$\int d^3r\, f(\vec r)\,\delta(\vec r-\vec r_0) = f(\vec r_0)$

Kwantummechanica : Postulaten van de kwantummechanica

I De toestand v/e systeem op tijdstip t is beschreven door een toestandsvector of ket $|\Psi(t)\rangle$. ↳ v/e toestand $\vec r$ als $\vec p$ er een kracht op uitoefent

I ~ kolomvector $\in \mathcal{H}$ de Hilbertruimte (∞ dim toestandsruimte)

$|\Psi(t)\rangle^\dagger = \langle\Psi(t)|$ → bra

$\langle\Psi|\Phi\rangle = \int d\vec r\, \Psi(\vec r,t)^*\, \Phi(\vec r,t)$, $\langle\Psi|\Psi\rangle < \infty$

$\Psi(\vec r,t) = \langle\vec r|\Psi(t)\rangle$ orthogonaliteitsrelatie $\langle\vec r|\vec r\,'\rangle = \delta(\vec r-\vec r\,')$

→ coeff. v/d toestand tov basis $|\vec r\rangle$ sluitingsrelatie $\int d\vec r\, |\vec r\rangle\langle\vec r| = \mathbb{1}$

→ $|\Psi\rangle = \int d\vec r\, \Psi(\vec r)|\vec r\rangle$ en $\Psi(\vec r\,') = \int d\vec r\, \Psi(\vec r)\langle\vec r\,'|\vec r\rangle$

⇒ basis $\{|\vec r\rangle\}$: elementen ervan behoren zelf niet tot de ruimte v/d toestanden. $\langle\vec r|\vec r\rangle = \infty$

↳ nuttig om toest. erin te ontwikkelen (bv. gebruik makend van normeerbare toestand), maar basis zelf niet normeerbaar

~ vlakke golven

→ golffunctie "ontwikkeld" in vlakke golven:

$$\Psi(\vec r,t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d\vec p\; \bar\Psi(\vec p,t)\, e^{i\vec p\cdot\vec r/\hbar}$$

met $\bar\Psi(\vec p,t) = \langle\vec p|\Psi(t)\rangle$ fouriergetransformeerde die representatie in de momentumruimte weergeeft

invers: $\bar\Psi(\vec p,t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d\vec r\; \Psi(\vec r,t)\, e^{-i\vec p\cdot\vec r/\hbar}$

⟹ alw. sluitingsrelatie: $\langle\vec p|\vec r\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\, e^{-i\vec p\cdot\vec r/\hbar}$

alw. sluitingsrelatie op 2 toestanden: $\langle\varphi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\varphi\rangle^*$

II Met een meetbare fysische grootheid A komt een observabele A overeen.

observabele A is een hermitische operator waarvan de eigenvect. een basis vormen in de ruimte v/d toestanden ↳ $A^+ = A$, $(AB)^+ = B^+A^+$ ↳ een orthonormale basis van eigvect

- eigw λ van A altijd reëel

notatie $A_{ij} = \langle\varphi_i|A|\varphi_j\rangle$ (matrixelementen A i/d discrete basis $|\varphi_n\rangle$ van eigtoest v/e bepaalde hamiltoniaan H)

⇒ $(A^+)_{ij} = (A_{ji})^+ = (A_{ji})^*$

↳ H is een observabele gelinkt aan de meetbare grootheid energie

III Elke meting van een fysische grootheid A heeft als resultaat een eigwaarde a_n van de observabele A. herm. operator → reële eigw ⟼ resultaat

indien spectrum v. A discreet ⇒ A gekwantiseerd (geen tussenliggende waarden mogelijk)

bv energie, baanimpulsmoment van gebonden toestanden

continu spectrum → fysische grootheid niet gekwantiseerd

bv verstrooiingstoestanden

Ψ = toestand
φ_n = eigvector/eigfunctie

IV De waarschijnlijkheid om als resultaat van één meting eigenwaarde a_n te bekomen wordt gegeven door $P(a_n)$, waarbij $P(a_n) = |\langle\varphi_n|\Psi\rangle|^2$

of indien de eigw a_n g_n-voudig ontaard is: $P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n}|\langle\varphi_n^i|\Psi\rangle|^2 = \langle\Psi|P_n|\Psi\rangle$

veronderstelling: systeem vóór de meting in genorm. toestand $|\Psi\rangle$

en $A|\varphi_n^i\rangle = a_n|\varphi_n^i\rangle$ voor $i = 1,\dots,g_n$

↳ waarsch. om om het even welke eigw te vinden: $\sum_{n=1}^{\infty} P(a_n) = 1$

V De reductie v.h. golfpakket

Stel dat het systeem zich in toest. $|\psi\rangle$ bevindt en je een meting van A uitvoert. Indien het resultaat eigw a_m van A is, is de toestand onmiddellijk na de meting gegeven door de genormeerde projectie van $|\psi\rangle$ op de eigenruimte behorende bij a_m

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle' = \frac{P_m|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_m|\psi\rangle}}$$

met $P_m = P_m^2$ (idempotent, en hermitisch: $P = P^+$) de projectieoperator op de eigenruimte $\mathcal{E}_m$

$P_m = \sum_{i=1}^{g_m} |\varphi_m^i\rangle\langle\varphi_m^i|$

eigw P: 0 of 1

↳ De meting beïnvloedt de toestand
→ is geprojecteerd op deel $\mathcal{H}$ waar de toest. in zit
→ krijgen enkel een deel van onze toest. terug (die we dan normaliseren)

$$|\psi\rangle' = \frac{\sum_{i=1}^{g_m} \langle\varphi_m^i|\psi\rangle|\varphi_m^i\rangle}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_m} |\langle\varphi_m^i|\psi\rangle|^2}}$$

gevolg reductie: indien je onmiddellijk na de eerste meting opnieuw een meting v. dezelfde grootheid uitvoert, is het resultaat (met waarschijnlijkheid 1) opnieuw a_m
→ kan meting uitvoeren ook zien als het prepareren v.h. syst. i/e bep. toestand

VI De tijdsevolutie van een toestand wordt beschreven door de Schrödingervergelijking

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$$

met als Hamiltonian

$$H(t) = \frac{\vec{P}\cdot\vec{P}}{2m} + V(\vec{R},t)$$

spin niet in rekening gebracht (vereenvoudiging)

$H(t)$ komt van V, geen t in $\vec{P}$

met $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$ de operator geass. aan de impuls en $\vec{R} = (X, Y, Z)$ voor de positieoperator

VII Kwantisatieregels

transformatie v/e grootheid (vb $\vec{r}\cdot\vec{p}$) naar een kwantumoperator = kwantisatie of hier symmetriseren: $\vec{r}\cdot\vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{R}\cdot\vec{P} + \vec{P}\cdot\vec{R})$

L de eenvoudige operatoren $X, P_x, \ldots$ zijn observabelen

$\langle\vec{r}|X|\psi\rangle \equiv x\langle\vec{r}|\psi\rangle = x\,\psi(\vec{r})$ → $X|\vec{r}\rangle = x|\vec{r}\rangle$

$\langle\vec{p}|P_x|\psi\rangle \equiv p_x\langle\vec{p}|\psi\rangle = p_x\,\bar{\psi}(\vec{p})$ → $P_x|\vec{p}\rangle = p_x|\vec{p}\rangle$

L X en P_x commuteren niet

$[X, P_x] \equiv XP_x - P_xX = i\hbar\,\mathbb{1}$

nl $\langle\vec{r}|[X,P_x]|\psi\rangle = x\langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle - \langle\vec{r}|P_xX|\psi\rangle = i\hbar\langle\vec{r}|\psi\rangle$

met $\langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle\vec{r}|\psi\rangle$ ⟹ $\vec{P} \Leftrightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$

L $(XP_x)^+ = P_xX$

→ hermitische operator voor xp_x: $\frac{1}{2}(XP_x + P_xX)$
principe symmetrisatie algemeen geldig

\+ commutatierelaties:

$[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}\,\mathbb{1}$ $\quad [R_i, R_j] = [P_i, P_j] = 0$

↳ toepassen op kwantisatie energie

energie $= p^2/2m + V(\vec{r})$ ⟶ $H = P^2/2m + V(\vec{R})$

met $P^2 \Leftrightarrow -\hbar^2\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} = -\hbar^2\Delta$

$\Rightarrow \langle\vec{r}|H|\psi\rangle = (-\hbar^2/2m\,\Delta + V(\vec{r}))\langle\vec{r}|\psi\rangle$

VIII Verwachtingswaarden en het verband tussen commutatierelaties en onzekerheidsrelaties

verwachtingswaarde van A in toestand $|\psi\rangle$:

$$\langle A\rangle_\psi \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle \quad \in \mathbb{R}$$

$A_{gem} = \frac{1}{N}\sum_{n=1} a_n N(a_n)$

$\rightarrow \sum_n a_n P(a_n)$ ⟹ $\langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|A|\psi\rangle$

→ variantie $Var(A)_\psi = \langle(A - \langle A\rangle_\psi)^2\rangle_\psi$

en standaarddeviatie $(\Delta A)_\psi = \sqrt{Var(A)_\psi}$

KBC

vervolg Postulaten van de kwantummech

VIII "kwantumonzekerheden"

2 obs A, B en willek $\lambda \in \mathbb{R}$ definieert $|\varphi\rangle = (A + \lambda i B)|\psi\rangle$

dan is $0 \leq \langle\varphi|\varphi\rangle = \langle A^2\rangle_\psi + i\lambda\langle[A,B]\rangle_\psi + \lambda^2\langle B^2\rangle_\psi$

en omdat de vgl voor alle λ een vast teken zou hebben $\Rightarrow D < 0$

reeel want $\langle[A,B]\rangle_\psi$ zuiver imaginair ↳ $\langle AB\rangle_\psi = \langle BA\rangle^*_\psi$

$\langle A^2\rangle\langle B^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$

stel nu $A' = A - \langle A\rangle \mathbb{1}$ en $B' = B - \langle B\rangle \mathbb{1}$ opdat $[A', B'] = [A,B]$

invullen geeft: $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[A,B]\rangle|$

↳ toepassen op X en P_x: relatie van Heisenberg $\Delta X \Delta P_x \geq \hbar/2$

↳ ongelijkheid ⇒ gelijkheid als $\Delta X \Delta P_x$ minimaal

als de golffunctie Gaussisch is

↳ onzekerheidsrelatie tss A en B indien $[A,B] \neq 0$ → niet compatibele operatoren (niet) gelijktijdig meetbaar

gelijktijdig meetbaar ⟺ ∃ basis van eigtoest gemeenschappelijk aan A en B

→ volledig stel commuterende operatoren (CSCO) vb $\{H, L^2, L_z\}$

↳ elke eigtoest. kan op unieke manier aangeduid w door n, l, m

IX Behoud van totale waarschijnlijkheid

gaan na of goed genormeerde toestand na tijdsevolutie ook zo blijft

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H|\psi(t)\rangle = 0$$

$$\left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)$$

↳ dit is steeds waar, zelfs bij tijdsafh. H

X Tijdsevolutie van de verwachtingswaarde

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle_\psi + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_\psi$$

tijdsevolutie wijst op niet-triv dynamica v/h systeem → $[A,H] \neq 0$ of

↳ om te kijken of de operator expliciet van de tijd afhangt, kijken we of de eigw v/d operator expliciet v/d tijd afhangen

XI Constanten van de beweging

Een observabele waarvan $\frac{d}{dt}\langle A\rangle_\psi = 0$ is een constante van de beweging

⇒ indien $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$ en $[A,H] = 0$

Kwantummechanica : Symmetrieën en behoudswetten

* Translaties

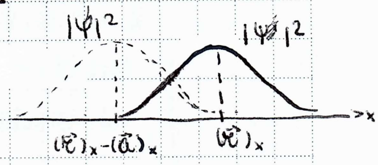
vector waarover we translateren : $\vec{a}$ — $T(\vec{a})$ op $\mathbb{R}^3$

translatie zelf $T(\vec{a})\vec{r} = \vec{r} + \vec{a} = \vec{r}\,'$ ✓

$\rightarrow |\psi'\rangle = U_T(\vec{a})\,|\psi\rangle$

dan is $\psi'(\vec{r}) \equiv \langle\vec{r}|\psi'\rangle = \psi(\vec{r}-\vec{a})$

dus $|\psi|$ is opgeschoven met $\vec{a}$



$\langle\vec{r}|U_T(\vec{a}) = \langle\vec{r}-\vec{a}|$ } beeldt orthogonale basis

$\Rightarrow U_T^\dagger(\vec{a})|\vec{r}\rangle = |\vec{r}-\vec{a}\rangle$ } $\{|\vec{r}\rangle\}$ op zichzelf af

$\Leftrightarrow U_T(\vec{a})$: triviale basisverandering in $\mathcal{H}$

$\Rightarrow U_T(\vec{a})$ unitair: $U_T^{+} = U_T^{+}$ $\rightarrow U_T^{-1}(\vec{a}) = U_T^{+}(\vec{a}) = U_T(-\vec{a})$

$\Rightarrow U_T(\vec{a})|\vec{r}\rangle = |\vec{r}+\vec{a}\rangle$

stel kleine translatie ($\|\vec{a}\|$ klein, met $\|\vec{a}\|^2 = \vec{a}\cdot\vec{a}$)

$\rightarrow$ Taylor: $\langle\vec{r}|U_T(\vec{a})|\psi\rangle = \psi(\vec{r}) - \vec{a}\,\vec{\nabla}\psi + O(a^2)$

$\Rightarrow$ in $\vec{r}$-representatie: $U_T(\vec{a}) \Leftrightarrow \mathbb{1} - \vec{a}\cdot\vec{\nabla}$

Algemeen: $U_T(\vec{a}) \simeq 1 - i\vec{a}\cdot\vec{P}/\hbar$ — de unitaire operator die
$\simeq e^{-i\vec{a}\cdot\vec{P}/\hbar}$ — translaties verzorgt in $\mathcal{H}$

$\Rightarrow \vec{P}$ is de infinitesimale generator van translaties

Invariantie van de Hamiltoniaan onder translaties ($H = H'$)

$\Leftrightarrow U_T^{+}(\vec{a})\,H\,U_T(\vec{a}) = H$

$\Leftrightarrow \vec{P}$ is een behouden grootheid $\frac{d\langle\vec{P}\rangle_\psi}{dt} = 0$ ~ behoud v. impuls

$\Leftrightarrow [\vec{P}, H] = 0$ en $\vec{P}$ is tijdsonafhankelijk

$U_T^{+} A' U_T = A \quad \rightarrow \langle\psi'|A'|\psi'\rangle = \langle\psi|U_T^{+}A'U_T|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \rightarrow A' = A$

* Tijdstranslaties

$\tau(\Delta t)\,t = t + \Delta t$

$\rightarrow |\psi'\rangle = U_\tau(\Delta t)\,|\psi(t)\rangle = |\psi(t-\Delta t)\rangle$

dan $\psi'(\vec{r},t) \equiv \langle\vec{r}|\psi'(t)\rangle = \psi(t-\Delta t)$

$= \psi(t) - \Delta t\,\partial\psi(t)/\partial t + \frac{1}{2}(\Delta t)^2\,\partial^2\psi/\partial t^2 + \dots$

en $i\hbar\,\partial\psi/\partial t = \langle\vec{r}|H|\psi\rangle$ ↵

en als $\boxed{\partial H/\partial t = 0}$ VW dan $(i\hbar)^2\,\partial^2\psi/\partial t^2 = \langle\vec{r}|H^2|\psi\rangle$

zodat $U_\tau(\Delta t) = e^{iH\Delta t/\hbar}$ (inverse van $U(t+\Delta t, t) = e^{-iH\Delta t/\hbar}$)

Tijdsinvariantie van de Hamiltoniaan (H hangt niet expl. van tijd af)

$\Leftrightarrow$ behoud v. energie

!Indien $H(t)$ dan $U_\tau^{-1} H U_\tau \neq H$ en $U_\tau \neq e^{iH\Delta t/\hbar}$

• Impulsmoment

klassiek $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ met $\vec{r}\times\vec{p} = -\vec{p}\times\vec{r}$

kwantum $\vec{L} = \vec{R}\times\vec{P}$ met $\vec{L}$ hermitisch en $\vec{R}\times\vec{P} = -\vec{P}\times\vec{R}$

en $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ (cyclisch)

$\Rightarrow \vec{L}\times\vec{L} = i\hbar\vec{L}$

de grootte v/h impulsmoment zal gelijktijdig gemeten kunnen worden met één van zijn componenten — we volgen de arbitraire L_z keuze

$L_x = \dots \quad L_y = \dots \quad L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad L^2 = \vec{L}\cdot\vec{L}$

met $[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0$

$\hookrightarrow$ CSCO voor $\mathcal{H}_1 = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3_1)$ is $\{L^2, L_z\}$
eenheidsbol

voor N deeltjes: $\vec{L} = \Sigma_i\vec{L}_i = \Sigma_i\vec{R}_i\times\vec{P}_i$

en tevens $\vec{L}\times\vec{L} = i\hbar\vec{L}$ en $[L^2, \vec{L}] = 0$

$U_T(\vec{a}) = e^{-i\vec{a}\cdot\vec{P}/\hbar}$
$U_\tau(\Delta t) = e^{iH\Delta t/\hbar}$
$U_R(\alpha) = e^{-i\alpha\vec{n}\cdot\vec{L}/\hbar}$

vervolg Symmetrieën en behoudswetten

+ Rotatiesymmetrie

$U_R \rightarrow |\psi'\rangle = U_R|\psi\rangle$

dan $\psi'(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi'\rangle = \psi(R^{-1}\vec{r})$

met $U_R|\vec{r}\rangle = |R\vec{r}\rangle$, $U_R^{-1}|\vec{r}\rangle = U_R^{\dagger}|\vec{r}\rangle = |R^{-1}\vec{r}\rangle$, $\langle\vec{r}|U_R = \langle R^{-1}\vec{r}|$ ...

Voor observabelen die invariant is onder rotatiesymmetrie is het syst. isotroop

algemeen $\langle\psi'|A'|\psi'\rangle \equiv \langle\psi|A|\psi\rangle$ - onder rotatie-invar $\Leftrightarrow A' = A$

$\Leftrightarrow U_R^{-1}A'U_R = A$

$\Rightarrow$ isotropie van $H \Leftrightarrow [H, U_R] = 0$

↳ $U_R(\alpha) = e^{-i\alpha\vec{n}\cdot\vec{L}/\hbar}$ $\rightarrow$ isotropie betekent $[H, \vec{L}] = 0$ en dus $\frac{d}{dt}\langle\vec{L}\rangle_\psi = 0$

rotatie invariantie $\Rightarrow$ impulsmom. behouden

Kwantummechanica : Waarschijnlijkheidsstroomdichth. & behoud v. waarschijnlijkheid

$P(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$, $\int P\, d\vec{r} = 1 \quad \forall t$

en $d/dt \int d\vec{r}\, \langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle = d/dt\, \langle\psi|\psi\rangle = 0$

we definiëren nu de waarschijnlijkheidsstroomdichtheid $\equiv \vec{j}$

stel $\rho(\vec{r},t) \equiv P(\vec{r},t)$

dan is $\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle = \frac{-1}{i\hbar}(\langle\psi|H|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle - \langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|H|\psi\rangle)$ ↲ $H = H^\dagger = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r},t)$

$= -\frac{1}{i\hbar}(\langle\psi|P^2/2m|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle - \langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|P^2/2m|\psi\rangle)$

$= \frac{\hbar}{2im}[(\Delta\psi^*)\psi - \psi^*\Delta\psi]$ ↲ $P^2 \Leftrightarrow -\hbar^2\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}$ en $\vec{\nabla}^2 = \Delta$ en $\langle\psi| = |\psi\rangle^*$

$= \hbar/2im\,[\vec{\nabla}\cdot(\psi\vec{\nabla}\psi^*) - \vec{\nabla}\cdot(\psi^*\vec{\nabla}\psi)]$ ↲ complexe van 1e term nemen

$= -\vec{\nabla}\cdot\vec{j}$ $(-\mathrm{div}\,\vec{j})$, $\vec{j} = \mathrm{Re}\{\psi^*\frac{\hbar\vec{\nabla}}{im}\psi\}$

continuïteitsvgl. $\rightarrow$ behoud v. waarschijnlijkheid geldt i/e medium zonder bronnen of putten

stel toestand met reële golffunctie $\psi(\vec{r},t) \in \mathbb{R}$ (gebonden toest + genormeerd, E<0)

$\Rightarrow \vec{j} = 0$

stel verstrooiingstoestanden $(E>0, V\rightarrow\infty)$ ~ platte golven die zich in de ruimte voortbewegen ~ e-machten + complexen $\Rightarrow \vec{j} \neq 0$

Noot: $\vec{j} = \mathrm{Re}\{\psi^*\frac{\hbar\vec{\nabla}}{im}\psi\} = \mathrm{Re}\{\langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\frac{\vec{P}}{m}|\psi\rangle\}$ ≈ dichth x snelh. → stroomdichth.

Energie kwantisatie $\rightarrow$ tijdsonafh. S.E.: $-\hbar^2/2m\; d^2\psi(x)/dx^2 + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$

↳ lin. hom. 2e orde diffvgl $\Rightarrow$ 2 lin. onafh. opl voor elke waarde van E

paradoxaal (kwantisatie?)? Neen! (RVW)

we zoeken opl. die eindig zijn en continu en continu in de 1e afgeleide op gans $]-\infty, +\infty[$

TODO: lezen p105-114

Het vrij deeltje

- vrij deeltje: $V=0$ $\Rightarrow E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ met $p=\hbar k$
  dan opl v/d tijdsonafh SE (∞ ox): e^{ikx}, e^{-ikx}
  $\Rightarrow \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
  voor rechtslopende vlakke golf: $\psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)}$ — opl v/d tijdsafh SE.
  met $P(x,t) = |A|^2$ (niet genorm → golfpakket)
  en $j_R(x,t) = \mathrm{Re}\{\psi^* \frac{\hbar}{im}\frac{d}{dx}\psi\} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = \frac{p}{m}|A|^2$
  voor linkslopende vlakke golf: $\psi(x,t) = B e^{-i(kx+\omega t)}$
  en $j_L(x,t) = -p/m\ |B|^2$
  L en R lopende golven oké voor een monochrom. flux van deeltjes te beschrijven
  voor moeilijkere problemen gebruiken we een superpositie van de basisfuncties
  voor staande golven ($A=\pm B$): $j=0$ (interferentie)
  = superpositie R en L met eenzelfde amplitude
  ↳ lopen neigens naartoe (dit kan gedwongen ō de RVW)
  algemeen (superpos.): $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
  en $\psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$
  met $P(x,t) = |A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ikx} + A^*B e^{-2ikx}$
  en $j = p/m\ (|A|^2 - |B|^2)$
  ↳ toepassing @ H4 (Reflectiecoëff & transmissiecoeff pot.stap, tunneleffect, put pot.)

Kwantummechanica: Eigw en eigfuncties van L^2 en L_z

- $L_z|\psi_m(\vec r)\rangle = m\hbar\ \psi_m(\vec r)$ $\rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi_m = m\hbar\ \psi_m$
  sferische coörd
  → opl v/h type. $\psi_m(\vec r) = \Phi(r,\theta)\, e^{im\varphi}$
  ↳ éénwaardig voor $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$ (period.) $\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$
  $L^2 = \vec L\cdot\vec L = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ → moeten reële, niet-neg eigw hebben ($\vec L^* = \vec L \Rightarrow \langle\psi|L_x^2|\psi^*\rangle = \|L_x|\psi\rangle\|^2 \geq 0$)
  $L^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2\ Y_{lm}(\theta,\varphi)$
  aangezien $\{L^2, L_z\}$ CSCO zijn Y_{lm} ∈ gemeensch basis $\{L^2, L_z\}$
  ↳ sferische harmonische: opl v/d Laplace vgl wanneer die in sf.coörd uitgeschreven & beperkt ō tot een bol met straal 1
  $\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y(\theta,\varphi)\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y(\theta,\varphi) = -l(l+1)\,Y(\theta,\varphi)$
  aangezien $\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \sin\theta\, |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 = 1$
  $\Rightarrow l = 0, 1, 2, \ldots \in \mathbb{N}$
  $m = -l, -l+1, \ldots, 0, 1, \ldots, l$ ($2l+1$ waarden)
  $L^2 = -\hbar^2 [\,1/\sin\theta\ \partial/\partial\theta(\sin\theta\ \partial/\partial\theta) + 1/\sin^2\theta\ \partial^2/\partial\varphi^2\,]$
  $\Rightarrow Y_{lm}(\theta,\varphi) = N(l,m)\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$
  legendre polyn. i.f.v. poolhoek
  fasefunctie door L_z
  ↳ eenvoudigheidshalve → normering
  ↳ $|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 = (2\pi)^{-1}\,|\Theta_{lm}(\theta)|^2$

- algemene methode om m en l te bepalen
  aanname $\vec J \times \vec J = i\hbar\vec J$ → commutatieregels gelden
  we weten CSCO $\{J^2, J_z\}$ → kn alle eigw vinden van J^2, J_z met m, l ∈ eigw
  en $J^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\ |j,m\rangle$ $\quad j \in \mathbb{R}^+$,
  $J_z|j,m\rangle = m\hbar\ |j,m\rangle$ $\quad m \in \mathbb{R}$
  we maken nu gebruik v/d ladderoperatoren om (de toestand bij) m en l te vinden
  J_+ en J_- met $J_+ = J_-^+$ → $J_\pm$ zijn geen observabelen
  $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ ⟶ $[J^2, J_\pm] = 0$ & $[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$
  ↳ commuterende werking
  $J_\pm$ zal eigw J^2 niet verstoren, maar toest wel veranderen
  ↳ $J_\pm$ zal toest. verand. en voor een hogere/lagere eigw voor J_z zorgen

$J_\pm J_\mp = J^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z$
$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$
$= 2i[J_x, J_y]$ $\Rightarrow J_\pm|j,m\rangle \propto |j,m\pm1\rangle$
↳ j zal nog steeds tot dezelfde eigenruimte behoren

of $J_\pm|j,m\rangle = 0$ wnn je max/min m hebt bereikt

KBC

Kwantummechanica: Eigw en eigfuncties van L^2 en L_z

aangeeven $\| J_\pm |j,m\rangle \|^2 \geq 0 \Rightarrow -j \leq m \leq j$
$= \langle j,m| J_\pm^\dagger J_\pm |j,m\rangle = [j(j+1) - m(m\pm1)]\hbar^2 \geq 0$

door op toestand $|j,m\rangle$ J_+ herhaaldelijk toe te passen: $m \to m+1 \to m+2 \dots$
stopt wanneer $m \leq j$ → moeten op een bep. moment nultoestand bekomen

$\begin{cases} J_+|j,m_{max}\rangle = 0 \Rightarrow \exists N: m+N = j \\ j(j+1) = m_{max}(m_{max}+1) \to m_{max} = j \end{cases}$ $\begin{cases} J_-|j,m_{min}\rangle = 0 \Rightarrow \exists N': m-N' = -j \\ j(j+1) = m_{min}(m_{min}-1) \to m_{min} = -j \end{cases}$

↳ $2j \in \mathbb{N}$ en $2m \in \mathbb{Z}$ → j en m mogen ook halftallig zijn
⇒ ontaarding van $j(j+1)\hbar^2$ is $(2j+1)$-voudig

we weten nu $J_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle$! Hebben J_z willek gekozen omwille
wat kun we zeggen over een meting van J_x en J_y van praktische redenen
→ eigw $m\hbar$, $-j \leq m \leq j$
verwachtingswaarden $\langle J_x\rangle_{j,m} = \langle j,m| J_x |j,m\rangle = 0$ $\left(J_x = \frac{J_+ + J_-}{2} \right)$
$= \langle J_y\rangle_{j,m}$

variantie $(\Delta J_z)_{j,m} = 0$
voor ΔJ_x en ΔJ_y: $\langle j,m| J_x^2 + J_y^2 |j,m\rangle = \langle j,m| J^2 - J_z^2 |j,m\rangle$ $= \hbar^2(j(j+1) - m^2)$
$= 2(\Delta J_x)^2_{j,m}$ → onzekerheids relatie
hangt expl af vd toest waarin we metingen doen $= 2(\Delta J_x)_{j,m}(\Delta J_z)_{j,m} \geq \hbar |\langle J_z\rangle_{j,m}|$
+ kan ook 0 zijn – toch is het een onzekerheidsrelatie, die nd begrensd is door niet triviale cts $= \hbar^2|m|$
[tenzij $J=0$ kan ΔJ_x en ΔJ_y niet 0 zijn]

Spin 1/2 (e^-, p^+, n^0, ν, quark) neutrino

$j = \frac{1}{2}$, $m = \pm\frac{1}{2}$
↳ "s" ↳ "m_s" spinkwantumgetal & magnetisch spinkwantumgetal
→ $\mathcal{H}$: 2 dim met basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ en CSCO $\{S^2, S_z\}$
→ $|\Sigma\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ met $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ (toest.)

$S_z = \hbar/2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ $S_x = \hbar/2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $S_y = \hbar/2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ S_x, S_y uit commutatieregels bepalen
$S^2 = 3\hbar^2/4 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ → evenredig met $\mathbb{1}$ ⇒ elke basis goed → kijken naar basis voor S_z
$S_u = \vec{S}\cdot\hat{e}_u = \hbar/2 \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$ → $\hat{e}_u = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$
$\vec{S}\times\vec{S} = i\hbar\vec{S}$
$\vec{S} = \hbar/2\,\vec{\sigma}$ (paulimatrices) $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
↳ $\exists \hat{e}_u$: $|\Sigma\rangle = |+\rangle_u e^{i\chi} = (\alpha'|+\rangle + \beta'|-\rangle)e^{i\chi}$ elke vect uit type $|\Sigma\rangle$ valt te schrijven als $|+\rangle_u e^{i\chi}$ waarin $|+\rangle_u$ de richting en $e^{i\chi}$ de fase voorstelt
want $\exists \theta,\varphi$: $\cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} = \alpha'$ en $\sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} = \beta'$

p303 - 311

Kwantummechanica: Additie van impulsmomenten

→ werken in 2 Hilbertruimtes → Draaimoment 2 vectoren

- $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$! $[\vec{J}_1, \vec{J}_2] = 0$ (versch $\mathcal{H}$) vb 2 deeltjes $\vec{L}_1$ en $\vec{L}_2$: $\vec{J} = \vec{L}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{L}_2$, $\mathcal{E}_H = L^2(\mathbb{R}^3_1) \otimes L^2(\mathbb{R}^3_2)$
  1 deeltje $\vec{L}_1$ en $\vec{S}_1$: $\vec{J} = \vec{L}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S}_1$, $\mathcal{E}_H = L^2(\mathbb{R}^3_1) \otimes \mathcal{E}_{spin}$ (dim 2s+1)
  $\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$ → $[J^2, J_z] = 0$
  CSCO: $\{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$ → met als unieke eigenbasis
  $\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\}$ elk el vd 1e basis ⊗ elk el vd 2e basis
  ↳ ontkoppeld of gefactoriseerd
- in plaats een gekoppelde basis: nl de unieke eigenbasis van CSCO $\{\vec{J}_1, \vec{J}_2, J^2, J_z\}$
  → $|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C^{j,m}_{j_1, m_1; j_2, m_2} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$
  nieuwe basisvect $= |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ ipv de oude
  ↳ Clebsch-Gordan coëff drukken de gekoppelde basis uit in de ontkoppelde basis

'Afleiding' Beschouw deelruimte van $\mathcal{E}_H$ met vaste J_1^2 en J_2^2: $j_1(j_1+1)\hbar^2$ en $j_2(j_2+1)\hbar^2$
↳ alle eigvect van J_1^2 en J_2^2 met vaste eigw
Bepaal dan de eigw $j(j+1)\hbar^2$ en $m\hbar$
in de eigvect $|j_1, j_2; j, m\rangle$ van J^2 en J_z
vast gekozen → $-j \leq m \leq j$ kan versch waarden aannemen
↳ lin comb van maken zodat je de toest vd ontkoppelde basis kan verkrijgen

'Aantonen'
we weten dat $-j \leq m \leq j$: $m = -j, -j+1 \dots$
we willen bewijzen dat $j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2$ ($2 j_{min} + 1$ waarden)

1 corresp. basiselement → 1D deelruimte

1. kijk nr deelruimte met $j = j_1 + j_2$ (→ hoogst mogelijke j waarde)
die bevat de eigvect met hoogst mogelijke eigw van J_z: $(j_1 + j_2)\hbar$
⇒ $|j_1, j_2; \underbrace{j_1 + j_2}_{=j}, \underbrace{j_1 + j_2}_{=m = m_1 + m_2}\rangle = |j_1, m_1 = j_1\rangle \otimes |j_2, m_2 = j_2\rangle$ enige mogelijkheid om dit te schrijven
pas nu lowering operator J_- herhaaldelijk toe
→ we blijven in deelruimte $j = j_1 + j_2$ $[J^2, J_-] = 0$
maar verlagen m met 1 ⇒ $|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$ → zie definitie genormeerd, relatieve normeringsfactor
$\propto \sqrt{j_1} |j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle + \sqrt{j_2} |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle$
↳ kern Clebsch-Gordan coëff

2 corresp. basiselementen → 2D (maar nog maar 1 vect gevonden?)

→ uiteindelijk: $|j_1, j_2; j_1 + j_2, -j_1 - j_2\rangle = |j_1, -j_1\rangle \otimes |j_2, -j_2\rangle$

unieke 1D deelruimte
↳ in elke deelruimte met bepaalde m steeds 1 vector gevonden
→ rest nog te bep.

2. we kunnen nu de overige deelruimtes $j < j_1 + j_2$ vinden
beschouw de vector loodrecht op $|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$ binnen de deelruimte met $m = j_1 + j_2 - 1$ 2e basisvect construeren ⊥ opvorige
→ eigvect van J^2 met $j = j_1 + j_2 - 1$:
$|j_1, j_2; j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle \propto \sqrt{j_2} |j_1, j_1 - 1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle - \sqrt{j_1} |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2 - 1\rangle$
nu opnieuw J_- toepassen... → Clebsch-Gordan
Constructie stopt wnn de max dimensie vd deelruimtes met vaste m bereikt is
↳ deze max dim is $\min\{j_1, j_2\} \times 2 + 1$ ⇒ $j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_2 - j_1|$

(zie langs boven gefluoriseerde kadertjes)

KBC

Kwantummechanica: Schrödingervergelijking in d=3

handige basis

· vrij deeltje : $V(\vec{r},t)=0 \rightarrow H = P^2/2m$ $\rightarrow \{|\vec{p}\rangle\}$ = eigbasis $\vec{P}$ en dus ook H

↳ S.E. $i\hbar|\dot\psi\rangle = H|\psi\rangle$ $\vec{P}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$ en $H|\vec{p}\rangle = \frac{p^2}{2m}|\vec{p}\rangle$

→ opl: $|\vec{p}\rangle e^{-i\omega t}$ $\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$ (vlakke golf)

mits $\hbar\omega = \frac{p^2}{2m}$ of $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

= ~~dispersierelatie~~ voor een vrije vlakke golf

vrij deeltje = superpositie deze toestanden → integreren over meerdere golflengtes ⇒ golfpakket

$\langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d\vec{p}\; e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar - \omega t)}\,\bar\psi(\vec{p})$

of compact met $\hbar\omega = P^2/2m \rightarrow \omega = \omega(\vec{p})$ of ~~$\omega = \omega(\vec{k})$~~

$|\psi\rangle_{free} = \int d\vec{p}\,|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi_{free}\rangle = \int d\vec{p}\;\bar\psi_{free}(\vec{p})\,|\vec{p}\rangle$ met $\bar\psi_{free}(\vec{p}) = e^{-i\omega t}\bar\psi(\vec{p}) = \bar\psi_{free}(\vec{p},t)$

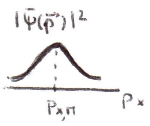
energie v/e vrij deeltje (verwachtingswaarde v. H i/d toest v/h vrije deeltje)

norm: energie basisvect $P^2/2m$ → 1p

hier: beschouwen als een pakket met bep breedte → integreren over versch golflengtes

$\boxed{{}_f\langle\psi|H|\psi\rangle_f} = \int d\vec{p}\int d\vec{p}\,'\;{}_f\langle\psi|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|H|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'|\psi\rangle_f$

$= \int d\vec{p}\int d\vec{p}\,'\;\bar\psi(\vec{p})^*\,\frac{p'^2}{2m}\,\langle\vec{p}|\vec{p}\,'\rangle\,\bar\psi(\vec{p}\,')$



cte in t → $[H,H]=0$ $= \boxed{\int d\vec{p}\;|\bar\psi(\vec{p})|^2\cdot\frac{p^2}{2m}}$ $\delta(\vec{p}-\vec{p}\,')$ → gewogen gem. samengest. toestand

impuls v/e vrij deeltje

$\boxed{{}_f\langle\psi|\vec{P}|\psi\rangle_f} = \boxed{\int d\vec{p}\;|\bar\psi(\vec{p})|^2\,\vec{p}}$ constant in t → $[H,\vec{P}]=0$

positie v/e vrij deeltje

$\boxed{{}_f\langle\psi|\vec{R}|\psi\rangle_f} = \boxed{\int d\vec{r}\;|\psi(\vec{r},t)|^2\cdot\vec{r}}$ tijdsafhankelijk → $[H,\vec{R}]\neq 0$

Merk op dat de eigtoest van $\vec{P}$ niet normeerbaar zijn: $\langle\vec{p}|\vec{p}\rangle = \infty$ vlakke golf niet normeerbaar

Alternatief: Normering forceren ahv eindige doos (eindig vol → eindige integr.)

met periodieke randvoorwaarden (→ eindig maar onbegrensd systeem)

Gevolg: kwantisatie energie en impuls

$\boxed{L_x = n_x\frac{2\pi}{k_x}}$ etc → $\boxed{E = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{2\pi n_x}{L_x}\right)^2 + \dots + \left(\frac{2\pi n_z}{L_z}\right)^2\right]}$ $n_x = 0,1,2,\dots$

golflengte (past eindig # keer i/d doos) en $p_x = \hbar k_x = \boxed{\hbar\, 2\pi\frac{n_x}{L_x}}$ etc

eenvoudige toepassingen

· harmonische oscillator in carth. coörd

· deeltje i/e doos met harde wanden → potentiaalput

$\lambda/2$ moet $n\in\mathbb{Z}$ keer i/d lengte v/d doos passen

+ golflengte @ randen = 0

+ golffunctie mag niet 0 zijn

↳ je hebt altijd nulpuntsenergie : n_x, n_y, n_z moeten minstens 1 zijn

...

Kwantummechanica: Beweging i/e centrale potentiaal

- centrale potentiaal: $V(\vec{x},t) = V(x)$

situatie die vaak geldt: 2 deeltjes die invloed op elkaar hebben & bewegen rond een gegenereerd MC → relatieve beweging beschrijven

⇒ er zal een centrale potentiaal zijn die enkel afhangt v/h MC en niet v/d oriëntatie v/d verbindingsvector $\mu \approx m_e$

- tijdsonafh S.E. $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \cdot + \frac{L^2}{2m_e r^2} + V(r) \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$

↳ echte centrale potentiaal $V(r)$ → elk impulsmoment zal commuteren met H

⇒ $[H_{rel}, \vec{L}] = 0$ ⇒ CSCO $\{H, L^2, L_z\}$ → gewone harmonische eigenfuncties van L^2

↳ scheiding v. var: $\Psi(\vec{r}) = R(r)\, Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \Psi_{l,m}(r,\theta,\varphi)$ invullen

$$\Rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2} r \cdot + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right\} R(r) = E\, R(r)$$

normalisatie: $\int d^3r\, |\Psi_{l,m}|^2 = 1 \iff \int_0^\infty dr\, r^2 |R_l(r)|^2 = 1$

1D probleem van maken:

$u_l(r) = r R_l(r)$ → $\int_0^\infty |u|^2 dr = 1$ en $\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \cdot \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial r^2}$

met $u_l(0) = 0$

$$\Rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)}_{} \right\} u_l(r) = E\, u_l(r)$$

$V_{eff}(r)$ = effectieve pot. = pos. repulsieve potentiaal

↳ centrifugale barrière (ook aanwezig als er geen kracht is)

gevolg v/d coördtransfo

schijnkrachten / pseudo krachten (geen wnr $l=0$)

2 vrij deeltje dat deze pot beschrijft

↳ 1 D potentiaalput probleem → altijd gebonden toestanden

(als V = Lr put → eindig #, als $V = \frac{1}{r}$ (coulomb) → ∞ #)

- Radieel kwantumgetal n' (≥0)

∀ l ⇒ 1D probleem ⇒ gebonden toestanden (zie hierboven voor #)

$E_{l,0}$, $E_{l,1}$, $E_{l,2}$, ..., $E_{l,n'}$ ....

n' = # knopen (nulpunten) tussen 0 en ∞

~ $E \to E_{n',l}$: (2l+1)-voudig ontaard (wegens rotatie invariantie)

- Hoofdkwantumgetal n (≥1)

Nevenkwantumgetal l ; $l = 0, 1, \ldots n-1$

Magnetisch kwantumgetal m ; $-l \le m \le l$

→ coulombpotentiaal $V(r) = -q^2/4\pi\varepsilon_0 r$ ⇒ $E = E_n$ met $n = n' + l + 1$

algemeen $V(r)$ ⇒ $E = E_{n,l}$ (centrale potentiaal) goede beschrijving voor alkalimetalen (1 val e^-)

- selectieregel $n, l \to n_0, l_0$: $l = l_0 \pm 1$

absorptie ↳ emissie v/e foton met $\omega = (E_{n,l} - E_{n_0,l_0})/\hbar$

- spectroscopische notatie

s	sharp	l=0
p	principal	l=1
d	diffuse	2
f	fundamental	3
g		4
h		5

KBC

Kwantummechanica: Waterstofatoom

relevante schalen

→ zuivere Coulombpotentiaal : $V(r) = \frac{-q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \equiv -e^2/r$ $[e^2] = J \cdot m$

* karakteristieke ~~methode~~:
  $e^2/\hbar$ $[\hbar] = J/s$
  ↳ $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ = fundamenteel $\approx 1/137$ "niet relativistisch"
* karakteristieke afstand/straal:
  $\hbar^2/me^2$ ($\Leftarrow mvr = \hbar$) $\longrightarrow \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar}{mc}$ compton golflengte (zeer kort)
  ↳ $a_0 = \hbar^2/me^2$ = Bohrstraal
  $\approx 0{,}53$ Å
* energie:
  e^2/a_0
  ↳ $E_I = \frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^2} \approx 13{,}6\,eV$ → Rydberg
  $= \frac{1}{2}\alpha^2 mc^2$ rustenergie
  ↳ bindingsenergie v/e e^- in/e waterstofatoom
* karakteristieke periode:
  $\hbar/E_I \approx 10^{-16}\,s$ (normale duur voor mechanica v/e e^- rond een p^+)

→ dimensieloze radiële diffvgl (→ tijdsonafh S.E. + gedeeld door referentie)
$$\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\rho - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho_{V(r)}} - \varepsilon_{\varepsilon}\right) R_l(\rho) = 0 \qquad \rho = \frac{r}{a_1} \text{ en } \varepsilon = -E/E_I > 0$$

→ ∀ l zijn er aftelbaar ∞ gebonden toestanden waarvoor de energieën accumuleren tot 0
$R(\rho) = e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho}\rho^l Q_{n',l}(\rho) = R_{n',l}(\rho)$ $Q_{n'l}(\rho)$ is de Laguerre polynoom v. graad n'
→ Normeringsvw $\int dr\, r^2 |R|^2 < \infty$ ⟺ kwantisatie → opl v. $xy'' + (1-x)y' + ny = 0$
$\varepsilon = \frac{1}{(n'+l+1)^2} = \frac{1}{n^2}$ $n' = 0, \dots, \infty$, $l = 0, 1, \dots, n-1$ → $L_{n'}(x) = \frac{e^x}{n'!}\frac{d^{n'}}{dx^{n'}}(x^{n'}e^{-x})$
dus $n = 1, 2, \dots, \infty$
ga asymptotisch gedrag oplossingen na ($\rho \approx 0$, $\rho \to \infty$ – HB)
Conclusie: eigenfuncties $|n, l, m\rangle$
eigenwaarden $E_n = -E_I/n^2$ (ontaarding n^2)
$\Rightarrow \psi_{n,l,m}(\vec r) = Y_{l,m}(\theta,\varphi)\, e^{-r/(na_1)} \left(\frac{r}{a_1}\right)^l \left(C_0 + \dots + C_{n-l-1}\left(\frac{r}{a_1}\right)^{n'}\right)$
met a_1 de atomaire straal v. H in grondtoestand (ref)
↳ Hoe hoger op de energieladder → spreiden uit volgens de exponentiële + gem afstand lineair groter met aangeslagen niv.

→ spectrum van waterstof
$h\nu_{mn} = E_m - E_n \propto \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}$ (experimenteel)
selectieregel overgangen: $\Delta l = \pm 1$
discreet spectrum: Balmer : $ns \to 2p$ $(n>2)$
Lyman : $np \to 1s$ $(n>1)$
wiskundig: verschillen in eigfu → niet alle overgangen tss E-niv mogelijk
– Hamiltoniaan afhankelijk

(Waterstofatoom)

→ Stationaire toestanden

- grondtoestand 1s ($l=0, m=0$)
  $\psi_{100}(\vec{r}) = e^{-r/a_1} / \sqrt{\pi a_1^3}$ — $|\psi|^2 = \text{w.d}^{(3D)}$ ($\neq 0$ in $r=0$)
  $\overset{(1D)}{\Rightarrow}$ radiële w.d : $P(r) = |\psi|^2 4\pi r^2$ — met max $r = a_1$ (en $P(0)=0$)
- aangeslagen toestanden
  $P_{n,l}(r) = r^2 |R_{n,l}(r)|^2$

n' knopen, $n' = n - l - 1$
voor $n = l+1$: geen knopen t/m 0 en ∞
↳ $P_{n,n-1}(n^2 a_1) = \max$

Kwantummechanica waterstofachtige atomen

atoom met meerdere e^- (grotere Z) maar wel nog 1 e^- in de potentiaal
coulomb maar met andere voorfactor

$V(r) = \frac{-Ze^2}{r}$ — "intern" e^- v. atoom met $Z \gg 1$ — $-e$ verdiept e^- — of (Z-1) geïoniseerde atomen

↳ karakteristieken herschalen
$a_1 \to a_1^{(Z)} = a_1 / Z$ (veel dichter bij kern) sterkere aantrekking
$E_n \to E_n^{(Z)} = E_n \cdot Z^2$ (relativ. voor $Z \approx 100$) → $v \to Z\alpha c$

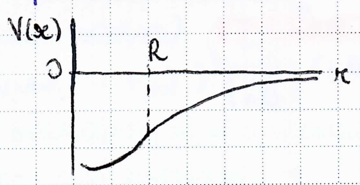
Muonische atomen

μ "zwaar e^-" $m_\mu = 200\, m_e$
onstabiel : $\tau \approx 10^{-6}$ s → verval $\mu \to e + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$
↳ relatief lang om nog dingen te kunnen doen
tov $\hbar^3 / m_\mu Z^2 e^4 \approx \frac{10^{-18}}{Z^2}$ s (typische tijdschaal)

kan zo dicht bij kern komen dat het de kernstructuur kan aftasten
"ingevangen" muon — kern
→ "intern" e^-
⇒ $a_\mu = a_1 \frac{m_e}{m_\mu} \frac{1}{Z} \approx 10^{-15}$ m ~ grootte kern → muon in kern
maar gecompliceerd spectrum door kernstructuur
→ andere potentiaal dan voor een lading buiten de kern

vanaf grens v/d kern verandert Coulombpot in iets ingewikkelders

kernstructuur → potentiaal
- sferische kernen : $r < R$: harmonische oscillator
  $r > R$: Coulomb



spectrum nu ook afh. van l:
$E_n \to E_{n,l}$

- vervormde kernen : $E_{n,l} \to E_{n,l,m}$

Alkali atomen (Na: Z = 2+8+1 etc)

1e e^- = afgeschermde e^- → conceptueel variabele Z
$V(r) = -\frac{e^2}{r} Z_{eff}(r)$ — interpolatie
$\sim -\frac{e^2}{r}$ $r \to \infty$ zuivere H
$-\frac{Ze^2}{r}$ $r \to 0$ Coulomb
↳ afh van hoezeer de kern afgeschermd is door e^- die dichter bij de kern zijn

- voor grote n, grote l : $E_{n,l} \to E_n(H)$ energie val. e^- ~ energie H atoom
- voor $l=0$ niveaus, $n = 1,2,3$ → groot verschil met H

KBC

Kwantummechanica: Vrij deeltje in bolcoördinaten

$V(r) = 0$, eigenbasis van CSCO $\{H = P^2/2m, L^2, L_z\}$

$\Psi_{E,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{El}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$

$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right) R_{El}(r) = 0$ met $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, $V_{eff}(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$

stel $u_{El}(r) = r R_{El}(r)$

$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] u_{El}(r) = 0$

→ k is willekeurig, af te leiden

oplossingen zoeken: cos of sin → werken met functies zodat $R_{El}(r)$ eindig is i.d. oorsprong

$l = 0 \Rightarrow R_{E0}(r) \propto \frac{\sin kr}{kr}$ $\boxed{\text{eis } u_{El}(0) = 0}$

$l \neq 0 \Rightarrow R_{El}(r) = R_l(kr)$ → sferische Bessel functies $j_l(kr)$ en

" Neumann functies $n_l(kr)$

hiervan zijn enkel de Bessel f. $j_l(kr)$ ok

! $\left\{\begin{array}{ll} j_l(kr) \sim \frac{1}{kr}\sin(kr - l\pi/2) & r \to \infty \\ n_l(kr) \sim -\frac{1}{kr}\cos(kr - l\pi/2) & r \to \infty \end{array}\right.$

$\Rightarrow \Psi_{E,l,m}(r,\theta,\varphi)_{free} = C\, j_l(kr)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$ "sferische golven"

→ zowel sferische als vlakke golven vormen een basis voor toestanden van vrije deeltjes

⇒ vlakke golf (eigfunctie van $\vec{P}$) te ontwikkelen in sferische golven $\{H, L^2, L_z\}$

$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_l^m(\hat{k})\, j_l(kr)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$

met $\vec{k}$ // z-as $\quad \hat{k} = \vec{e}_k \quad$ en $\hbar^2 k^2/2\mu = E \quad$ en $\vec{r} = (r,\theta,\varphi)$

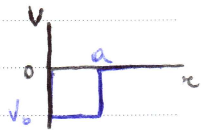
→ ontwikkelen vlakke golf:

$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta'} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l\, j_l(kr)\, P_l(\cos\theta')$ → Legendre polynoom

en $P_l(\cos\theta') = b_l \sum_{m=-l}^{l} Y_l^m(\hat{k})^*\, Y_l^m(\hat{r}) \qquad \hat{r} = \vec{e}_r$

$\Rightarrow C_l^m(\hat{k}) = a_l\, b_l\, Y_l^m(\hat{k})^*$

3D square well



$V(r) = \left\{\begin{array}{ll} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{array}\right.$ → eindig diepe potentiaal

voor $E \geq 0$: continuum aan ongebonden toest

$-V_0 < E < 0$: gebonden toestanden? (1D laatst altijd gebonden energietoest, hier?)

voor $r < a$: $R_{El}(r) = A\, j_l(Kr)$

$0 > \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = E \quad$ en $\quad E + V_0 = \frac{\hbar^2 K^2}{2\mu}$

→ $k = i\lambda \quad , \lambda \in \mathbb{R} \qquad K \in \mathbb{R}$

$r > a$: "free" solutions, in $\rho = i\lambda r = kr$ — Bessel & Neumann kn allebei want moeten niet meer i.d. oorspr. liggen → lin comb → sfer Hankel functie

$h_l^{(1)}(i\lambda r) \propto e^{-\lambda r}/r$ is afnemende niet div voor $r \to \infty$ — $\lambda > 0$ want dalende e-macht

$\Rightarrow R_{El}(r) = B\, h_l^{(1)}(i\lambda r) \qquad h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + i n_l(\rho)$

aansluitingsvw @ $r = a$ opdat kwantisatie energie

$A\, j_l(Ka) = B h_l^{(1)}(i\lambda a)$ en $A\, d/dr\, j_l(Kr)|_a = B\, d/dr\, h_l^{(1)}(i\lambda r)|_a$

$l = 0$ $\Rightarrow K \cot Ka = -\lambda$ of $Ka \cot Ka = -\lambda a$ en $(Ka)^2 + (\lambda a)^2 = (K_0 a)^2$; $\frac{\hbar^2 K_0^2}{2\mu} = V_0$

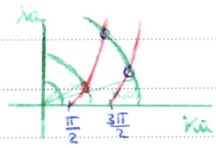
kijken of hij gebonden is

$0 < K_0 a < \pi/2$ geen gebonden toestanden

put moet een minimale diepte hebben opdat hij gebonden toest heeft

$\pi/2 < K_0 a < 3\pi/2$ één gebonden toestand

$3\pi/2 < K_0 a < 5\pi/2$ twee gebonden toestanden



$l > 0$ analoge resultaten moeilijker te vinden (centrifug pot. erbij) ⇒ centrale pot.

minder diep en smaller → vierkante put afgezwakt: $V_{eff} < V_{eff}$, minder diep

Kwantummechanica: storingsrekenen

stationair storingsrekenen: H verstoort op $t=0$ maar voor de rest niet meer, $dH/dt = 0$
ongestoorde Hamiltoniaan H_0 en storing H'

$\Rightarrow H = H_0 + H'$ met $H' = \lambda \hat{H}'$

en H_0 discreet spectrum:
$H_0 |\varphi_n^i\rangle = E_n^0 |\varphi_n^i\rangle$ met $i = 1, \ldots, g_n$ ontaarding en n = energieniv

effect v/d storing: 1) cont. verschuiving v/d niet-ontaarde energie, of
2) opheffing v/e ontaard niveau, of
3) verschuiving maar intact laten ontaarding

$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$ en $E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \cdots$
$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \cdots$

$\Rightarrow (H_0 + \lambda\hat{H}')\sum_{k\geq 0}\lambda^k|k\rangle = \sum_{k\geq 0}\lambda^k\varepsilon_k \sum_{\ell\geq 0}\lambda^\ell|\ell\rangle$

$\rightarrow$ 0e orde $H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle = E_n^0|\varphi_n^i\rangle$
1e orde $(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle = (\varepsilon_1 - \hat{H}')|0\rangle$
2e orde $(H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (\hat{H}' - \varepsilon_1)|1\rangle = \varepsilon_2|0\rangle$

· niet-ontaard

niet ontaard E niv n

0e orde: $|0\rangle = \psi_n^{(0)}$, ~~$\varepsilon_0 = E_n^0$ = eigw H_0~~ $\Rightarrow E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda\underbrace{\langle\psi_n|\hat{H}'|\psi_n\rangle}_{\varepsilon_1 = \langle H'\rangle_{\psi_n}} + O(\lambda^2)$

1e orde: $\varepsilon_1 = E_n^{(1)} = \langle\psi_n|\hat{H}'|\psi_n\rangle$

$|1\rangle = \psi_n^{(1)} = \sum_{k\neq n}\dfrac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}$ (bevat alle niv behalve het ongestoorde dat we bestuderen)

$\psi_n^{(1)} \perp \psi_n^{(0)}$ + coeff volgens oude basisvect

$\Rightarrow |\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda\sum_{k\neq n} H'_{kn}/(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) + O(\lambda^2)$

2e orde: $\varepsilon_2 = E_n^{(2)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(1)}\rangle$
$= \sum_{k\neq n}\dfrac{|\langle\psi_k|H'|\psi_n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$

$\rightarrow \varepsilon_2$ heeft berekening op $|1\rangle$ nodig (reden 1)
+ ε_1 vaak 0 omv symmetrieën (2)
$\Rightarrow$ 2e orde correctie soms nodig

$\Rightarrow E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda\langle\psi_n|\hat{H}'|\psi_n\rangle + \sum_{k\neq n}\dfrac{|\langle\psi_k|H'|\psi_n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + O(\lambda^3)$

* opdat reeks zou convergeren matrixel. H' klein i.v.m. de verschillen ('gaps') v/d ongestoorde energieën
* indien H' veel niet-diagon. elementen $\Rightarrow$ contaminatie/koppeling v/d 1e orde t/s ongestoord niv n en andere ongestoorde niv.

· ontaard

ontaard E-niv n

0e orde $E_n^{(0)}$ = eigw H, hoe nu basis kiezen? niet eenduidig bepaald
zo goed mogelijke basis kiezen: eigvect kiezen die basis vormen v/d eigruimte voortgebracht door de oorspr. basis $\{|\varphi_n^i\rangle\}$

1e orde: $E_n^{(1)}$ berekenen dus
$\det|H'_{nu,ns} - E_{nr}^{(1)}\delta_{us}| = 0$ met u, s de positie i/d matrix r de ontaarding en n de energietoestand

en dan de eigvect berekenen $\rightarrow \psi_{n,r}^{(1)}$

$\hookrightarrow$ eigw en eigvect bepalen v/d storing binnen de eigruimte v/d ongestoorde energie

$\underbrace{P_n}_{\text{projectie operator}}|0\rangle = |0\rangle \rightarrow \underbrace{P_n\hat{H}'P_n}_{\text{beperking tot de beschouwde deelruimte}}|0\rangle = \varepsilon_1|0\rangle$ (storing diagonaliseren binnen eigenruimte)

$P_n\hat{H}'P_n|0_n^j\rangle = \varepsilon_{1,n}|0_n^j\rangle$

KBC

Kwantummechanica: Variatierekenen

[Beschouw nu een willekeurige toestand in de Hilbertruimte
Hoe verhoudt $\langle H \rangle_\psi$ zich tot de energie v/d grondtoestand?]

TB $\langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_0$, $\forall |\psi\rangle$ [algemener: $\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$]

B ontwikkel $|\psi\rangle$ in de eigenbasis van H

voor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ en $\langle \psi | \psi \rangle = 1$: $|\psi\rangle = \sum_0^\infty a_n |\varphi_n\rangle$ met $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$

dan is $\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_m \sum_n a_n^* \underbrace{\langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle}_{\delta_{nm} E_n} a_m$ met $E_0 \leq E_1 \leq \ldots$

$= \sum_n |a_n|^2 E_n \geq E_0$ □ $\langle \psi | \psi \rangle = \sum |a_n|^2 \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 1$

praktisch nut: beschouw een bepaalde familie van toestanden i/d $\mathcal{H}$
dan kun we het minimum van die familie zoeken $\geq E_0$

$|\psi\rangle \in \{|\varphi_\alpha\rangle ; \alpha \in \mathbb{R}\}$: $\min_\alpha \langle \varphi_\alpha | H | \varphi_\alpha \rangle \geq E_0$ E_0 benaderen gaat vaak goed ah.v. een gaussische

Dit geldt nu ook in andere toestanden

TB $E_\psi = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$ is stationair tov $|\psi\rangle$
$\Leftrightarrow$ $|\psi\rangle$ is een eigentoestand van H

B Beschouw de 1e variatie van E_ψ onder $|\psi\rangle \to |\psi\rangle + |\delta\psi\rangle$

$\Rightarrow E_\psi \to E_\psi + \delta E_\psi + O((\delta\psi)^2)$

$\Rightarrow (E_\psi + \delta E_\psi + \ldots) \langle \psi + \delta\psi | \psi + \delta\psi \rangle = \langle \psi + \delta\psi | H | \psi + \delta\psi \rangle$

in 1e orde (correctie) in $\delta\psi$:

$\delta E_\psi \langle \psi | \psi \rangle + E_\psi (\langle \delta\psi | \psi \rangle + \langle \psi | \delta\psi \rangle) = \langle \delta\psi | H | \psi \rangle + \langle \psi | H | \delta\psi \rangle$

$\Rightarrow \delta E_\psi \langle \psi | \psi \rangle = \langle \delta\psi | H - E_\psi | \psi \rangle + \langle \psi | H - E_\psi | \delta\psi \rangle$

$\boxed{\Leftarrow}$ Indien $|\psi\rangle$ een eigenfunctie is van H
dan $(H - E_\psi)|\psi\rangle = 0$ en $\langle \psi | (H - E_\psi) = 0$ $\Rightarrow \delta E_\psi = 0$

$\boxed{\Rightarrow}$ Indien $\delta E_\psi = 0$ voor willekeurige $|\delta\psi\rangle$, kies dan
$|\delta\psi\rangle = \eta (H - E_\psi)|\psi\rangle$: $\eta \ll 1$
Er volgt $0 = 2\eta \langle \psi | (H - E_\psi)^2 | \psi \rangle \propto \| (H - E_\psi)|\psi\rangle \|^2$
$\Rightarrow H|\psi\rangle = E_\psi |\psi\rangle$ □

Praktisch nut @ HB 9.2.1

Toepassingen

- berekenen v. energieniveaus mbv testfuncties (Belang gaussische testf.)
- verband storingsrekenen tot op 1e orde

$H = H_0 + \lambda H_1$

$E = E_0 + \lambda E_1 + \ldots$; $E_0 \equiv E_0^{(H_0)}$

$E_0 + \lambda E_1 = \langle \varphi_0 | H_0 + \lambda H_1 | \varphi_0 \rangle \geq E_0^{(H)}$

- afleiding onzekerheidsrelaties

vb 1 D HO

$\langle H \rangle_\psi = \frac{\langle P^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle X^2 \rangle \geq E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ $\forall |\psi\rangle$

$\Rightarrow \langle P^2 \rangle + m^2\omega^2 \langle X^2 \rangle - m\hbar\omega \geq 0$

$\Rightarrow D \leq 0$: $\hbar^2 - 4 \langle P^2 \rangle \langle X^2 \rangle \leq 0$ (tekenwissel)

$\Rightarrow \Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$