus als formele oplossing voor een uitgaande radiale golf het onderstaande.

$$\langle \vec{r} | \hat{\mathcal{G}}_0^+ | \vec{r}' \rangle = \hat{\mathcal{G}}_0^+(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{G}^+(\vec{r} - \vec{r}') \tag{4.34}$$

en dit is dus de fysische Greense functie die we nodig hebben in de Lippmann-Schwinger vergelijking.

$$|\psi^+\rangle = |\phi\rangle + \hat{\mathcal{G}}_0^+ \hat{V} |\psi^+\rangle \tag{4.35}$$

22/23. Vindt nu de Born-reeks van $|\psi^+\rangle$. Wat is de Born approximatie?

We itereren nu de Lippmann-Schwinger vergelijking door de oplossing

$$|\psi^+\rangle = |\phi\rangle + \hat{\mathcal{G}}_0^+ \hat{V} |\psi^+\rangle \tag{4.36}$$

opnieuw in zichzelf in te vullen.

$$\begin{aligned} |\psi^+\rangle &= |\phi\rangle + \hat{\mathcal{G}}_0^+ \hat{V} |\psi^+\rangle + (\hat{\mathcal{G}}_0^+ \hat{V})^2 |\psi^+\rangle + (\hat{\mathcal{G}}_0^+ \hat{V})^3 |\psi^+\rangle + \dots \\ &= \left(\sum_{k=0}^{\infty} (\hat{\mathcal{G}}_0^+ \hat{V})^k \right) |\phi\rangle \end{aligned} \quad (4.37)$$

Het bovenstaande staat gekend als de Born-reeks. De Born approximatatie bestaat erin alles na eerste orde te laten vallen, zodat

$$|\psi^+\rangle \approx |\phi\rangle + \hat{\mathcal{G}}_0^+ \hat{V} |\phi\rangle \quad (4.38)$$

4.4 Partiële golfanalyse

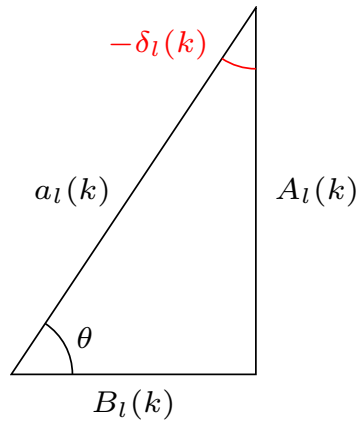
24. Bekijk het asymptotisch gedrag van de oplossingen van de Schrödinger vergelijking in een centrale potentiaal $V(\vec{r})$ die verdwijnt op oneindig. De oplossing is hier een lineaire combinatie van twee vrije oplossingen, de sferische Bessel- en Neumann functies. Voer de faseverschuiving in, gegeven dat in de asymptotische limiet $\rho \rightarrow \infty$ geldt dat $j_l(\rho) \rightarrow \frac{1}{\rho} \sin(\rho - \frac{l\pi}{2})$ en $n_l(\rho) \rightarrow -\frac{1}{\rho} \cos(\rho - \frac{l\pi}{2})$.

In een centrale potentiaal kan een oplossing van de Schrödinger vergelijking met $E > 0$ geschreven worden als $\psi_{klm}(\vec{r}) = R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$. In de asymptotische limiet reduceert de Schrödinger vergelijking tot de vrije radiale Schrödinger vergelijking

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) R_{kl}(r) = 0 \quad (4.39)$$

met als twee lineaire onafhankelijke oplossingen de sferische Bessel- en Neumann functies $j_l(kr)$ en $n_l(kr)$ zodat in de asymptotische limiet $r \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\rightarrow \frac{1}{kr} \left[A_l(k) \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - B_l(k) \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \right] \\ &\rightarrow \frac{1}{kr} \sqrt{A_l(k)^2 + B_l(k)^2} \left[\frac{A_l(k)}{\sqrt{A_l(k)^2 + B_l(k)^2}} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - \frac{B_l(k)}{\sqrt{A_l(k)^2 + B_l(k)^2}} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.40)$$



Figuur 5: Hulpschema om fase in te voeren

Al wil men deze uitdrukking herschrijven, dan is het handig dat we voorlopig verwijzen naar $kr - \frac{l\pi}{2}$ als θ om notatie kort te houden. Beschouw nu $A_l(k)$, $B_l(k)$ en $a_l(k) := \sqrt{A_l(k)^2 + B_l(k)^2}$ als 3 zijden van een rechthoekige driehoek met θ één van de hoeken. Opdat $R_{kl}(r)$ niet nul zou zijn, moet gelden dat

$$\frac{A_l(k)}{a_l(k)} = \sin \theta \quad \wedge \quad \frac{B_l(k)}{a_l(k)} = \cos \theta \quad (4.41)$$

Deze configuratie binnen een rechthoekige driehoek staat weergegeven in figuur 5. We werken dit nu verder uit om de uitdrukking te vereenvoudigen.

$$\begin{aligned}
R_{kl}(r) &\rightarrow \frac{a_l(k)}{kr} (\sin^2 \theta - \cos^2 \theta) \rightarrow -\frac{a_l(k)}{kr} \cos(2\theta) \rightarrow -\frac{a_l(k)}{kr} \sin\left(\frac{\pi}{2} - 2\theta\right) \\
&\rightarrow \frac{a_l(k)}{kr} \sin\left(2\theta - \frac{\pi}{2}\right) \rightarrow \frac{a_l(k)}{kr} \sin\left(\theta + \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)\right) \rightarrow \frac{a_l(k)}{kr} \sin(\theta - (-\delta_l(k))) \\
&\rightarrow \frac{a_l(k)}{kr} \sin(\theta + \delta_l(k))
\end{aligned} \tag{4.42}$$

Hierbij is $(-\delta_l(k))$ gedefinieerd als het complement van θ , maar we verwijzen er voortaan naar als de faseverschuiving, zodat uiteindelijk

$$\begin{aligned}
\tan(-\delta) &= \frac{B_l(k)}{A_l(k)} \\
\implies \delta_l(k) &= -\arctan\left(\frac{B_l(k)}{A_l(k)}\right)
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Ik weet ook niet waarom de faseverschuiving $\delta_l(k)$ zo gedefinieerd wordt in de cursus, de hoek in figuur 5 “ $-\delta_l(k)$ ” noemen leek me de enige methode om aan een min-teken te geraken voor de boogtangens.

25. Bepaal de verstrooiingsamplitude in termen van de faseverschuiving $\delta_l(k)$.

Voor een centrale potentiaal $V(\vec{r})$ en een bundel die invalt langs de z -as is $f(k, \Omega)$ onafhankelijk van de azimut ϕ en de asymptotische randvoorwaarde voor $r \rightarrow \infty$ wordt

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow e^{ikz} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \tag{4.44}$$

We kunnen dan $\psi(\vec{r})$ ontbinden in partiële golven, $f(k, \theta)$ in Legendre polynomen, en e^{ikz} in sferische harmonieken.

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}) &= \psi(r, \theta) = \sum_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta) \\
f(k, \theta) &= \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta) \\
e^{ikz} &= e^{ikr \cos \theta} = \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta)
\end{aligned} \tag{4.45}$$

Als we deze asymptotische limieten invullen in de randvoorwaarde 4.44, dan vinden we, na wegdelen van de Legendre polynomen, voor elke l de onderstaande randvoorwaarde.

$$R_{kl}(r) \rightarrow (2l+1) i^l j_l(kr) = (2l+1) f_l(k) \frac{e^{ikr}}{r} \tag{4.46}$$

Beschouw nu opnieuw het asymptotische gedrag van de sferische Bessel-functies $j_l(kr)$ en de radiale golf functies $R_{kl}(r)$.

$$\begin{aligned}
j_l(kr) &\rightarrow \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \\
&\rightarrow \frac{1}{2kri} (e^{ikr} i^{-l} - e^{-ikr} i^l) \\
R_{kl}(r) &\rightarrow \frac{a_l(k)}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right) \\
&\rightarrow \frac{a_l(k)}{2kri} (e^{ikr} i^{-l} e^{i\delta_l(k)} - e^{-ikr} i^l e^{-i\delta_l(k)})
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Als we dit nu invullen in vergelijking 4.46 dan krijgen we een gelijkheid in de asymptotische limiet.

$$\frac{a_l(k)}{2kri} (e^{ikr} i^{-l} e^{i\delta_l(k)} - e^{-ikr} i^l e^{-i\delta_l(k)}) = \frac{(2l+1)}{2kr} i^{l-1} (e^{ikr} i^{-l} - e^{-ikr} i^l) + (2l+1) f_l(k) \frac{e^{ikr}}{r} \tag{4.48}$$

Gelijk stellen van de coëfficiënten in e^{ikr} en e^{-ikr} levert een stelsel waaruit men de verstrooiingsamplitude kan bepalen.

$$\begin{aligned}
& \begin{cases} \frac{a_l(k)}{2kr} e^{i\delta_l(k)} i^{-l-1} &= \frac{(2l+1)}{2kr} i^{-1} + \frac{2k(2l+1)}{2kr} f_l(k) \\ \frac{a_l(k)}{2kr} e^{-i\delta_l(k)} i^{l-1} &= \frac{(2l+1)}{2kr} i^{2l-1} \end{cases} \\
& \begin{cases} a_l(k) e^{i\delta_l(k)} i^{-l-1} &= (2l+1) i^{-1} + 2k(2l+1) f_l(k) \\ a_l(k) &= (2l+1) i^l e^{i\delta_l(k)} \end{cases} \\
\Rightarrow e^{2i\delta_l(k)} i^{-1} &= i^{-1} + 2k f_l(k) \\
\Rightarrow f_l(k) &= \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ki} = \frac{e^{i\delta_l(k)}}{k} \sin(\delta_l(k)) \\
\Rightarrow f(k, \theta) &= \sum_l (2l+1) \frac{e^{i\delta_l(k)}}{k} \sin(\delta_l(k)) P_l(\cos \theta)
\end{aligned} \tag{4.49}$$

5 Benaderingstechnieken

5.1 Niet-ontaarde storingsrekening

26. Leg uit hoe men perturbatie reeksen opzet van tijdsonafhankelijke perturbaties. Bereken de eerste en tweede orde correcties op een niet-ontaard niveau $E_n^{(0)}$.

Beschouw een tijdsonafhankelijke Hamiltoniaan $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}'$ waarbij $\lambda \hat{V}'$ een kleine perturbatie voorstelt en $\hat{H}_0$ de ongestoorde Hamiltoniaan is met exact gekende energie-eigenwaarden en eigenfuncties die voldoen aan

$$\hat{H}_0 \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad \wedge \quad \left\langle \psi_i^{(0)} \left| \psi_j^{(0)} \right\rangle = \delta_{ij} \quad (5.1)$$

We wensen nu het Schrödinger probleem $\hat{H} \left| \psi_n \right\rangle = E_n \left| \psi_n \right\rangle$ op te lossen. Als $\lambda \rightarrow 0$ dan weten we in elk geval al dat

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n = E_n^{(0)} \quad \wedge \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left| \psi_n \right\rangle = \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (5.2)$$

Dit motiveert ons om de energie en de golffunctie te ontwikkelen als machtrekken, waarbij de index k de orde van de perturbatie aanduidt.

$$E_n = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)} \quad \wedge \quad \left| \psi_n \right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \left| \psi_n^{(k)} \right\rangle \quad (5.3)$$

Als we nu deze machtrekken invullen in de Schrödinger vergelijking, dan vinden we

$$\begin{aligned} & \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}' \right) \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \left| \psi_n^{(k)} \right\rangle = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)} \right) \left(\sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l \left| \psi_n^{(l)} \right\rangle \right) \\ \Leftrightarrow & \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \hat{H}_0 \left| \psi_n^{(k)} \right\rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \hat{V}' \left| \psi_n^{(k-1)} \right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^k \lambda^k E_n^{(l)} \left| \psi_n^{(k-l)} \right\rangle \\ \Rightarrow & \begin{cases} \hat{H}_0 \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \\ \hat{H}_0 \left| \psi_n^{(k)} \right\rangle + \hat{V}' \left| \psi_n^{(k-1)} \right\rangle = \sum_{l=0}^k E_n^{(l)} \left| \psi_n^{(k-l)} \right\rangle \quad k \geq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5.4)$$

waarbij we in de eerste overgang de substitutie $k+1 \rightarrow k$ hebben doorgevoerd in de tweede term, en het Cauchy product hebben gebruikt in het rechter lid. Nemen we nu met die onderste vergelijking het scalair product met $\left| \psi_n^{(0)} \right\rangle$, dan vinden we

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{H}_0 \right| \psi_n^{(k)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \psi_n^{(k-1)} \right\rangle = \sum_{l=0}^k E_n^{(l)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(k-l)} \right\rangle \right. \\ \Leftrightarrow & E_n^{(0)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(k)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \psi_n^{(k-1)} \right\rangle = \sum_{l=0}^k E_n^{(l)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(k-l)} \right\rangle \right. \end{aligned} \quad (5.5)$$

waarbij we gebruik hebben gemaakt van de hermiticiteit van de Hamiltoniaan.

Voor $k=1$ vinden we nu via de orthonormaliteit van de nulde orde golffuncties een uitdrukking voor de eerste orde energie-correctie.

$$\begin{aligned} & E_n^{(0)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right. \\ \Rightarrow & E_n^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle \end{aligned} \quad (5.6)$$

Voor $k=2$ vinden we nu een uitdrukking voor de tweede orde energie-correctie.

$$\begin{aligned} & E_n^{(0)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right. \\ \Leftrightarrow & E_n^{(2)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle - E_n^{(1)} \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{V}' - E_n^{(1)} \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle \end{aligned} \quad (5.7)$$

27. Vind de eerste orde correctie op de golffunctie en vindt hiermee een alternatieve uitdrukking voor $E_n^{(2)}$.

We ontwikkelen $|\psi_n^{(1)}\rangle$ in de complete orthogonale set $\{|\psi_i^{(0)}\rangle | \forall i\}$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} a_{nk}^{(1)} |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (5.8)$$

en substitueren dit resultaat in vergelijking 5.4 voor $k = 1$. Dit geeft ons

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{V}' |\psi_n^{(0)}\rangle &= E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |E_n^{(0)}\rangle \\ \iff (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \sum_{k=0}^{\infty} a_{nk}^{(1)} |\psi_k^{(0)}\rangle &= (E_n^{(1)} - \hat{V}') |\psi_n^{(0)}\rangle \end{aligned} \quad (5.9)$$

Nu nemen we hiermee het inproduct met $|\psi_l^{(0)}\rangle$.

$$\begin{aligned} (E_l^{(0)} - E_n^{(0)}) \sum_{k=0}^{\infty} a_{nk}^{(1)} \delta_{lk} &= E_n^{(1)} \delta_{ln} - V'_{ln} \\ \iff a_{nl}^{(1)} (E_l^{(0)} - E_n^{(0)}) &= E_n^{(1)} \delta_{ln} - V'_{ln} \\ \implies \begin{cases} E_n^{(1)} = V'_{nn} & l = n \\ a_{nl}^{(1)} = \frac{V'_{ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} & l \neq n \end{cases} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Hierbij is $V'_{ln} = \langle \psi_l^{(0)} | \hat{V}' | \psi_n^{(0)} \rangle$. Substitueren we nu vergelijkingen 5.8 en 5.10 in 5.7, dan vinden de finale uitdrukking.

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V}' - E_n^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle = \left\langle \psi_n^{(0)} \left| \hat{V}' - E_n^{(1)} \right| \sum_{k=0}^{\infty} a_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} \right\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(a_{nk}^{(1)} V'_{nk} - V'_{nn} a_{nk}^{(1)} \delta_{nk} \right) = \sum_{k \neq n}^{\infty} a_{nk}^{(1)} V'_{nk} \\ &= \sum_{n \neq k}^{\infty} \frac{V'_{kn} V'_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{n \neq k}^{\infty} \frac{(V'_{nk})^* V'_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \sum_{k \neq n}^{\infty} \frac{|V'_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned} \quad (5.11)$$

5.2 Ontaarde storingsrekening

28. Vind de eerste orde energie-correctie op een ongestoord niveau met m -voudige ontaarding.

We veronderstellen dat de ongestoorde toestanden orthogonaal zijn $\langle \psi_{nr}^{(0)} | \psi_{ns}^{(0)} \rangle = \delta_{rs}$. Zij nu $|\chi_{nr}^{(0)}\rangle$ de gepaste lineaire combinatie van $|\psi_{ni}^{(0)}\rangle$ zodat

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} |\psi_{nr}\rangle = |\chi_{nr}^{(0)}\rangle \quad (5.12)$$

Mits $E_n^{(0)}$ m -voudig ontaard is, is verder $E_{nr}^{(0)} \equiv E_n^{(0)}$.

Beschouw nu onderstaande reeksontwikkelingen.

$$|\psi_{nr}\rangle = |\chi_{nr}^{(0)}\rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k |\psi_{nr}^{(k)}\rangle \quad \wedge \quad E_{nr} = E_n^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_{nr}^{(k)} \quad (5.13)$$

We voeren nu deze reeksontwikkeling in de Schrödinger vergelijking in.

$$\begin{aligned}
& (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}') \left| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle + (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}') \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \left| \psi_{nr}^{(k)} \right\rangle = \left(E_n^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_{nr}^{(k)} \right) \left(\left| \chi_{nr}^{(1)} \right\rangle + \sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l \left| \psi_{nr}^{(l)} \right\rangle \right) \\
& \iff \hat{H}_0 \left| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle + \hat{H}_0 \lambda \left| \psi_{nr}^{(1)} \right\rangle + \lambda \hat{V}' \left| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle + \sum_{k=2}^{\infty} \lambda^k \hat{V}' \left| \psi_{nr}^{(k-1)} \right\rangle \\
& = E_n^{(0)} \left| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \left(E_{nr}^{(k)} \left| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle + E_n^{(0)} \left| \psi_{nr}^{(k)} \right\rangle \right) + \sum_{k=2}^{\infty} \sum_{l=0}^k \lambda^k E_{nr}^{(l)} \left| \psi_{nr}^{(k-l)} \right\rangle
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Voor $k = 1$ vinden we nu

$$\hat{H}_0 \left| \psi_{nr}^{(1)} \right\rangle + \hat{V}' \left| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle = E_{nr}^{(1)} \left| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle + E_n^{(0)} \left| \psi_{nr}^{(1)} \right\rangle \tag{5.15}$$

We nemen hiermee het inproduct met $\left| \chi_{ns}^{(0)} \right\rangle$ om het finaal resultaat te vinden.

$$\begin{aligned}
& E_n^{(0)} \left\langle \chi_{ns}^{(0)} \left| \psi_{nr}^{(1)} \right\rangle + \left\langle \chi_{ns}^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle = E_{nr}^{(1)} \left\langle \chi_{ns}^{(0)} \left| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle + E_n^{(0)} \left\langle \chi_{ns}^{(0)} \left| \psi_{nr}^{(1)} \right\rangle \right. \\
& \iff E_{nr}^{(1)} \delta_{rs} = \left\langle \chi_{ns}^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle \\
& \implies E_{nr}^{(1)} = \left\langle \chi_{nr}^{(0)} \left| \hat{V}' \right| \chi_{nr}^{(0)} \right\rangle
\end{aligned} \tag{5.16}$$

29. Stel en bewijs het Feynman-Hellmann theorema.

Veronderstel een Hamiltoniaan $\hat{H}(\lambda)$ die afhangt van een parameter λ met eigenwaarde $E(\lambda)$ en eigentoestand $|\psi(\lambda)\rangle$ zodat $\hat{H}(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle$, dan geldt dat

$$\langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \tag{5.17}$$

Bewijs: De toestand $|\psi(\lambda)\rangle$ is op één genormeerd zodat $\langle \psi(\lambda) | \hat{H}(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = E(\lambda)$. Als we deze uitdrukking nu afleiden naar λ , dan krijgen we het Feynman-Hellmann theorema.

$$\begin{aligned}
& \left\langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \left| \hat{H}(\lambda) \right| \psi(\lambda) \right\rangle + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle + \left\langle \psi(\lambda) \left| \hat{H}(\lambda) \right| \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \\
& \iff E \left[\left\langle \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \left| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \left| \frac{\partial \psi(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle \right] + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \\
& \iff E \frac{\partial}{\partial \lambda} (\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle) + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \\
& \iff E \frac{\partial}{\partial \lambda} (1) + \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \\
& \iff \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda}
\end{aligned} \tag{5.18}$$

5.3 Tijdsafhankelijke storingstheorie

30. Voer het interactiebeeld in. Aan welke toestandsvergelijking voldoet $|\psi(t)\rangle_I$?

Beschouw een Hamiltoniaan met een tijdsafhankelijke potentiaal $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ met $\hat{H}_0$ de vrije tijdsafhankelijke Hamiltoniaan. met exact gekende orthogonale eigenfuncties.

$$\hat{H}_0 \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad \wedge \quad \left\langle \psi_m^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \delta_{mn} \tag{5.19}$$

Veronderstel dat men de golf functie op tijdstip $t = 0$ kan ontwikkelen in termen van de complete orthogonale set $\left\{ \left| \psi_i^{(0)} \right\rangle | \forall i \right\}$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_k c_k(0) \left| \psi_k^{(0)} \right\rangle \tag{5.20}$$

en dat deze evolueert in de tijd volgens

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi(0)\rangle = \sum_k c_k(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)}t} |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (5.21)$$

waarbij de tijdsafhankelijkheid ten gevolge van $\hat{H}_0$ afgezonderd werd in de exponentiële $e^{-\frac{i}{\hbar}E_i^{(0)}t}$, en de tijdsafhankelijkheid ten gevolge van $\hat{V}(t)$ opgenomen werd in de coëfficiënten $c_i(t)$.

De tijdsafhankelijkheid ten gevolge van $\hat{H}_0$ kan geëlimineerd worden door over te schakelen tot het interactiebeeld.

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} |\psi(t)\rangle \quad \wedge \quad \hat{O}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} \quad (5.22)$$

In het interactiebeeld wordt de golffunctie dus gegeven door het onderstaande.

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_k c_k(t) |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (5.23)$$

We nemen nu de partiële tijdsafgeleide van deze functie en vermenigvuldigen met $i\hbar$, dit levert via de Schrödinger vergelijking een nieuwe toestandsvergelijking.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} |\psi(t)\rangle \right) \\ &= -e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} \hat{H}_0 |\psi(t)\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \right) \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} \left[-\hat{H}_0 + \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) \right] |\psi(t)\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} \hat{V}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} |\psi(t)\rangle \\ &= \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \end{aligned} \quad (5.24)$$

We hebben nu een toestandsvergelijking voor $|\psi(t)\rangle_I$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (5.25)$$

31. Voer de evolutievergelijking in het interactiebeeld in. Aan welke differentiaalvergelijking voldoet de evolutie-operator $\hat{U}_I(t)$?

Beschouw de evolutie-operator in het interactie beeld $\hat{U}_I(t)$ waarvoor geldt dat

$$|\psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t) |\psi(0)\rangle_I \quad (5.26)$$

We voeren nu deze uitdrukking in de toestandsvergelijking van $|\psi(t)\rangle_I$ (vergelijking 5.25) in.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_I &= \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle \\ \iff i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{U}_I(t) |\psi(0)\rangle_t \right) &= \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t) |\psi(0)\rangle_I \\ \implies i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_I(t) &= \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t) \end{aligned} \quad (5.27)$$

Dit is de evolutievergelijking van de evolutie-operator met randvoorwaarde $\hat{U}_I(0) = \hat{1}$.

32. Stel de Dyson reeks op voor $\hat{U}_I(t)$. Voer de tijdsordeningsoperator in.

Een oplossing voor de differentiaalvergelijking 5.27 met randvoorwaarde $\hat{U}_I(0) = \hat{1}$ wordt gegeven door

$$\hat{U}_I(t) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_I(t_1) \hat{U}_I(t_1) dt_1 \quad (5.28)$$

Als we nu deze oplossing itereren dan vinden we

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(t) &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_I(t_1) \left[\hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t_1} \hat{V}_I(t_2) \hat{U}_I(t_2) dt_2 \right] dt_1 \\ &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_I(t_1) dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \hat{U}_I(t_2) \end{aligned} \quad (5.29)$$

Al zouden we deze uitdrukking blijven itereren, dan vinden we de Dyson reeks.

$$\hat{\mathcal{U}}_I(t) = \hat{1} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \cdots \hat{V}_I(t_k) \quad (5.30)$$

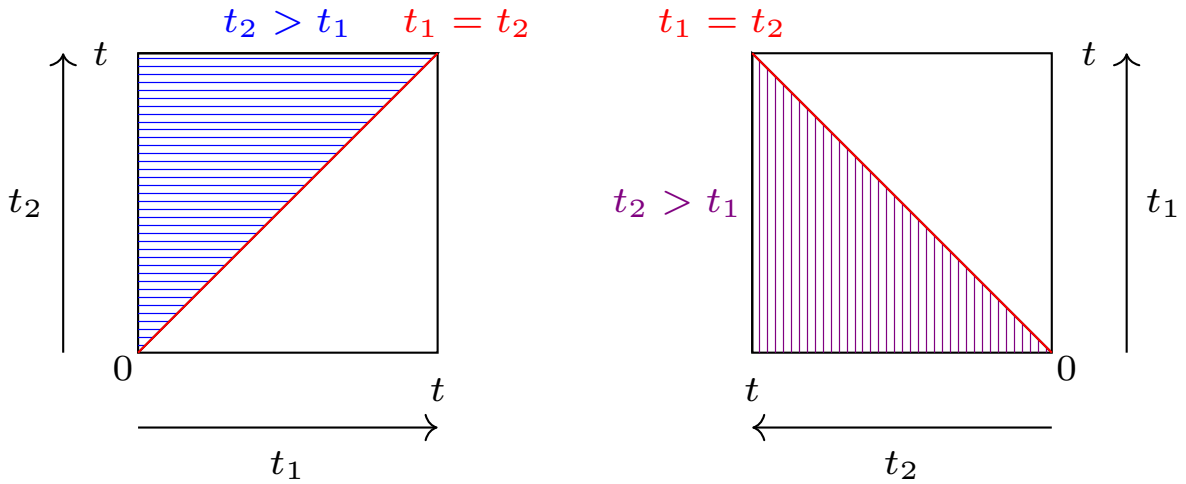
Merk op dat de tijdsvariabelen geordend zijn volgens

$$t > t_1 > t_2 > \cdots > t_k \quad (5.31)$$

Beschouw onderstaande integraal.

$$\int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \hat{V}_I(t_2) \hat{V}_I(t_1) \quad (t_2 > t_1) \quad (5.32)$$

Beschouw bovendien figuur 6. De rechter figuur is equivalent aan de linker figuur, maar gedraaid over 90° . Het is duidelijk dat het **blauwe gebied** en het **paarse gebied** hetzelfde zijn. In het **blauwe gebied** is het intuïtief om te stellen dat $0 < t_1 < t$ terwijl $t_1 < t_2 < t$. Dankzij het **paarse gebied** zien we dat het equivalent is om te zeggen dat $0 < t_2 < t$ terwijl $0 < t_1 < t_2$.



Figuur 6: Schematisch hulpmiddel voor de integratievariabelen.

We passen nu deze kennis toe op de integraal in vergelijking 5.32.

$$\int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \hat{V}_I(t_2) \hat{V}_I(t_1) = \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \hat{V}_I(t_2) \hat{V}_I(t_1) \quad (5.33)$$

Als we nu in het rechter lid de dummy integratie variabelen t_1 en t_2 omwisselen, dan vinden we de integraal uit de tweede term van de Dyson reeks terug.

$$\int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \hat{V}_I(t_2) \hat{V}_I(t_1) = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \quad (5.34)$$

We zullen dit resultaat gebruiken om de tweede term van de Dyson reeks 5.30 te herschrijven.

$$\begin{aligned} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) &= \frac{1}{2!} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \right] \\ &= \frac{1}{2!} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) + \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \hat{V}_I(t_2) \hat{V}_I(t_1) \right] \end{aligned} \quad (5.35)$$

We zien nu dat de integratiegrenzen van t_2 elkaar mooi aanvullen in de twee termen. Het probleem is nu dat de integranda verschillend zijn. Voer daarom de tijdsordeningsoperator in.

$$T \left(\hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \right) = \begin{cases} \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) & t_2 < t_1 \\ \hat{V}_I(t_2) \hat{V}_I(t_1) & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (5.36)$$

Hiermee wordt de tweede term

$$\begin{aligned} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) &= \frac{1}{2!} \left[\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 T \left(\hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \right) + \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 T \left(\hat{V}_I(t_2) \hat{V}_I(t_1) \right) \right] \\ &= \frac{1}{2!} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 T \left(\hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \right) \end{aligned} \quad (5.37)$$

Dit resultaat kan zonder bewijs veralgemeend worden naar hogere termen. Hiermee wordt de Dyson reeks 5.30

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{k-1}} dt_k T \left(\hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \cdots \hat{V}_I(t_k) \right) \\ &= T \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{V}_I(t') \right) \right] \end{aligned} \quad (5.38)$$

33. Stel de gouden regel van Fermi op om de transitiewaarschijnlijkheid per tijdseenheid voor een constante perturbatie die begint op $t = 0$ uit te drukken, gegeven dat $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\alpha x)}{\alpha x^2} = \pi \delta(x)$. Je hoeft niet voorbij eerste orde te rekenen.

Veronderstel dat op $t = 0$ de eigentoestanden van $\hat{H}_0$ $|\psi_i^{(0)}\rangle$ is zodat $|\psi(0)\rangle_I = |\psi_i^{(0)}\rangle$. Bovendien geldt dat

$$|\psi(t)\rangle_I = \sum_k c_k(t) |\psi_k^{(0)}\rangle \quad \wedge \quad |\psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t) |\psi(0)\rangle_I = \hat{U}_I(t) |\psi_i^{(0)}\rangle \quad (5.39)$$

Al nemen we nu het inproduct met $|\psi_n^{(0)}\rangle$, dan vinden we

$$c_n(t) = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{U}_I(t) | \psi_i^{(0)} \rangle \quad (5.40)$$

Als we nu de Dyson reeks 5.30 invullen, en de k -de orde termen associëren met de k -de orde correcties $c_n^{(k)}(t)$, dan vinden we voor nulde- en eerste orde

$$\begin{aligned} c_n^{(0)}(t) &= \delta_{ni} \\ c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V}_I(t_1) | \psi_i^{(0)} \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \langle \psi_n^{(0)} | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} | \psi_i^{(0)} \rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_{ni} t_1} V_{ni}(t_1) \end{aligned} \quad (5.41)$$

waarbij $\omega_{ni} := \frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar} = -\omega_{in}$, $V_{ni}(t) = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{V}(t) | \psi_i^{(0)} \rangle$, en waarbij we gebruik hebben gemaakt van de definitie 5.22 van een operator in het interactie beeld. De transitiewaarschijnlijkheid van een initiële toestand $\psi_i^{(0)}$ naar een finale toestand $\psi_n^{(0)}$ is dan

$$P(i \rightarrow n) = \left| \sum_{j=1}^{\infty} c_n^{(j)}(t) \right|^2 \quad (5.42)$$

Beschouw nu een constante perturbatie.

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \hat{V} & t \geq 0 \end{cases} \quad (5.43)$$

Voor zo'n perturbatie vinden we als correctie coëfficiënten

$$\begin{aligned}
c_n^{(0)}(t) &= \delta_{ni} \\
c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t dt_1 e^{i\omega_{ni}t_1} \\
&= -\frac{V_{ni}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} (e^{i\omega_{ni}t} - 1) \\
&= \frac{V_{ni}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} (1 - e^{i\omega_{ni}t})
\end{aligned} \tag{5.44}$$

Uit de goniometrie weten we dat

$$\begin{aligned}
|1 - e^{i\theta}|^2 &= (1 - e^{i\theta})(1 - e^{-i\theta}) = 1 + 1 - e^{i\theta} - e^{-i\theta} \\
&= 2 - 2\cos\theta = 2 - 2(1 - 2\sin^2(\theta/2)) \\
&= 4\sin^2(\theta/2)
\end{aligned} \tag{5.45}$$

Bijgevolg kunnen we ook schrijven dat

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}|^2} \sin^2\left(\frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{2\hbar} t\right) \tag{5.46}$$

Vaak zijn we echter meer geïnteresseerd in de transitie naar een groep finale toestanden in het interval $[E_n^{(0)} - \eta, E_n^{(0)} + \eta]$ gecentreerd rond $E_n^{(0)}$. Zij nu $\rho(E)$ de dichtheid der toestanden zodat $\rho(E)dE$ het totaal aantal toestanden is in het interval $[E, E + dE]$.

De transitiewaarschijnlijkheid naar de groep finale toestanden is dan tot op éérste orde

$$\begin{aligned}
\int dE_n^{(0)} \rho(E_n^{(0)}) P(i \rightarrow n) &= \int dE_n^{(0)} \rho(E_n^{(0)}) |c_n^{(1)}|^2 \\
&= 4 \int \sin^2\left(\frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{2\hbar} t\right) \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}|^2} \rho(E_n^{(0)}) dE_n^{(0)}
\end{aligned} \tag{5.47}$$

We weten uit de gegevens dat

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(\alpha x)}{\alpha x^2} = \pi \delta(x) \tag{5.48}$$

Zij nu $\alpha = t$ en $x = \frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{2\hbar}$, dan vinden we in de limiet $t \rightarrow \infty$ dat de transitiewaarschijnlijkheid gegeven wordt door

$$\begin{aligned}
4 \int \pi \delta\left(\frac{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}{2\hbar}\right) t \frac{|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}|^2}{(2\hbar)^2} \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}|^2} \rho(E_n^{(0)}) dE_n^{(0)} \\
= 4\pi \int \frac{t}{2\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_n^{(0)} - E_i^{(0)}) \rho(E_n^{(0)}) dE_n^{(0)} \\
= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E_n^{(0)}) t \Big|_{E_n^{(0)} = E_i^{(0)}}
\end{aligned} \tag{5.49}$$

Het feit dat voor grote t de transitiewaarschijnlijkheid evenredig is met t impliceert dat er voor grote t ook een constante transitiewaarschijnlijkheid is per tijdseenheid, dit noemt men de gouden regel van Fermi.

$$\omega_{i \rightarrow n} = \frac{d}{dt} \left(\int dE_n^{(0)} \rho(E_n^{(0)}) |c_n^{(1)}(t)|^2 \right) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E_n^{(0)}) \Big|_{E_n^{(0)} = E_i^{(0)}} \tag{5.50}$$

5.4 Variationele methode

34. Bewijs dat de functionaal $E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$ een extremum bereikt voor elke eigenvector $|\psi_n\rangle$ in het discrete spectrum van de Hamiltoniaan, en dat de extreme waarde de bijhorende

eigenwaarde $E_n = E(\psi_n)$ is. Bewijs bovendien dat voor elke $|\psi\rangle$ $E(\psi)$ boven de grondtoestandsenergie ligt, i.e. $E(\psi) \geq E_0$.

We voeren het bewijs uit in twee delen.

Deel 1

$$\begin{aligned}
\delta E &= \frac{\langle \delta\psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} + \frac{\langle \psi | \hat{H} | \delta\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} (\langle \delta\psi | \psi \rangle + \langle \psi | \delta\psi \rangle) \\
\Rightarrow \delta E &= \frac{\langle \delta\psi | \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} | \delta\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{E(\psi)}{\langle \psi | \psi \rangle} (\langle \delta\psi | \psi \rangle + \langle \psi | \delta\psi \rangle) \\
\Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle \delta E &= \langle \delta\psi | \hat{H} - E(\psi) | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} - E(\psi) | \delta\psi \rangle
\end{aligned} \tag{5.51}$$

$|\delta\psi\rangle$ en $\langle\delta\psi|$ zijn onafhankelijke variaties zodat wegens de hermiticiteit van de Hamiltoniaan geldt dat

$$\begin{aligned}
(\hat{H} - E(\psi)) |\psi\rangle &= 0 \\
\langle\psi| (\hat{H} - E(\psi)) &= 0
\end{aligned} \tag{5.52}$$

Wegens de hermiticiteit van $\hat{H}$ is $E(\psi) = E^*(\psi)$ zodat beide vergelijkingen equivalent zijn, en dus bereikt $E(\psi)$ een extremum voor een vector die voldoet aan

$$\hat{H} |\psi\rangle = E(\psi) |\psi\rangle \tag{5.53}$$

Mits $|\psi\rangle$ een eigenvector is, geldt dat

$$\begin{aligned}
\hat{H} |\psi\rangle &= \hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi\rangle = E(\psi) |\psi\rangle \\
\Rightarrow E_n &= E(\psi)
\end{aligned} \tag{5.54}$$

Deel 2

Als $|\psi\rangle$ normeerbaar is, dan kan ze ontwikkeld worden in haar discrete eigenbasis.

$$|\psi\rangle = \sum_k |\psi_k\rangle \langle\psi_k|\psi\rangle \tag{5.55}$$

Voor het energieverval $E(\psi) - E_0$ vinden we nu

$$\begin{aligned}
E(\psi) - E_0 &= \frac{\langle\psi|\hat{H} - E_0|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_k (E_k - E_0) \frac{\langle\psi|\psi_k\rangle \langle\psi_k|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \\
&= \sum_k (E_k - E_0) \frac{|\langle\psi|\psi_k\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}
\end{aligned} \tag{5.56}$$

Mits $E_n \geq E_0$, $|\langle\psi|\psi_k\rangle|^2 \geq 0$ en $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ (i.e. $|\psi\rangle$ is normeerbaar), moet gelden dat

$$E(\psi) \geq E_0 \tag{5.57}$$

6 Relativistische kwantummechanica: de Dirac vergelijking

6.1 Dirac vergelijking

Nog voor u hier verder leest, is het misschien eerst handig dat u appendix A nog eens goed doorneemt. We maken immers volop gebruik van tensor notatie, index raising en index lowering.

35. Leidt de Dirac vergelijking af. Eis een Hamiltoniaan die lineair is in de ruimtelijke afgeleiden, eventueel met matrix coëfficiënten, en eis dat deze voldoet aan de Einstein relatie. Aan welke voorwaarden moeten de matrix coëfficiënten voldoen? Toon aan dat de kleinste dimensie waarin we kunnen werken 4-dimensionaal is, dit geeft de Dirac representatie.

Stap 1: lineariteit van de evolutievergelijking.

De Schrödinger vergelijking $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$ is lineair in de tijdsafgeleide. Opdat deze vergelijking relativistisch invariant zou zijn, moet de vergelijking ook lineair zijn in ruimtelijke afgeleiden. Dit levert onderstaande vorm.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \psi + \beta m c^2 \psi \equiv H \psi \quad (6.1)$$

De golffunctie is hier echter geen Lorentz-scalair, mits de waarschijnlijkheidsdichtheid $\psi \psi^*$ de tijdscomponent van een 4-vector is. De coëfficiënten α_i en β mogen ook geen scalaren zijn, anders is de vergelijking niet invariant onder rotatie. Het is dan logisch om te stellen dat ψ een N -dimensionale vector is, en dat de coëfficiënten α_i en β $N \times N$ -matrices zijn.

Stap 2: Einstein relatie.

De Einstein relatie stelt dat

$$H^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2 \quad (6.2)$$

Laat ons nu kwantum correspondentie toepassen, i.e. we vervangen de grootheden door hun operatoren: $p \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$ en $H \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$.

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = m^2 c^4 \psi - \hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 \psi \quad (6.3)$$

Om te checken of de Dirac vergelijking hieraan voldoet, laten we de Dirac vergelijking op zichzelf inwerken, i.e. we itereren.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \psi + \beta m c^2 \psi \\ \Rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi &= H^2 \psi \\ &= -\hbar^2 c^2 \left(\sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \right)^2 + \beta^2 m^2 c^4 \psi \\ &\quad + \frac{\hbar m c^3}{i} \left[\left(\sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial}{\partial x^i} \right) \beta \psi + \beta \left(\sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.4)$$

Merk op dat de coëfficiënten α_i en β constant zijn, we mogen ze in het vervolg dus voor de afgeleiden zetten. Omdat i een dummy index is, kunnen we de eerste term kunnen we herschrijven.

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \right)^2 &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i \alpha_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^i \partial x^j} \\ &= \frac{1}{2} \left[\alpha_i \alpha_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^i \partial x^j} + \alpha_j \alpha_i \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^j \partial x^i} \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^i \partial x^j} \end{aligned} \quad (6.5)$$

Als we dit resultaat invullen in vergelijking 6.4, dan vinden we

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left[-\frac{\hbar^2 c^2}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{\hbar m c^3}{i} \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \frac{\partial}{\partial x^i} + \beta^2 m^2 c^4 \right] \psi \quad (6.6)$$

Als we nu deze vergelijking nu vergelijken met vergelijking 6.3, dan zien we dat aan de Einstein relatie voldaan wordt indien⁵

$$\begin{cases} \{\alpha_i, \alpha_j\} := \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} \mathbb{1} & \forall i, j \in \{1, 2, 3\} \\ \{\alpha_i, \beta\} := \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 & \forall i \\ \alpha_i^2 = \beta^2 = \mathbb{1} & \forall i \end{cases} \quad (6.7)$$

We checken dit, en zien dat als we dit invullen in vergelijking 6.6, dat we inderdaad terug de Einstein relatie 6.3 bekomen.

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= -\hbar^2 c^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \delta_{ij} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^i \partial x^j} + \beta^2 m^2 c^4 \psi \\ &= -\hbar^2 c^2 \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial (x^i)^2} + \beta^2 m^2 c^4 \psi \\ &= -\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 \psi + \beta^2 m^2 c^4 \psi \end{aligned} \quad (6.8)$$

Stap 3: hermiticiteit van de Hamiltoniaan.

Als we willen dat H hermitisch is, dan moeten de coëfficiënten α_i en β dat ook zijn. Mits $\alpha_i^2 = \beta^2 = \mathbb{1}$ moet ook gelden dat hun eigenwaarden ± 1 zijn⁶. Verder vinden we ook voor $i \neq j$.

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i \qquad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad (6.9)$$

$$\implies \alpha_i = -\alpha_j \alpha_i \alpha_j \qquad \beta = -\alpha_i \beta \alpha_i \quad (6.10)$$

$$\implies \text{Tr}\{\alpha_i\} = \text{Tr}\{-\alpha_j \alpha_i \alpha_j\} \qquad \text{Tr}\{\beta\} = \text{Tr}\{-\alpha_i \beta \alpha_i\} \quad (6.11)$$

$$\implies \text{Tr}\{\alpha_i\} = -\text{Tr}\{\alpha_i\} \qquad \text{Tr}\{\beta\} = -\text{Tr}\{\beta\} \implies \text{Tr}\{\alpha_i\} = 0 \qquad \text{Tr}\{\beta\} = 0 \quad (6.12)$$

We hebben hier gebruik gemaakt van de cyclische eigenschap van het spoor: $\text{Tr}\{AB\} = \text{Tr}\{BA\}$. Het feit dat de matrices spoorloos zijn, en het feit dat de eigenwaarden ± 1 zijn, impliceert dat de matrices even-dimensionaal zijn.

De mogelijkheid $N = 2$ valt al weg omdat er slechts 3 lineair onafhankelijke, spoorloze 2×2 matrices zijn waarvan hun kwadraat $\mathbb{1}$ is, dit zijn de Pauli-matrices

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

De coëfficiënten zijn dus minstens 4×4 , deze minimale representatie leidt tot de Dirac representatie.

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

36. Leidt een continuïteitsvergelijking af in termen van een positieve waarschijnlijkheidsdichtheid en een stroom dichtheid.

We vermenigvuldigen de Dirac vergelijking 6.1 links met het hermitisch toegevoegde van de golf functie ψ^+ .

$$i\hbar \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} \sum_{i=1}^3 \psi^+ \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} + mc^2 \psi^+ \beta \psi \quad (6.15)$$

⁵Ik zal hier al stellen dat $\mathbb{1}$ de eenheidsmatrix voorstelt, maar niet voor één bepaalde dimensie, deze zal telkens blijken uit de context.

⁶Als een matrix diagonaliseerbaar is, dan zijn de eigenwaarden de diagonaal elementen. Het kwadraat van een diagonaal matrix is opnieuw diagonaal.

We nemen het hermitisch toegevoegde van de Dirac vergelijking, en vermenigvuldigen rechts met ψ .

$$-i\hbar \left(\frac{\partial \psi^+}{\partial t} \right) \psi = -\frac{\hbar c}{i} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \psi^+}{\partial x^i} \alpha_i \psi + mc^2 \psi^+ \beta \psi \quad (6.16)$$

Als we nu vergelijking 6.16 van 6.15 aftrekken, dan vinden we

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^+ \psi) &= \frac{\hbar c}{i} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^i} (\psi^+ \alpha_i \psi) \\ \iff \frac{\partial}{\partial t} (\psi^+ \psi) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^i} (c\psi^+ \alpha_i \psi) &= 0 \\ \iff \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} &= 0 \end{aligned} \quad (6.17)$$

waarbij $\rho = \psi^+ \psi$ de positieve waarschijnlijkheidsdichtheid is mits $\psi^+ \psi = \sum_{\sigma=0}^3 \psi_{\sigma}^* \psi_{\sigma} = \sum_{\sigma=0}^3 |\psi_{\sigma}|^2 \geq 0$, en waarbij $J_i = c\psi^+ \alpha_i \psi$ de drie componenten van een waarschijnlijkheidsstroom dichtheid voorstellen.

6.2 Covariante vorm van de Dirac vergelijking

37. Introduceer de gamma-matrices γ^{μ} en herschrijf de Dirac vergelijking als $(\not{p} - mc)\psi = (i\hbar \not{\partial} - mc)\psi = 0$.

We vermenigvuldigen de Dirac vergelijking 6.1 met $\frac{\beta}{c}$ en brengen alles naar het linker lid.

$$i\hbar \left[\frac{1}{c} \beta \frac{\partial}{\partial t} + \beta \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \beta \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \beta \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right] \psi - mc\psi = 0 \quad (6.18)$$

Definieer nu $\gamma^0 := \beta$ en $\gamma^i := \beta \alpha_i$ en houd rekening met het feit dat de afgeleide genoteerd wordt als $\partial_{\mu} = \frac{\partial}{\partial x^{\mu}}$ waarbij $\partial_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$ zodat

$$(i\hbar \gamma^{\mu} \partial_{\mu} - mc)\psi = 0 \quad (6.19)$$

Definieer dan de Feynman dagger als

$$\gamma^{\mu} a_{\mu} = \gamma^0 a_0 - \vec{\gamma} \cdot \vec{a} \quad (6.20)$$

zodat

$$\begin{aligned} (i\hbar \not{\partial} - mc)\psi &= 0 \\ \iff (\not{p} - mc)\psi &= 0 \end{aligned} \quad (6.21)$$

waarbij we gebruik hebben gemaakt van de definitie van de 4-impuls operator $p^{\mu} = i\hbar \partial^{\mu} \iff p_{\mu} = i\hbar \partial_{\mu}$.

38. Wat is de voorwaarde waaraan $D(\Lambda)$ moet voldoen opdat de Dirac vergelijking covariant transformeert onder Lorentz transformaties gegeven dat $x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu}$, $\Lambda^{\mu}_{\lambda} \Lambda^{\nu}_{\kappa} g_{\mu\nu} = g_{\lambda\kappa}$ en $\psi'(x') = D(\Lambda)\psi(x) = D(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x')$ waarbij $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$.

De relatie tussen een waarnemer O en een waarnemer O' is een inverse transformatie zodat

$$\begin{aligned} &\begin{cases} \psi(x) = D(\Lambda^{-1})\psi'(x') \\ \psi'(x') = D(\Lambda)\psi(x) \end{cases} \\ \implies &\begin{cases} \psi(x) = D(\Lambda^{-1})\psi'(x') \\ D(\Lambda)^{-1}\psi'(x') = \psi(x) \end{cases} \\ \implies &D(\Lambda^{-1}) = D(\Lambda)^{-1} \end{aligned} \quad (6.22)$$

Beschouw nu de Dirac vergelijking voor een waarnemer O .

$$\left(i\hbar \gamma^{\mu} \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - mc \right) \psi(x) = 0 \quad (6.23)$$

Gebruik makend van $\psi(x) = D(\Lambda)^{-1}\psi'(x')$ vinden we

$$\left(i\hbar \gamma^{\mu} D(\Lambda)^{-1} \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - mc D(\Lambda)^{-1} \right) \psi'(x') = 0 \quad (6.24)$$

We herschrijven nu de afgeleide.

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \Lambda^\nu_\mu \quad (6.25)$$

We vullen nu dit resultaat in in vergelijking 6.24 en vermenigvuldigen links met $D(\Lambda)$.

$$\left(i\hbar D(\Lambda) \gamma^\mu D(\Lambda)^{-1} \Lambda^\nu_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - mc \right) \psi'(x') = 0 \quad (6.26)$$

De Dirac vergelijking is dan Lorentz covariant wanneer

$$\begin{aligned} D(\Lambda) \gamma^\mu D(\Lambda)^{-1} \Lambda^\nu_\mu &= \gamma^\nu \\ \iff \gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu &= D(\Lambda)^{-1} \gamma^\nu D(\Lambda) \end{aligned} \quad (6.27)$$

We zien hieruit dat γ^μ transformeert als een 4-vector.

39. Beschouw een infinitesimale Lorentz transformatie $\Lambda^\nu_\mu = \delta^\nu_\mu + \Delta\omega^\nu_\mu$ en schrijf $D(\Lambda) = 1 - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\mu\nu}$. Waaraan moeten de $\sigma_{\mu\nu}$ voldoen? Bewijs dat $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ een oplossing is van de vereiste. Schrijf een algemene vorm van $D(\Lambda)$ op.

Stap 1: eerste voorwaarde op $\sigma_{\mu\nu}$.

We weten dat tot op eerste orde in $\Delta\omega$ geldt dat

$$\begin{aligned} \Lambda^\mu_\lambda \Lambda^\nu_\kappa g_{\mu\nu} &= g_{\lambda\kappa} \\ \iff (\delta^\mu_\lambda + \Delta\omega^\mu_\lambda) (\delta^\nu_\kappa + \Delta\omega^\nu_\kappa) g_{\mu\nu} &= g_{\lambda\kappa} \\ \iff \delta^\mu_\lambda \delta^\nu_\kappa g_{\mu\nu} + \delta^\mu_\lambda \Delta\omega^\nu_\kappa g_{\mu\nu} + \delta^\nu_\kappa \Delta\omega^\mu_\lambda g_{\mu\nu} &= g_{\lambda\kappa} \\ \iff g_{\lambda\kappa} + \Delta\omega^\nu_\kappa g_{\lambda\nu} + \Delta\omega^\mu_\lambda g_{\mu\kappa} &= g_{\lambda\kappa} \\ \iff \Delta\omega_{\lambda\kappa} + \Delta\omega_{\kappa\lambda} &= 0 \\ \implies \Delta\omega_{\mu\nu} &= -\Delta\omega_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (6.28)$$

waarbij we in de laatste implicatie simpelweg de niet-dummy indices λ en κ hebben herlabeld naar μ en ν .

We zien hier dat $\Delta\omega_{\mu\nu}$ anti-symmetrisch is. Als dat het geval is, dan moet ook $\sigma_{\mu\nu}$ anti-symmetrisch zijn opdat $D(\Lambda)$ hetzelfde zou blijven.

Stap 2: tweede voorwaarde op $\sigma_{\mu\nu}$.

We vullen nu $D(\Lambda)$ in vergelijking 6.27 in. Tot op eerste orde geldt nu

$$\begin{aligned} \gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu &= \left(1 + \frac{i}{4} \sigma_{\alpha\beta} \Delta\omega^{\alpha\beta} \right) \gamma^\nu \left(1 - \frac{i}{4} \sigma_{\lambda\kappa} \Delta\omega^{\lambda\kappa} \right) \\ \iff \gamma^\mu \delta^\nu_\mu + \gamma^\mu \Delta\omega^\nu_\mu &= \gamma^\nu + \frac{i}{4} [\sigma_{\alpha\beta} \Delta\omega^{\alpha\beta} \gamma^\nu - \gamma^\nu \sigma_{\alpha\beta} \Delta\omega^{\alpha\beta}] \\ \iff \gamma^\mu \Delta\omega^\nu_\mu &= \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} [\sigma_{\alpha\beta} \gamma^\nu - \gamma^\nu \sigma_{\alpha\beta}] \end{aligned} \quad (6.29)$$

In de eerste overgang hebben we de dummy indices λ en κ vervangen door α en β , dit mag omdat we enkel op eerste orde werken en er geen menging van indices kan voorkomen. In de tweede overgang hebben we $\Delta\omega^{\alpha\beta}$ buiten gebracht omdat we uit de vorm van de Lorentz transformatie dat dit een scalair moet zijn.

Omdat $\Delta\omega_{\mu\nu}$ anti-symmetrisch is, vinden we bovendien dat

$$\begin{aligned} \Delta\omega^\nu_\mu \gamma^\mu &= \Delta\omega^{\nu\beta} g_{\beta\mu} \gamma^\mu = \Delta\omega^{\alpha\beta} \delta^\nu_\alpha g_{\beta\mu} \gamma^\mu = \Delta\omega^{\alpha\beta} \delta^\nu_\alpha \gamma_\beta \\ &= \frac{1}{2} (\Delta\omega^{\alpha\beta} \delta^\nu_\alpha \gamma_\beta + \Delta\omega^{\beta\alpha} \delta^\nu_\beta \gamma_\alpha) \\ &= \frac{1}{2} \Delta\omega^{\alpha\beta} (\delta^\nu_\alpha \gamma_\beta - \delta^\nu_\beta \gamma_\alpha) \end{aligned} \quad (6.30)$$

Uit vergelijkingen 6.29 en 6.30 zien we dat

$$\begin{aligned} \frac{i}{4} \Delta\omega^{\alpha\beta} [\sigma_{\alpha\beta} \gamma^\nu - \gamma^\nu \sigma_{\alpha\beta}] &= \frac{1}{2} \Delta\omega^{\alpha\beta} (\delta^\nu_\alpha \gamma_\beta - \delta^\nu_\beta \gamma_\alpha) \\ \iff -\frac{i}{2} [\gamma^\nu, \sigma_{\alpha\beta}] &= (\delta^\nu_\alpha \gamma_\beta - \delta^\nu_\beta \gamma_\alpha) \\ \iff [\gamma^\nu, \sigma_{\alpha\beta}] &= 2i (\delta^\nu_\alpha \gamma_\beta - \delta^\nu_\beta \gamma_\alpha) \end{aligned} \quad (6.31)$$

dit is een tweede voorwaarde waaraan $\sigma_{\alpha\beta}$ moet voldoen.

Stap 3: $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ voldoet aan de voorwaarden.

Met deze uitdrukking is triviaal aan de eerste voorwaarde voldaan wegens het feit dat de commutator anti-symmetrisch is. Om de tweede voorwaarde expliciet te checken maken we gebruik van de anti-commutatatie relatie $\{\gamma_\alpha, \gamma_\beta\} = 2g_{\alpha\beta}\mathbb{1} \implies \gamma_\beta\gamma_\alpha = 2g_{\alpha\beta}\mathbb{1} - \gamma_\alpha\gamma_\beta$ zodat

$$\begin{aligned} \left[\gamma^\nu, \frac{i}{2}[\gamma_\alpha, \gamma_\beta] \right] &= \frac{i}{2} [\gamma^\nu (\gamma_\alpha\gamma_\beta - \gamma_\beta\gamma_\alpha) - (\gamma_\alpha\gamma_\beta - \gamma_\beta\gamma_\alpha) \gamma^\nu] \\ &= \frac{i}{2} [\gamma^\nu (2\gamma_\alpha\gamma_\beta - 2g_{\alpha\beta}\mathbb{1}) - (2\gamma_\alpha\gamma_\beta - 2g_{\alpha\beta}\mathbb{1}) \gamma^\nu] \\ &= i (\gamma^\nu \gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\alpha \gamma_\beta \gamma^\nu) \end{aligned} \quad (6.32)$$

Mits $g_{\mu\alpha}g^{\alpha\nu} = \delta_\mu^\nu$ vinden we ook dat

$$\begin{aligned} \gamma_\lambda\gamma_\alpha &= 2g_{\lambda\alpha}\mathbb{1} - \gamma_\alpha\gamma_\lambda \\ \iff \gamma^\beta g_{\beta\lambda}\gamma_\alpha &= 2g_{\lambda\alpha}\mathbb{1} - \gamma_\alpha\gamma^\kappa g_{\kappa\lambda} \\ \iff \gamma^\beta g_{\beta\lambda}g^{\lambda\nu}\gamma_\alpha &= 2g_{\lambda\alpha}g^{\lambda\nu}\mathbb{1} - \gamma_\alpha\gamma^\kappa g_{\kappa\lambda}g^{\lambda\nu} \\ \iff \gamma^\beta \delta_\beta^\nu \gamma_\alpha &= 2\delta_\alpha^\nu \mathbb{1} - \gamma_\alpha\gamma^\kappa \delta_\kappa^\nu \\ \iff \gamma^\nu \gamma_\alpha &= 2\delta_\alpha^\nu \mathbb{1} - \gamma_\alpha\gamma^\nu \\ \implies \gamma_\beta\gamma^\nu &= 2\delta_\beta^\nu \mathbb{1} - \gamma^\nu\gamma_\beta \end{aligned} \quad (6.33)$$

Als we de laatste 2 uitdrukkingen van vergelijking 6.33 invullen in vergelijking 6.32, dan vinden we dat de tweede voorwaarde inderdaad voldaan wordt.

$$[\gamma^\nu, \sigma_{\alpha\beta}] = i [(2\delta_\alpha^\nu - \gamma_\alpha\gamma^\nu) \gamma_\beta - \gamma_\alpha (2\delta_\beta^\nu - \gamma^\nu\gamma_\beta)] = 2i (\delta_\alpha^\nu \gamma_\beta - \delta_\beta^\nu \gamma_\alpha) \quad (6.34)$$

Stap 4: $D(\Lambda)$.

De infinitesimale Lorentz transformatie wordt nu gegeven door

$$\begin{aligned} D(\Lambda) &= 1 - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\mu\nu} \\ &= 1 + \frac{1}{8} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \Delta\omega^{\mu\nu} \end{aligned} \quad (6.35)$$

Voor een eindige Lorentz transformatie vinden we dan

$$\begin{aligned} D(\Lambda) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{8} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \frac{\omega^{\mu\nu}}{N} \right)^N \\ &= \exp \left(\frac{1}{8} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \omega^{\mu\nu} \right) \end{aligned} \quad (6.36)$$

waarbij we de onderstaande definitie van de exponentiële functie hebben gebruikt.

$$\exp(x) := \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n} \right)^n \quad (6.37)$$

6.3 Toegevoegde spinoren

40/41. Wat is de definitie van de toegevoegde spinor $\bar{\psi}$? Hoe transformeert de toegevoegde spinor onder Lorentz transformatie gegeven dat $\psi'(x') = D(\Lambda)\psi(x)$ en $D(\Lambda) = \exp(\frac{1}{8}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]\omega^{\mu\nu})$

Nog voor ik hier ook maar iets uitwerk, zal ik al onmiddellijk stellen dat er hier vaak γ_μ en γ^μ in elkaar worden gewisseld. Dat mag mits de gamma-matrices goed gedefinieerd zijn in termen van de Pauli-matrices. De index heeft volgens mij niet hetzelfde belang als een typische vrije index die covariant of contravariant is.

De toegevoegde spinor is gedefinieerd als

$$\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x) \gamma^0 \quad (6.38)$$

We bekijken nu hoe deze transformeert, gebruik makend van $(\gamma^0)^2 = \beta^2 = \mathbb{1}$.

$$\begin{aligned}\bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}' = \psi'^+ \gamma^0 = (D\psi)^+ \gamma^0 \\ &= \psi^+ \gamma^0 \gamma^0 D^+ \gamma^0 = \bar{\psi} \gamma^0 D^+ \gamma^0\end{aligned}\tag{6.39}$$

We hebben nu dus een uitdrukking nodig voor D^+ . Uit de gegeven uitdrukking voor D halen we

$$\exp\left(\frac{1}{8}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]^+ \omega^{\mu\nu}\right)\tag{6.40}$$

Nu werken we de commutator uit.

$$[\gamma_\mu, \gamma_\nu]^+ = (\gamma_\nu^+ \gamma_\mu^+ - \gamma_\mu^+ \gamma_\nu^+) = -[\gamma_\mu^+, \gamma_\nu^+]\tag{6.41}$$

Om de commutator nog verder uit te werken, hebben we dus een uitdrukking voor γ_μ^+ nodig. Uit de definitie halen we

$$(\gamma^0)^+ = \beta^+ \tag{6.42}$$

$$= \beta \tag{6.43}$$

$$(\gamma^i)^+ = (\beta \alpha_i)^+ \tag{6.42}$$

$$= \alpha_i^+ \beta^+ \tag{6.43}$$

$$= \alpha_i \beta \tag{6.44}$$

$$= -\beta \alpha_i \tag{6.45}$$

$$= -\gamma^i \tag{6.46}$$

waarbij we gebruik hebben gemaakt van de anti-commutatatie relatie $\{\alpha_i, \beta\} = 0$. Verder geldt ook voor $\mu \neq \nu$ dat $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 0$, en wegens $(\gamma^0)^2 = \mathbb{1} \implies$ en het vorige volgt dat

$$\begin{aligned}\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} &= 0 \\ \implies \gamma^0 \gamma^i &= -\gamma^i \gamma^0 \\ \implies -\gamma^i &= \gamma^0 \gamma^i \gamma^0 \\ \implies (\gamma^i)^+ &= \gamma^0 \gamma^i \gamma^0\end{aligned}\tag{6.47}$$

Uiteraard geldt ook dat $(\gamma^0)^+ = \gamma^0 \gamma^0 \gamma^0$ zodat we vinden dat

$$\begin{aligned}(\gamma^\mu)^+ &= \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 \\ \implies [\gamma_\mu^+, \gamma_\nu^+] &= [\gamma_0 \gamma_\mu \gamma_0, \gamma_0 \gamma_\nu \gamma_0] = \gamma_0 [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \gamma_0 \\ \implies [\gamma_\mu, \gamma_\nu]^+ &= -\gamma_0 [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \gamma_0\end{aligned}\tag{6.48}$$

Als we dit resultaat nu invullen in vergelijking 6.40, dan vinden we

$$D^+ = \exp\left(-\frac{1}{8}\gamma_0 [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \gamma_0 \omega^{\mu\nu}\right)\tag{6.49}$$

Als we deze uitdrukking zouden Taylor-expanderen, dan zouden we zien dat we γ_0 kunnen buiten brengen, dan hebben we

$$D^+ = \gamma^0 \exp\left(-\frac{1}{8}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] \omega^{\mu\nu}\right) \gamma^0 = \gamma^0 D^{-1} \gamma^0\tag{6.50}$$

Vullen we dit resultaat in vergelijking 6.39 stoppen, dan vinden we finaal

$$\bar{\psi}' = \bar{\psi} \gamma^0 \gamma^0 D^{-1} \gamma^0 \gamma^0 = \bar{\psi} D^{-1}\tag{6.51}$$

42. Bewijs dat de behouden waarschijnlijkheidsstroom $J^\mu = c\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ Lorentz covariant transformeert.

We gebruiken simpelweg vergelijkingen 6.27 en 6.51.

$$\begin{aligned}J'^\mu &= c\bar{\psi}'\gamma^\mu\psi' = c\bar{\psi}D^{-1}\gamma^\mu D\psi = c\Lambda^\mu{}_\nu \bar{\psi}\gamma^\nu\psi \\ &= \Lambda^\mu{}_\nu J^\nu\end{aligned}\tag{6.52}$$

43. Hoe transformeert een Dirac spinor onder pariteitstransformatie (en waarom is dit de juiste transformatie)? Definieer $\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ en bewijs dat $\bar{\psi}\gamma_5\psi$ als een pseudo-scalair transformeert onder de pariteitstransformatie, i.e. het krijgt een minteken.

Deel 1: De pariteitstransformatie.

De pariteitstransformatie wordt gegeven door $\vec{x}' = -\vec{x}$ en $t' = t$ wat een oneigenlijke Lorentz transformatie is met $(\Lambda^\mu{}_\nu)_I = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Zij nu $D(\Lambda_I) = P$ de representatie van de pariteitstransformatie P , deze moet voldoen aan

$$\begin{aligned} P^{-1}\gamma^\nu P &= (\Lambda^\nu{}_\mu)_I \gamma^\mu \\ \implies P^{-1}\gamma^0 P &= \gamma^0 \quad \wedge \quad P^{-1}\gamma^i P = -\gamma^i \\ \implies P^{-1}\gamma^\mu P &= (\gamma^\mu)^+ \end{aligned} \tag{6.53}$$

Door dit te vergelijken met 6.48 zien we in dat

$$P = e^{i\varphi}\gamma_0 \tag{6.54}$$

met φ een fase. Onder rotatie van 360° verandert de spinor van teken, er is dus een rotatie van 720° vereist om de spinor op zichzelf af te beelden. Er zijn dus 4 keuzes voor de fase factor $e^{i\varphi}$, namelijk ± 1 en $\pm i$. Onder de pariteitstransformatie hebben we dus

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x') = e^{i\varphi}\gamma^0\psi(-\vec{x}, t) \tag{6.55}$$

De spinor ψ transformeert op 2 manieren: als ruimte-inversie (orbitale pariteit) en als transformatie van spin componenten door $e^{i\varphi}\gamma_0$, de intrinsieke pariteit.

Deel 2: $\bar{\psi}\gamma_5\psi$ is een pseudo-scalair.

Laat ons beginnen met de transformatie uit te voeren

$$\bar{\psi}\gamma_5\psi \rightarrow \bar{\psi}'\gamma_5\psi' = \bar{\psi}D^{-1}i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3D\psi \tag{6.56}$$

Nu weten we uit vergelijking 6.27 dat $\gamma^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu D\gamma^\nu D^{-1}$ zodat

$$\begin{aligned} \bar{\psi}'\gamma_5\psi' &= \bar{\psi}D^{-1}i\Lambda^0{}_\alpha D\gamma^\alpha D^{-1}\Lambda^1{}_\beta D\gamma^\beta D^{-1}\Lambda^2{}_\epsilon D\gamma^\epsilon D^{-1}\Lambda^3{}_\delta D\gamma^\delta D^{-1}D\psi \\ &= \bar{\psi}i(\Lambda^0{}_\alpha \Lambda^1{}_\beta \Lambda^2{}_\epsilon \Lambda^3{}_\delta \gamma^\alpha \gamma^\beta \gamma^\epsilon \gamma^\delta)\psi \end{aligned} \tag{6.57}$$

We weten al dat

$$\Lambda^\mu{}_\lambda \Lambda^\nu{}_\kappa g^{\lambda\kappa} = g^{\mu\nu} \tag{6.58}$$

Als $\lambda = \kappa$, dan is in elk geval $g^{\lambda\kappa} \neq 0$, als nu bovendien $\mu \neq \nu$, dan is $g^{\mu\nu} = 0$, zodat het niet anders kan dan dat ook $\Lambda^\mu{}_\lambda \Lambda^\nu{}_\kappa = 0$. De enige niet-nul termen in vergelijking 6.57 zijn dus deze waarbij de indices $\alpha, \beta, \epsilon, \delta$ allemaal verschillend zijn. We kunnen dan sommeren over permutaties in plaats van over de indices zelf in vergelijking 6.57.

$$\begin{aligned} \bar{\psi}'\gamma_5\psi &= \bar{\psi}i\left(\sum_{\sigma \in S_4} \Lambda^0{}_{\sigma(0)}\Lambda^1{}_{\sigma(1)}\Lambda^2{}_{\sigma(2)}\Lambda^3{}_{\sigma(3)}\gamma^{\sigma(0)}\gamma^{\sigma(1)}\gamma^{\sigma(2)}\gamma^{\sigma(3)}\right)\psi \\ &= \bar{\psi}i\left(\sum_{\sigma \in S_4} \text{sgn}(\sigma)\Lambda^0{}_{\sigma(0)}\Lambda^1{}_{\sigma(1)}\Lambda^2{}_{\sigma(2)}\Lambda^3{}_{\sigma(3)}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\right)\psi \end{aligned} \tag{6.59}$$

We hebben hier de matrices γ^μ al geordend om de definitie van γ_5 terug te verkrijgen. Dankzij het teken van de permutatie dat hierdoor verschijnt zien we nu de definitie van een determinant opduiken. We hebben dus finaal

$$\bar{\psi}'\gamma_5\psi = \det(\Lambda)\bar{\psi}\gamma_5\psi \tag{6.60}$$

Voor een pariteitstransformatie is $\Lambda = P = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ zodat $\det(\Lambda) = -1$ of dus

$$\bar{\psi}'\gamma_5\psi = -\bar{\psi}\gamma_5\psi \tag{6.61}$$

We hebben inderdaad een pseudo-scalair.

Ik weet niet of mijn redenering onder vergelijking 6.57 geheel kosher is. Ik moest de sommatie limiteren tot permutaties om aan de determinant te komen. Het argument dat ik gebruikte leek me de enige mogelijkheid om deze overgang te verantwoorden.

6.4 Vrij deeltje

44. Construeer de 4 oplossingen van de Dirac vergelijking voor een vrij deeltje in rust.

Voor positief- en negatief-energetische golffuncties stellen we respectievelijk de volgende ansatzen voor.

$$\psi^{(+)(\alpha)}(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x} u^{(\alpha)}(p) \quad \wedge \quad \psi^{(-)(\alpha)}(x) = e^{+\frac{i}{\hbar}p \cdot x} v^{(\alpha)}(p) \quad (6.62)$$

waarbij α de spin toestand aanduidt en $p \cdot x = p^\mu x_\mu = p_\mu x^\mu$. Beschouw nu onderstaande afgeleide

$$\partial_\mu e^{\pm \frac{i}{\hbar}p \cdot x} = \pm \frac{i}{\hbar} e^{\pm \frac{i}{\hbar}p \cdot x} \partial_\mu (p_\nu x^\nu) = \pm \frac{i}{\hbar} p_\mu e^{\pm \frac{i}{\hbar}p \cdot x} \quad (6.63)$$

Beschouw nu de Dirac vergelijking $(\not{p} - mc)\psi(x) = 0$. We vullen de ansatzen in.

$$\begin{aligned} (\not{p} - mc)\psi^{(+)(\alpha)}(x) = 0 &\iff (+\not{p} - mc)e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x} u^{(\alpha)}(p) = 0 \iff (\not{p} - mc)u^{(\alpha)}(p) = 0 \\ (\not{p} - mc)\psi^{(-)(\alpha)}(x) = 0 &\iff (-\not{p} - mc)e^{+\frac{i}{\hbar}p \cdot x} v^{(\alpha)}(p) = 0 \iff (\not{p} + mc)v^{(\alpha)}(p) = 0 \end{aligned} \quad (6.64)$$

waarbij we gebruik hebben gemaakt van de definitie van de Feynman dagger: $\not{p} = i\hbar \not{\partial} = i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu$.

In het ruststelsel is $p^\mu = (mc, \vec{0})$ zodat $\not{p} = \gamma^0 p_0 = mc\gamma^0$. Invullen in vergelijking 6.64 levert

$$\begin{aligned} mc(\gamma^0 - 1)u^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) = 0 &\iff \gamma^0 u^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) = u^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) \\ mc(\gamma^0 + 1)v^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) = 0 &\iff \gamma^0 v^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) = -v^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) \end{aligned} \quad (6.65)$$

γ^0 heeft nu 4 eigenvectoren met eigenwaarden ± 1 zodat 4 lineair onafhankelijke oplossingen triviaal gegeven worden door

$$u^{(1)}(mc, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(2)}(mc, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v^{(1)}(mc, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v^{(2)}(mc, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.66)$$

45. Bewijs dat $(\not{p} - mc)(\not{p} + mc) = 0$ en construeer oplossingen van de Dirac vergelijking voor vrije deeltjes met $\vec{p} \neq \vec{0}$. Je krijgt een bonus punt als je de normering in orde krijgt.

Voor we verder gaan, merk op dat $\not{p}$ een matrix is, er staat dan ook impliciet een eenheidsmatrix $\mathbb{1}$ in de mc term.

$$\begin{aligned} (\not{p} - mc)(\not{p} + mc) &= \not{p}^2 - m^2 c^2 = p_\mu p_\nu \gamma^\mu \gamma^\nu - m^2 c^2 = \frac{1}{2} p_\mu p_\nu \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} - m^2 c^2 \\ &= p_\mu p_\nu g^{\mu\nu} - m^2 c^2 = p^\nu p_\nu - m^2 c^2 \end{aligned} \quad (6.67)$$

Nu geldt er ook dat

$$\begin{aligned} E^2 &= \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad \wedge \quad E = p_0 c \\ \implies p_0^2 c^2 &= \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \\ \implies p_0^2 - \vec{p}^2 &= m^2 c^2 \\ \implies p^\mu p_\mu &= m^2 c^2 \\ \implies (\not{p} - mc)(\not{p} + mc) &= 0 \end{aligned} \quad (6.68)$$

We stellen als oplossingen van de Dirac vergelijking de volgende ansatzen voor:

$$u^{(\alpha)}(p) = \frac{\not{p} + mc}{\sqrt{2m(E + mc^2)}} u^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) \quad \wedge \quad v^{(\alpha)}(p) = \frac{-\not{p} + mc}{\sqrt{2m(E + mc^2)}} v^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) \quad (6.69)$$

met toegevoegde spinoren

$$\bar{u}^{(\alpha)}(p) = \bar{u}^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) \frac{\not{p} + mc}{\sqrt{2m(E + mc^2)}} \quad \wedge \quad \bar{v}^{(\alpha)}(p) = \bar{v}^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) \frac{-\not{p} + mc}{\sqrt{2m(E + mc^2)}} \quad (6.70)$$

We kunnen bewijzen dat deze orthogonaal zijn. We berekenen per voorbeeld $\bar{u}^{(\alpha)}(p)u^{(\beta)}(p)$. Als tussenstap berekenen we eerst $\not{p} = \gamma^\mu p_\mu$.

$$\gamma^0 p_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} p_0 = \begin{pmatrix} p_0 & 0 \\ 0 & -p_0 \end{pmatrix} \quad (6.71)$$

$$\begin{aligned} \gamma^i p_i &= \gamma^0 \alpha_i p_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} p_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} p_i \\ &= \begin{pmatrix} 0 & p_i \sigma_i \\ -p_i \sigma_i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \\ -\vec{p} \cdot \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.72)$$

Combinatie van vergelijkingen 6.71 en 6.72 levert

$$\not{p} = \begin{pmatrix} p_0 & 0 \\ 0 & -p_0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \\ -\vec{p} \cdot \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_0 & -\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \\ \vec{p} \cdot \vec{\sigma} & -p_0 \end{pmatrix} \quad (6.73)$$

Nu volgt hieruit dat

$$\begin{aligned} (\not{p} + mc)^2 &= \not{p}^2 + 2mc\not{p} + m^2 c^2 = 2m^2 c^2 + 2mc\not{p} \\ &= 2m(mc^2 + c\not{p}) = 2m \begin{pmatrix} mc^2 + cp_0 & -c\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \\ c\vec{p} \cdot \vec{\sigma} & mc^2 - cp_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.74)$$

We kunnen dit gebruiken om

$$\bar{u}^{(\alpha)}(p)u^{(\beta)} = \frac{1}{2m(E + mc^2)} \bar{u}^{(\alpha)}(mc, \vec{0})(\not{p} + mc)^2 u^{(\beta)}(mc, \vec{0}) \quad (6.75)$$

te berekenen. Zij nu

$$\begin{aligned} u^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) &= \begin{pmatrix} \chi^{(\alpha)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \wedge \quad \chi^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \wedge \quad \chi^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \implies \bar{u}^{(\alpha)}(mc, \vec{0}) &= (\chi^{(\alpha)+} \quad 0) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = (\chi^{(\alpha)+} \quad 0) \\ \chi^{(1)+} &= (1 \quad 0) \quad \wedge \quad \chi^{(2)+} = (0 \quad 1) \end{aligned} \quad (6.76)$$

en analoog voor $u^{(\beta)}$. Dan vinden we

$$\begin{aligned} \bar{u}^{(\alpha)}(p)u^{(\beta)}(p) &= \frac{2m}{2m(E + mc^2)} (\chi^{(\alpha)+} \quad 0) \begin{pmatrix} mc^2 + cp_0 & -c\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \\ c\vec{p} \cdot \vec{\sigma} & mc^2 - cp_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^{(\beta)} \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{E + mc^2} ((mc^2 + cp_0)\chi^{(\alpha)+} \quad -c\vec{p} \cdot \vec{\sigma}\chi^{(\alpha)+}) \begin{pmatrix} \chi^{(\beta)} \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{mc^2 + cp_0}{E + mc^2} \chi^{(\alpha)+} \chi^{(\beta)} \\ &= \frac{mc^2 + c\frac{E}{c}}{E + mc^2} \delta_{\alpha\beta} \\ &= \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (6.77)$$

De andere orthogonaliteitsrelaties zijn compleet analoog.

7 Tweede kwantisatie

46. Vertrek van de actie van de fermion-creatie-operator a_α^+ op een ge-antisymmetriseerde producttoestand: $a_\alpha^+ |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = |\alpha \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$. **Leidt hieruit de actie af van de annihilatie-operator a_α op een algemene $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$.**

We weten dat de producttoestanden voldoen aan de resolutie van de identiteit.

$$\begin{aligned}
 a_\alpha |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle &= \sum_{M=0}^{\infty} \sum_{\{\alpha'\}}^O |\alpha'_1 \alpha'_2 \cdots \alpha'_M\rangle \langle \alpha'_1 \alpha'_2 \cdots \alpha'_M | a_\alpha | \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N \rangle \\
 &= \sum_{M=0}^{\infty} \sum_{\{\alpha'\}}^O |\alpha'_1 \alpha'_2 \cdots \alpha'_M\rangle \langle \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N | a_\alpha^+ | \alpha'_1 \alpha'_2 \cdots \alpha'_M \rangle^* \\
 &= \sum_{M=0}^{\infty} \sum_{\{\alpha'\}}^O |\alpha'_1 \alpha'_2 \cdots \alpha'_M\rangle \langle \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N | \alpha \alpha'_1 \alpha'_2 \cdots \alpha'_M \rangle^*
 \end{aligned} \tag{7.1}$$

hierbij stelt $\sum_{\{\alpha'\}}^O$ een som voor over de geordende verzameling van één-deeltjes niveaus.

Toestanden met een verschillend aantal deeltjes zijn orthogonaal zodat enkel de term met $M + 1 = N \iff M = N - 1$ overblijft. Bovendien is de normalisatie van de producttoestanden reëel zodat het complex toegevoegde teken $*$ kunnen weglaten. Ook willen we de toestand $|\alpha \alpha'_1 \alpha'_2 \cdots \alpha'_{N-1}\rangle$ terug ordenen. Stel dat α vlak voor α'_i hoort te staan, dan vereist herordening $i - 1$ transposities zodat er een voorfactor $(-1)^{i-1}$ verschijnt. We bevestigen dat het teken inderdaad niet wijzigt bij $i = 1$. Finaal hebben we dat

$$\begin{aligned}
 a_\alpha |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle &= \sum_{\{\alpha'\}}^O (-1)^{i-1} \delta_{\alpha_1 \alpha'_1} \delta_{\alpha_2 \alpha'_2} \cdots \delta_{\alpha_i \alpha} \delta_{\alpha_{i+1} \alpha'_i} \cdots \delta_{\alpha_N \alpha'_{N-1}} |\alpha'_1 \alpha'_2 \cdots \alpha'_{N-1}\rangle \\
 &= (-1)^{i-1} \delta_{\alpha_i \alpha} |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{i-1} \alpha_{i+1} \cdots \alpha_N\rangle \\
 &= \begin{cases} 0 & \alpha_i \neq \alpha \\ (-1)^{i-1} |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{i-1} \alpha_{i+1} \cdots \alpha_N\rangle & \alpha_i = \alpha \end{cases}
 \end{aligned} \tag{7.2}$$

47. Bewijs de anti-commutatierelatie $\{a_\alpha, a_\beta^+\} = \delta_{\alpha\beta}$.

We beschouwen 2 gevallen.

Geval 1: α is geen toestand van $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$.

$$\begin{aligned}
 a_\alpha a_\beta^+ |\alpha \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle &= a_\alpha |\beta \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = \delta_{\alpha\beta} |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle \\
 a_\beta^+ a_\alpha |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle &= a_\beta^+ 0 = 0 \\
 \implies \{a_\alpha, a_\beta^+\} &= \delta_{\alpha\beta}
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Geval 2: α is een toestand van $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$ en zonder verlies van algemeenheid stellen we $\alpha_1 = \alpha$.

$$\begin{aligned}
 a_\alpha a_\beta^+ |\alpha \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle &= \begin{cases} 0 & \beta = \alpha \\ a_\alpha |\beta \alpha \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = -|\beta \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle & \beta \neq \alpha \end{cases} \\
 a_\beta^+ a_\alpha |\alpha \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle &= a_\beta^+ |\alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = |\beta \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle \\
 \implies \{a_\alpha, a_\beta^+\} &= \delta_{\alpha\beta}
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

Houdt bij de laatste implicatie rekening met het feit dat $|\beta \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = |\alpha \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$ als $\alpha = \beta$.

48. Toon aan dat de algemene vorm van de één-deeltjesoperator in tweede kwantisatie gegeven wordt door $\hat{F} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha|F|\beta \rangle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}$.

Deel 1: de één-deeltjes operator F .

Beschouw de één-deeltjesoperator F die inwerkt op de 1-deeltjes ruimte.

$$F = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} |\alpha\rangle \langle \alpha|F|\beta\rangle \langle \beta| \quad (7.5)$$

waar we 2 keer de compleetheidsrelatie hebben gebruikt. We zien al snel in dat F symmetrisch is, mits wegens de mogelijkheid om dummy indices te wisselen

$$F^{\dagger} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta|F|\alpha\rangle \langle \alpha| = F \quad (7.6)$$

In een N -deeltjes ruimte vinden we

$$F_N = \sum_{i=1}^N F(i) \quad (7.7)$$

waarbij elke $F(i)$ inwerkt op deeltje i en

$$\begin{aligned} F(i) |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle &= |\alpha_1\rangle |\alpha_2\rangle \cdots \left[\sum_{\alpha} \sum_{\beta_i} |\beta_i\rangle \langle \beta_i|F|\alpha\rangle \langle \alpha|\alpha_i\rangle \right] |\alpha_{i+1}\rangle \cdots |\alpha_N\rangle \\ &= \sum_{\beta_i} |\alpha_1\rangle |\alpha_2\rangle \cdots |\beta_i\rangle \langle \beta_i|F|\alpha_i\rangle |\alpha_{i+1}\rangle \cdots |\alpha_N\rangle \\ &= \sum_{\beta_i} \langle \beta_i|F|\alpha_i\rangle |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{i-1} \beta_i \alpha_{i+1} \cdots \alpha_N\rangle \end{aligned} \quad (7.8)$$

Hieruit concluderen we dan dat F_N als volgt inwerkt:

$$F_N |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{\beta_i} \langle \beta_i|F|\alpha_i\rangle |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{i-1} \beta_i \alpha_{i+1} \cdots \alpha_N\rangle \quad (7.9)$$

Mits F symmetrisch is, is F_N dat ook. F_N commuteert dus met de (anti)symmetriseerder en dus is

$$F_N |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{\beta_i} \langle \beta_i|F|\alpha_i\rangle |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{i-1} \beta_i \alpha_{i+1} \cdots \alpha_N\rangle \quad (7.10)$$

Deel 2: De Fock operator.

Beschouw nu de Fock operator

$$\hat{F} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha|F|\beta \rangle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} \quad (7.11)$$

Beschouw dan voor fermionen de volgende commutator:

$$\begin{aligned} [\hat{F}, a_{\alpha_i}^{\dagger}] &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha|F|\beta \rangle [a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}, a_{\alpha_i}^{\dagger}] \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha|F|\beta \rangle (a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha_i}^{\dagger} - a_{\alpha_i}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}) \end{aligned} \quad (7.12)$$

Als we nu gebruik maken van het feit dat creatie-operatoren anti-commuteren en het feit dat $\{a_{\alpha}, a_{\beta}^{\dagger}\} =$

$\delta_{\alpha\beta}$, dan vinden we

$$\begin{aligned}
[\hat{F}, a_{\alpha_i}^\dagger] &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | F | \beta \rangle (a_\alpha^\dagger a_\beta a_{\alpha_i}^\dagger + a_\alpha^\dagger a_{\alpha_i}^\dagger a_\beta) \\
&= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | F | \beta \rangle a_\alpha^\dagger \{a_\beta, a_{\alpha_i}^\dagger\} \\
&= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | F | \beta \rangle a_\alpha^\dagger \delta_{\beta\alpha_i} = \sum_{\alpha} \langle \alpha | F | \alpha_i \rangle a_\alpha^\dagger \\
&= \sum_{\beta_i} \langle \beta_i | F | \alpha_i \rangle a_{\beta_i}^\dagger
\end{aligned} \tag{7.13}$$

We laten nu de Fock operator inwerken op toestand $|\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle$ en zullen bewijzen dat dit hetzelfde resultaat levert als vergelijking 7.10, of dus dat $\hat{F}$ de algemene uitdrukking is van de één-deeltjes operator.

$$\begin{aligned}
\hat{F} |\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_N\rangle &= \hat{F} a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle \\
&= [\hat{F}, a_{\alpha_1}^\dagger] a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle + a_{\alpha_1}^\dagger \hat{F} a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle \\
&= \sum_{i=1}^N a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_{i-1}}^\dagger [\hat{F}, a_{\alpha_i}^\dagger] a_{\alpha_{i+1}}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \sum_{\beta_i} \langle \beta_i | F | \alpha_i \rangle a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_{i-1}}^\dagger a_{\beta_i}^\dagger a_{\alpha_{i+1}}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \sum_{\beta_i} \langle \beta_i | F | \alpha_i \rangle \left| a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger \cdots a_{\alpha_{i-1}}^\dagger a_{\beta_i}^\dagger a_{\alpha_{i+1}}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger \right\rangle
\end{aligned} \tag{7.14}$$

Een analoog bewijs kan opgesteld worden voor bosonen.

49. Toon aan dat in een specifieke basis van de 1-deeltjes Hilbertruimte de operator $\hat{F}$ een diagonale vorm aanneemt $\hat{F} = \sum_{\alpha} F_{\alpha} a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha}$.

We veranderen van een orthogonale basis $|\alpha\rangle$ van de 1-deeltjes Hilbertruimte naar een andere basis $|\alpha'\rangle$ via een unitaire transformatie

$$|\alpha'\rangle = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} |\alpha\rangle \tag{7.15}$$

Mits $|\alpha\rangle = a_{\alpha}^\dagger |0\rangle$ en $|\alpha'\rangle = a_{\alpha'}^\dagger |0\rangle$ zien we dat de creatie-operatoren ook diezelfde transformatie volgen:

$$a_{\alpha'}^\dagger = \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} a_{\alpha}^\dagger \tag{7.16}$$

Om de inverse transformatie te vinden vermenigvuldigen we beide leden met $U_{\beta\alpha'}^*$ en sommeren we over α' .

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha} U_{\beta\alpha'}^* a_{\alpha'}^\dagger &= \sum_{\alpha'} U_{\beta\alpha'}^* \sum_{\alpha} U_{\alpha\alpha'} a_{\alpha}^\dagger = \sum_{\alpha'} U_{\beta\alpha'}^* \sum_{\alpha} (U_{\alpha'\alpha}^*)^\dagger a_{\alpha}^\dagger \\
&= \sum_{\alpha} \delta_{\beta\alpha}^* a_{\alpha}^\dagger = \sum_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} a_{\alpha}^\dagger \\
&= a_{\beta}^\dagger \\
\stackrel{\alpha \rightarrow \alpha', \beta \rightarrow \alpha}{\Longrightarrow} a_{\alpha}^\dagger &= \sum_{\alpha'} U_{\alpha\alpha'}^* a_{\alpha'}^\dagger
\end{aligned} \tag{7.17}$$

Merk op dat dat gebruik hebben gemaakt van het feit dat de kronecker delta reëel en symmetrisch is.

De annihilatie operator wordt dus ook gegeven door

$$a_{\beta} = \sum_{\beta'} U_{\beta\beta'} a_{\beta'} \tag{7.18}$$

Algemeen is nu

$$\begin{aligned}
\hat{F} &= \sum_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} \\
&= \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} F_{\alpha\beta} \mathcal{U}_{\alpha\alpha'}^* a_{\alpha'}^{\dagger} \mathcal{U}_{\beta\beta'} a_{\beta'} \\
&= \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \mathcal{U}_{\alpha'\alpha}^{\dagger} F_{\alpha\beta} \mathcal{U}_{\beta\beta'} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\beta'} \\
&= \sum_{\alpha'\beta'} ([\mathcal{U}^{\dagger}][F][\mathcal{U}])_{\alpha'\beta'} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\beta'}
\end{aligned} \tag{7.19}$$

Men kan nu altijd een unitaire matrix vinden die de matrix $[F]$ diagonaliseert, namelijk

$$([\mathcal{U}^{\dagger}][F][\mathcal{U}])_{\alpha'\beta'} a_{\alpha'} = F_{\alpha'} \delta_{\alpha'\beta'} a_{\alpha'} \tag{7.20}$$

□

Appendices

A Tensor index notatie

A.1 De conventie

Een tensor is een multi-lineaire afbeelding die verschillende algebraïsche objecten afbeelden op elkaar, e.g.: 2 vectoren op een scalair, 2 vectoren op een vector, of zelfs tensoren op andere tensoren.

We kunnen een tensor van om het even welke rang voorstellen binnen een basis aan de hand van de componenten van de tensor binnen de basis. Beschouw bijvoorbeeld een tensor T_j^i van rang 2 in de Euclidische ruimte.

$$T_j^i = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Deze tensor stelt simpelweg een rotatie van 90° voor.

Merk op dat dat de notatie T_j^i kan verwijzen naar zowel de gehele tensor, als ook naar een specifiek element. Wanneer dit laatste het geval is, vervangen we de algemeen indices vaak door cijfers. Zo is bijvoorbeeld $T_2^1 = -1$ terwijl $T_2^2 = 0$.

Ik weet dat dit een verwarrende conventie is, maar dit is nu eenmaal de conventie die de cursus gebruikt, het is ook geen ongebruikelijke conventie.

Verder is het ook zo dat we de Einstein sommatie conventie gebruiken (tenzij expliciet anders vermeld): wanneer een index binnen één term 2 keer voorkomt, dan wordt er gesommeerd over de range van de index. Zij T_j^i en S_j^i twee rang 2 tensoren, dan noteren we dus

$$(TS)^i_j = \sum_{k=1}^3 T_k^i S_j^k = T_k^i S_j^k \quad (\text{A.2})$$

A.2 De kronecker-delta en het levi-civita symbool

De kronecker-delta δ_j^i is een tensor die vaak gebruikt wordt om de eenheidsmatrix voor te stellen. De definitie van de kronecker-delta is als volgt

$$\delta_j^i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Een uitbreiding hierop is het levi-civita symbool ε_{ijk} gedefinieerd als

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (ijk) \text{ is een even permutatie} \\ -1 & (ijk) \text{ is een oneven permutatie} \\ 0 & (ijk) \text{ is geen permutatie} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

De definitie impliceert dat we de indices cyclisch mogen permuteren zonder iets te veranderen, maar er een minteken verschijnt wanneer we 2 indices wisselen. Zij bijvoorbeeld (ijk) een even permutatie, dan is

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ijk} &= \varepsilon_{jki} = \varepsilon_{kij} = +1 \\ \varepsilon_{jik} &= \varepsilon_{ikj} = \varepsilon_{kji} = -1 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Verder heeft het levi-civita symbool ook de interessante eigenschap dat

$$\varepsilon^{ijk} \varepsilon_{mnk} = \delta_m^i \delta_n^j - \delta_n^i \delta_m^j \quad (\text{A.6})$$

We zullen dit nu beargumenteren. Het linker lid stelt duidelijk een som voor, voor vaste i, j, m en n zal er echter maar één term overblijven (laat ons k' nemen), namelijk deze waarbij (ijk') en (mnk') beide een permutatie voorstellen. Als dan (ijk') een even permutatie is, dan is

$$\varepsilon^{ijk} \varepsilon_{mnk} = \varepsilon_{mnk'} = \begin{cases} +1 & (mnk') \text{ is een even permutatie} \\ -1 & (mnk') \text{ is een oneven permutatie} \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Maar als (ijk') en (mnk') beide even permutaties zijn, dan kan het niet anders dan dat $i = m$ en $j = n$. De bijdrage van dit geval aan het linker lid is dus

$$\delta_m^i \delta_n^j \quad (\text{A.8})$$

Als (ijk') even is, terwijl (mnk') oneven is, dan kan het niet anders dan dat $i = n$ en $j = m$, de bijdrage van dit geval is dus

$$-\delta_n^i \delta_m^j \quad (\text{A.9})$$

Mits we eisen dat (mnk') een permutatie is, kan het niet zo zijn dat $i = m = n$, en dus is minstens één van de 2 bovenstaande vergelijkingen A.8 en A.9 nul. We schrijven dus het linker lid als

$$\varepsilon^{ijk} \varepsilon_{mnk} = \delta_m^i \delta_n^j - \delta_n^i \delta_m^j \quad (\text{A.10})$$

□

A.3 Het inwendige- en uitwendige product

Dankzij tensor index notatie kunnen we nu het inproduct en het uitwendige product vrij makkelijk voorstellen. Zij $\vec{u}, \vec{v}$ en $\vec{w} := \vec{u} \times \vec{v}$ drie vectoren, dan is

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = u^i v_i \quad (\text{A.11})$$

$$w_i = (\vec{u} \times \vec{v})_i = \varepsilon_{ijk} u^j v^k \quad (\text{A.12})$$

A.4 Metrische tensoren: index raising en lowering

De metrische tensor η_{ij} (van rang 2) en haar inverse η^{ij} van een variëteit (zoals een oppervlak) stellen ons in staat om covariante indices (subscript) contra-variant (superscript) te maken en vice versa⁷. Omdat η_{ij} en η^{ij} elkaars inversen zijn, moet gelden dat

$$\begin{aligned} \eta^{ik} \eta_{kj} &= \delta_j^i \\ \eta_{ik} \eta^{kj} &= \delta_i^j \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Merk op dat de kronecker-delta symmetrisch is.

Zij T_j^i een rang 2 tensor. Dan kunnen we indices raisen en loweren als

$$\begin{aligned} T^{ij} &= T_k^i \eta^{kj} \\ T_{ij} &= \eta_{ik} T_j^k \\ T_i^j &= \eta_{ik} T_l^k \eta^{lj} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

De manier waarop T_j^i, T^{ij}, T_{ij} en T_i^j onderling verschillen hangt af van de metriek die beschouwt wordt. Binnen de context van dit vak zijn er slechts 2 belangrijke metrieken: de Euclidische metriek (hier in 3 dimensies)

$$e_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \delta_{ij} \quad (\text{A.15})$$

en de Minkowski metriek

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.16})$$

De Minkowski metriek werkt in 4 dimensies, ruimte en tijd, de indices lopen dan ook van 0 tot 3, waarbij 0 de tijdscomponent voorstelt.

⁷De toepassingen van metrische tensoren, en de betekenis van covariante- en contravariante indices zijn veel uitgebreider dan hier vermeld

Laat ons nu eens kijken naar vergelijking A.14 in het geval van deze 2 metrische tensoren.

$$\begin{aligned}
T^{ij} &= T^i_k e^{kj} = T^i_k \delta^{kj} = T^i_j \\
T_{ij} &= e_{ik} T^k_j = \delta_{ik} T^k_j = T^i_j \\
T_i{}^j &= e_{ik} T^k_l e^{lj} = \delta_{ik} T^k_l \delta^{lj} = T^i_j
\end{aligned} \tag{A.17}$$

Binnen de Euclidische ruimte is er dus niet echt een onderscheid tussen covariante- en contravariante indices. We noteren dan ook doorheen de rest van dit document vaak elke tensor in de Euclidische ruimte met covariante indices.

Binnen de Minkowski metriek moeten we echter een onderscheidt maken tussen tijd-en ruimte indices.

$$\begin{aligned}
T^{\mu\nu} &= T^\mu_\alpha g^{\alpha\nu} = T^\mu_0 g^{0\nu} + T^\mu_k g^{k\nu} \\
&= T^\mu_0 \delta^{0\nu} - T^\mu_k \delta^{k\nu} \\
T_{\mu\nu} &= g_{\mu\alpha} T^\alpha_\nu = g_{\mu 0} T^0_\nu + g_{\mu k} T^k_\nu \\
&= \delta_{\mu 0} T^0_\nu - \delta_{\mu k} T^k_\nu \\
T_\mu{}^\nu &= g_{\mu\alpha} T^\alpha_\beta g^{\beta\nu} = (g_{\mu 0} T^0_\beta + g_{\mu k} T^k_\beta) g^{\beta\nu} \\
&= g_{\mu 0} T^0_0 g^{0\nu} + g_{\mu 0} T^0_k g^{k\nu} + g_{\mu k} T^k_0 g^{0\nu} + g_{\mu k} T^k_l g^{l\nu} \\
&= \delta_{\mu 0} T^0_0 \delta^{0\nu} - \delta_{\mu 0} T^0_k \delta^{k\nu} - \delta_{\mu k} T^k_0 \delta^{0\nu} + \delta_{\mu k} T^k_l \delta^{l\nu}
\end{aligned} \tag{A.18}$$

Deze uitdrukkingen zijn duidelijk wat ingewikkelder. Uiteindelijk vinden we dat

$$\begin{aligned}
T^{\mu\nu} &= \begin{cases} T^\mu_0 & \nu = 0 \\ -T^\mu_k & \nu = k \end{cases} \\
T_{\mu\nu} &= \begin{cases} T^0_\nu & \mu = 0 \\ -T^k_\nu & \mu = k \end{cases} \\
T_\mu{}^\nu &= \begin{cases} T^0_0 & \mu = \nu = 0 \\ -T^0_k & \mu = 0 \wedge \nu = k \\ -T^k_0 & \mu = k \wedge \nu = 0 \\ T^k_l & \mu = k \wedge \nu = l \end{cases}
\end{aligned} \tag{A.19}$$

We stellen vast dat we onze indices goed in de gaten moeten houden in Hoofdstuk 6.

B Commutator eigenschappen

De commutator van 2 operatoren $\hat{A}$ en $\hat{B}$ binnen een ring is gedefinieerd als

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (\text{B.1})$$

Er zijn 5 eigenschappen van de commutator waarin we geïnteresseerd zijn.

1. De commutator is lineair

$$\begin{aligned} [\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] &= (\hat{A} + \hat{B})\hat{C} - \hat{C}(\hat{A} + \hat{B}) \\ &= (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) \\ &= [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

2. Elke operator commuteert met zichzelf

$$[\hat{A}, \hat{A}] = \hat{A}\hat{A} - \hat{A}\hat{A} = 0 \quad (\text{B.3})$$

3. Elke operator commuteert met de triviale operator

$$[\hat{A}, \hat{1}] = \hat{A}\hat{1} - \hat{1}\hat{A} = \hat{A} - \hat{A} = 0 \quad (\text{B.4})$$

4. De commutator is antisymmetrisch

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (\text{B.5})$$

5. $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

C Gradiënt, divergentie en laplaciaan in sferische coördinaten

C.1 Gradiënt en divergentie

We vermelden meteen al dat we werken met de fysica conventie voor de bolcoördinaten: φ is de azimuthale hoek tussen 0 en 2π , θ is de poolhoek tussen 0 en π gemeten vanaf de positieve z -as. De omzetting tussen cartesische en sferische coördinaten is als volgt

$$\begin{cases} x = r \cos \varphi \sin \theta \\ y = r \sin \varphi \sin \theta \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

De eenheidsvectoren in sferische coördinaten bekomen we door cartesische coördinaten af te leiden naar de sferische coördinaten.

$$\begin{aligned} & \begin{cases} \vec{e}_r = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta) \\ \vec{e}_\varphi \propto (-r \sin \varphi \sin \theta, r \cos \varphi \sin \theta, 0) \\ \vec{e}_\theta \propto (r \cos \varphi \cos \theta, r \sin \varphi \cos \theta, -r \sin \theta) \end{cases} \\ \implies & \begin{cases} \vec{e}_r = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta) \\ \vec{e}_\varphi = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0) \\ \vec{e}_\theta = (\cos \varphi \cos \theta, \sin \varphi \cos \theta, -\sin \theta) \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Nu gebruiken we de kettingregel om de afgeleiden naar de sferische coördinaten te herschrijven.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} &= \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial r} \frac{\partial}{\partial z} \\ &= \cos \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial x} + \sin \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial y} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial z} \\ &= \vec{e}_r \cdot \vec{\nabla}(x, y, z) \\ \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} &= \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} \\ &= -r \sin \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial x} + r \cos \varphi \sin \theta \frac{\partial}{\partial y} + 0 \frac{\partial}{\partial z} \\ &= r \sin \theta \vec{e}_\varphi \cdot \vec{\nabla}(x, y, z) \\ \\ \frac{\partial}{\partial \theta} &= \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial z} \\ &= r \cos \varphi \cos \theta \frac{\partial}{\partial x} + r \sin \varphi \cos \theta \frac{\partial}{\partial y} - r \sin \theta \frac{\partial}{\partial z} \\ &= r \vec{e}_\theta \cdot \vec{\nabla}(x, y, z) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Nu kunnen we ook een uitdrukking vinden voor de nabla-operator in sferische coördinaten door de operator te projecteren op het sferische assenstelsel.

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}(r, \varphi, \theta) &= \vec{e}_r(\vec{e}_r \cdot \vec{\nabla}(x, y, z)) + \vec{e}_\varphi(\vec{e}_\varphi \cdot \vec{\nabla}(x, y, z)) + \vec{e}_\theta(\vec{e}_\theta \cdot \vec{\nabla}(x, y, z)) \\ &= \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\varphi \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \vec{e}_\theta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

C.2 Laplaciaan

Ons vorige resultaat laat ons ook toe om de laplaciaan $\nabla^2 = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ uit te werken. Door de productregel van afgeleiden leidt dit tot 2 soorten termen: ‘directe’- en ‘indirecte’ termen. De directe termen ontstaan bij die termen waarin de afgeleiden niet inwerken op de eenheidsvectoren, de indirecte termen zijn dan uiteraard de andere termen.

De directe termen leveren dankzij de orthonormaliteit van de basisvectoren triviaal

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (\text{C.5})$$

Voor de indirecte termen moeten we kijken naar afgeleiden van de basisvectoren. We zien onmiddellijk aan vergelijking C.2 dat de afgeleiden naar r 0 zijn, hier zijn dus geen indirecte bijdragen.

We bekijken vervolgens de afgeleiden naar φ .

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_r = (-\sin \varphi \sin \theta, \cos \varphi \sin \theta, 0) = \sin \theta \vec{e}_\varphi \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi = (-\cos \varphi, -\sin \varphi, 0) = -\sin \theta \vec{e}_r - \cos \theta \vec{e}_\theta \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\theta = (-\sin \varphi \cos \theta, \cos \varphi \cos \theta, 0) = \cos \theta \vec{e}_\varphi \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

De indirecte termen hieruit volgen dus enkel uit de eerste en de tweede vergelijking, wegens de orthonormaliteit van de basisvectoren.

$$\frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \quad (\text{C.7})$$

Als laatste kijken we naar de indirecte termen afkomstig van afgeleiden naar θ .

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_r = (\cos \varphi \cos \theta, \sin \varphi \cos \theta, -\sin \theta) = \vec{e}_\theta \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_\varphi = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_\theta = (-\cos \varphi \sin \theta, -\sin \varphi \sin \theta, -\cos \theta) = -\vec{e}_r \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

We zien in dat enkel de eerste vergelijking kan bijdragen.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \quad (\text{C.9})$$

Alles samenvoegen (vergelijkingen C.5, C.7 en C.9) levert

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

D Uitwerking afgeleiden vraag 15

In deze appendix werken we de afgeleiden uit van de oplossing van de Schrödinger vergelijking 3.33.

$$R_{El}(\rho) = C_{El}\rho^l e^{-\rho/2} \omega_{El}(\rho) = C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} [\rho^2 \omega] \quad (D.1)$$

We zoeken eerste de afgeleide van $C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2}$.

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\rho} \left(C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \right) &= C_{El} \left[(l-2)\rho^{l-3} e^{-\rho/2} - \frac{1}{2}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \right] \\ &= C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left[(l-2)\rho^{-1} - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (D.2)$$

De afgeleide van $R_{El}(\rho)$ is dan

$$\begin{aligned} R'_{El}(\rho) &= \frac{d}{d\rho} \left(C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \right) \rho^2 \omega + C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \frac{d}{d\rho} (\rho^2 \omega) \\ &= C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left[\left((l-2)\rho^{-1} - \frac{1}{2} \right) \rho^2 \omega + 2\rho\omega + \rho^2 \omega' \right] \\ &= C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left[l\rho\omega + \rho^2 \left(\omega' - \frac{1}{2}\omega \right) \right] \end{aligned} \quad (D.3)$$

De tweede afgeleide is dan

$$\begin{aligned} R''_{El}(\rho) &= \frac{d}{d\rho} \left(C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \right) \left(l\rho\omega + \rho^2 \left[\omega' - \frac{1}{2}\omega \right] \right) \\ &\quad + C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \frac{d}{d\rho} (l\rho\omega) \\ &\quad + C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \frac{d}{d\rho} (\rho^2) \left(\omega' - \frac{1}{2}\omega \right) \\ &\quad + C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \rho^2 \frac{d}{d\rho} \left(\omega' - \frac{1}{2}\omega \right) \\ &= C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left\{ \left((l-2)\rho^{-1} - \frac{1}{2} \right) \left(l\rho\omega + \rho^2 \left(\omega' - \frac{1}{2}\omega \right) \right) \right. \\ &\quad + l\omega + l\rho\omega' \\ &\quad + 2\rho \left(\omega' - \frac{1}{2}\omega \right) \\ &\quad \left. + \rho^2 \omega'' - \frac{1}{2}\rho^2 \omega' \right\} \\ &= C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left\{ l(l-2)\omega + (l-2)\rho\omega' - \frac{1}{2}(l-2)\rho\omega - \frac{1}{2}l\rho\omega \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}\rho^2 \omega' + \frac{1}{4}\rho^2 \omega + l\omega + l\rho\omega' + 2\rho\omega' - \rho\omega + \rho^2 \omega'' - \frac{1}{2}\rho^2 \omega' \right\} \\ &= C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left\{ l(l-1)\omega + \rho \left(l\omega' - 2\omega' - \frac{1}{2}l\omega + \omega - \frac{1}{2}l\omega + l\omega' + 2\omega' - \omega \right) \right. \\ &\quad \left. + \rho^2 \left(-\frac{1}{2}\omega' + \frac{1}{4}\omega + \omega'' - \frac{1}{2}\omega' \right) \right\} \\ &= C_{El}\rho^{l-2} e^{-\rho/2} \left\{ l(l-1)\omega + \rho(-l\omega + 2l\omega') + \rho^2 \left(\frac{1}{4}\omega - \omega' + \omega'' \right) \right\} \end{aligned} \quad (D.4)$$

E Complexe integralen

E.1 De residustelling

Zij U een enkelvoudig samenhangende open deelverzameling van het complexe vlak $\mathbb{C}$ die een eindige verzameling van punten $\{a_1, \dots, a_n\}$ bevat. Zij nu $U_0 := U \setminus \{a_1, \dots, a_n\}$ en f holomorf over U_0 . Zij verder γ een positief georiënteerde gesloten enkelvoudige kromme⁸, dan geldt dat

$$\oint_{\gamma} f(z) dz = 2\pi i \sum_k \text{Res}(f, a_k) \quad (\text{E.1})$$

waarbij de som loopt over de singulariteiten a_k .

E.2 Lemma van Jordan

Beschouw een continue complexe functie $f(z)$ gedefinieerd op de half-cirkelvormige contour $C_R := \{Re^{i\theta} | \theta \in [0, \pi]\}$ met straal $R > 0$, gecentreerd rond de oorsprong, en gelegen in het bovenste halfvlak van het complexe vlak $\mathbb{C}$. Als dan

$$f(z) = e^{iaz} g(z) \quad (a > 0) \quad (\text{E.2})$$

, dan geldt dat

$$\left| \int_{C_R} f(z) dz \right| \leq \frac{\pi}{a} M_R \quad (\text{E.3})$$

waarbij

$$M_R := \max_{\theta \in [0, \pi]} |g(Re^{i\theta})| \quad (\text{E.4})$$

Merk dan op dat in het geval $f(z)$ continu is over de contour C_R voor alle grote R , dat dan

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{C_R} f(z) dz &= 0 \\ \text{als } \lim_{R \rightarrow \infty} M_R &= 0 \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

In het bijzonder wordt aan deze voorwaarde voldaan wanneer $g(z) = \frac{F(z)}{Q(z)}$ een rationale functie is met $\deg F(z) \leq \deg Q(z) + 1$

⁸Dit is niet de meest algemene vorm van residutheorem, maar het volstaat voor onze doeleinden.

F Greense functies door complexe integralen

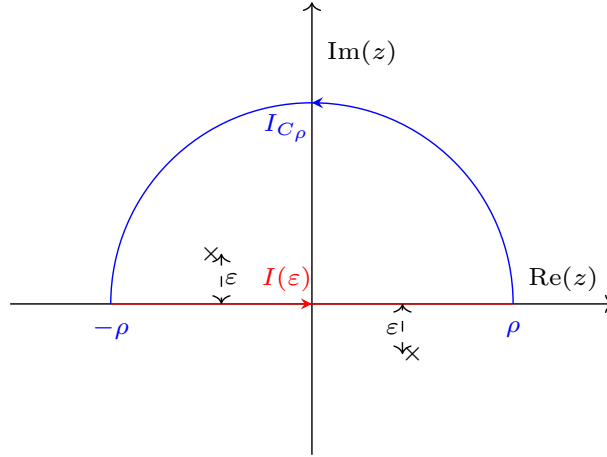
De integraal gegeven in vergelijking 4.17 kan op nog 2 andere manieren uitgerekend worden.

De eerste maakt gebruik van de complexe functie

$$f(z) = \frac{z}{(z - (k - i\varepsilon))(z - (-k + i\varepsilon))} e^{iz|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{F.1})$$

en de contour gegeven in figuur 7. Dit zal via analoge rekenmethoden aanleiding geven tot

$$\mathcal{G}^-(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{e^{-ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{F.2})$$



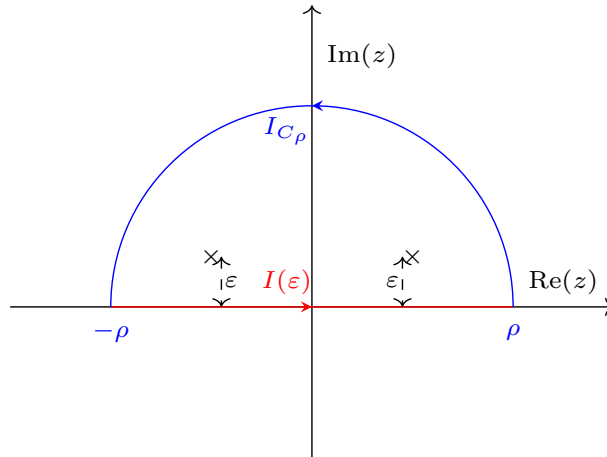
Figuur 7: Contour voor de complexe integraal voor een ingaande radiale golf functie.

De tweede methode neemt beide singulariteiten in rekening, en het resultaat is equivalent aan de exacte oplossing die men zou verkrijgen als men standaardmethoden gebruikt voor complexe integralen. Men beschouwt de complexe functie

$$f(z) = \frac{z}{(z - (k + i\varepsilon))(z - (-k + i\varepsilon))} e^{iz|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{F.3})$$

en de contour gegeven in figuur 8. Dit zal via analoge rekenmethoden aanleiding geven tot

$$\mathcal{G}^1(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{\cos(k|\vec{r} - \vec{r}'|)}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{F.4})$$

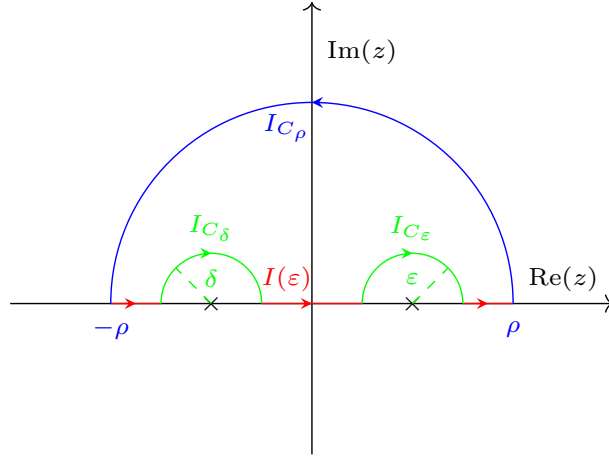


Figuur 8: Contour voor de complexe integraal voor een staande radiale golf functie.

Voor deze laatste kan men ook de standaardmethoden gebruiken, en daarbij de standaard contour zoals weergegeven in figuur 9. Het enige waar we hier rekening mee moeten houden zijn de halve-cirkelsegmenten I_{C_δ} en I_{C_ε} die in negatieve zin doorlopen worden. Voor deze laat men zowel δ als ε naar nul gaan, dit levert opnieuw het resultaat, mits men vindt dat

$$\begin{aligned}\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{C_\delta} f(z) dz &= -i\pi \text{Res}(f, -k) \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{C_\varepsilon} f(z) dz &= -i\pi \text{Res}(f, k) \\ f(z) &= \frac{z}{z^2 - k^2} e^{iz|\vec{r} - \vec{r}'|}\end{aligned}\tag{F.5}$$

De grote cirkelsector valt nog altijd weg wegens het lemma van Jordan, en er zijn geen singulariteiten binnen de contour.



Figuur 9: Contour voor de complexe integraal voor een staande radiale golffunctie.

G Referentielijst

1. Verschelde, H. (2020). *Kwantummechanica II* [cursus]. Ufora. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van <https://ufora.ugent.be/d21/le/content/1025834/viewContent/2415479/View>
2. Dickhoff, W. H., & Van Neck, D. (2008). *MANY-BODY THEORY EXPOSED! Propagator Description of Quantum Mechanics in Many-Body Systems* (2e ed.). World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.
3. Van Neck, D., & Bultinck, N. (2024). *AfleidingenKM2* [slides]. Ufora. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van <https://ufora.ugent.be/d21/le/content/1025834/viewContent/2605545/View>
4. Van Neck, D. (2024). *AfleidingenKM2_2nd_quantization* [slides]. Ufora. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van <https://ufora.ugent.be/d21/le/content/1025834/viewContent/2605547/View>
5. Cauchy product. (2025, 28 januari). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://en.wikipedia.org/wiki/Cauchy_product
6. Spinor. (2025, 26 mei). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van <https://en.wikipedia.org/wiki/Spinor>
7. Commutator. (2025, 30 juni). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van <https://en.wikipedia.org/wiki/Commutator>
8. Ricci calculus. (2025, 2 juni). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://en.wikipedia.org/wiki/Ricci_calculus
9. Tensor. (2025, 15 juli). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van <https://en.wikipedia.org/wiki/Tensor>
10. Metric tensor. (2025, 19 mei). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://en.wikipedia.org/wiki/Metric_tensor
11. Levi-Civita symbol. (2025, 10 juli). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://en.wikipedia.org/wiki/Levi-Civita_symbol
12. Exponential function. (2025, 7 juli). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://en.wikipedia.org/wiki/Exponential_function
13. Contour integration. (2025, 12 juli). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://en.wikipedia.org/wiki/Contour_integration
14. Jordan-kromme. (2025, 27 mei). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van <https://nl.wikipedia.org/wiki/Jordan-kromme>
15. Enkelvoudig samenhangende ruimte. (2023, 3 juli). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://nl.wikipedia.org/wiki/Enkelvoudig_samenhangende_ruimte
16. Residue theorem. (2025, 29 januari). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://en.wikipedia.org/wiki/Residue_theorem
17. Jordan's lemma. (2025, 22 april). In *Wikipedia*. Geraadpleegd op 17 juli 2025, van https://en.wikipedia.org/wiki/Jordan%27s_lemma