

Dictaat bij het college **Kwantummechanica 3:** de kwantummechanica van veeldeeltjessystemen

W.J.P. Beenakker

Jaargang 2016 – 2017

Inhoud van het college:

- 1) Bezettingsgetalrepresentatie en tweede kwantisatie
- 2) Kwantumstatistiek
- 3) Relativistische 1-deeltjes kwantummechanica
- 4) Kwantisatie van het elektromagnetisch veld
- 5) Veeldeeltjesinterpretatie van de relativistische QM

De volgende literatuur is gebruikt:

F. Schwabl, “Advanced Quantum Mechanics”, third edition (Springer, 2005);

David J. Griffiths, “Introduction to Quantum Mechanics”, second edition
(Prentice Hall, Pearson Education Ltd, 2005);

Eugen Merzbacher, “Quantum Mechanics”, third edition (John Wiley & Sons, 2003);

B.H. Bransden and C.J. Joachain, “Quantum Mechanics”, second edition
(Prentice Hall, Pearson Education Ltd, 2000).

Inhoudsopgave

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Bezettingsgetalrepresentatie en tweede kwantisatie | 1 |
| 1.1 | Resumé identieke deeltjes in de kwantummechanica | 1 |
| 1.2 | Bezettingsgetalrepresentatie | 5 |
| 1.2.1 | Constructie van de Fock-ruimte | 5 |
| 1.3 | Overgang naar een continue 1-deeltjesrepresentatie | 13 |
| 1.3.1 | Plaats- en impulsrepresentatie | 15 |
| 1.4 | Additieve veeldeeltjesgrootheden en deeltjesbehoud | 16 |
| 1.4.1 | Additieve 1-deeltjes grootheden | 16 |
| 1.4.2 | Additieve 2-deeltjes grootheden | 19 |
| 1.5 | Heisenbergbeeld en tweede kwantisatie | 21 |
| 1.6 | Voorbeelden en toepassingen: bosonische systemen | 24 |
| 1.6.1 | De lineaire harmonische oscillator als identiek veeldeeltjessysteem | 24 |
| 1.6.2 | Gedwongen oscillatoren: coherente toestanden en quasi-deeltjes | 26 |
| 1.6.3 | Superfluiditeit | 32 |
| 1.6.4 | Superfluiditeit voor zwak-repulsieve spin-0 bosonen (deel 1) | 33 |
| 1.6.5 | Intermezzo: de Bogolyubov-transformatie voor bosonen | 38 |
| 1.6.6 | Superfluiditeit voor zwak-repulsieve spin-0 bosonen (deel 2) | 40 |
| 1.6.7 | Het rariteitenkabinet van superfluïde ^4He : het “two-fluid model” | 42 |
| 1.7 | Voorbeelden en toepassingen: fermionische systemen | 45 |
| 1.7.1 | Fermi-zee en gathetheorie | 45 |
| 1.7.2 | De Bogolyubov-transformatie voor fermionen | 47 |
| 2 | Kwantumstatistiek | 50 |
| 2.1 | De dichtheidsoperator (J. von Neumann, 1927) | 53 |
| 2.2 | Voorbeeld: polarisatie van een spin-1/2 ensemble | 56 |
| 2.3 | De bewegingsvergelijking voor de dichtheidsoperator | 59 |
| 2.4 | Kwantummechanische ensembles in thermisch evenwicht | 60 |
| 2.4.1 | Thermisch evenwicht (thermodynamisch postulaat) | 62 |
| 2.4.2 | Kanonieke ensembles (J.W. Gibbs, 1902) | 62 |
| 2.4.3 | Microkanonieke ensembles | 66 |
| 2.4.4 | Grootkanonieke ensembles (J.W. Gibbs, 1902) | 67 |
| 2.4.5 | Even alles op een rijtje gezet | 70 |
| 2.5 | Fermi-gassen bij $T=0$ | 70 |
| 2.5.1 | Grondtoestand van een Fermi-gas | 75 |
| 2.5.2 | Fermi-gas met periodieke randvoorwaarden | 77 |
| 2.5.3 | Fermi-gas model voor geleidingselektronen in een metaal | 78 |
| 2.5.4 | Fermi-gas model voor zware kernen | 81 |
| 2.5.5 | Sterren in het eindstadium van de sterevolutie | 85 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 2.6 | Systemen bestaande uit niet-interagerende deeltjes | 88 |
| 2.7 | Ideale gassen in drie dimensies | 91 |
| 2.7.1 | Klassieke gassen | 93 |
| 2.7.2 | Bose-gassen en Bose–Einstein condensatie (1925) | 94 |
| 2.7.3 | Fermi-gassen bij $T \neq 0$ (geen tentamenstof) | 99 |
| 2.7.4 | Experimentele realisatie van Bose–Einstein condensaten | 102 |
| 2.8 | Lage-temperatuur supergeleiding (geen tentamenstof) | 104 |
| 2.8.1 | Welke elektronen vormen Cooper-paren? | 105 |
| 2.8.2 | Het energiegat en superfluiditeit | 107 |
| 2.8.3 | Excitatie-spectrum en quasi-deeltjes | 110 |
| 3 | Relativistische 1-deeltjes kwantummechanica | 113 |
| 3.1 | Eerste poging: de Klein–Gordon vergelijking (1926) | 114 |
| 3.2 | Tweede poging: de Dirac-vergelijking (1928) | 119 |
| 3.2.1 | De waarschijnlijkheidsinterpretatie bij de Dirac-vergelijking | 121 |
| 3.2.2 | Covariante formulering van de Dirac-vergelijking | 122 |
| 3.2.3 | Dirac-spinoren en Poincaré-transformaties | 123 |
| 3.2.4 | Oplossingen van de Dirac-vergelijking | 126 |
| 3.2.5 | Het succesverhaal van de Dirac-theorie | 128 |
| 3.2.6 | Problemen met de 1-deeltjes Dirac-theorie | 132 |
| 4 | Kwantisatie van het elektromagnetisch veld | 133 |
| 4.1 | Klassieke elektromagnetische velden: covariante formulering | 133 |
| 4.1.1 | Oplossing van de vrije elektromagnetische golfvergelijking | 135 |
| 4.1.2 | Elektromagnetische golven in termen van harmonische oscillaties | 137 |
| 4.2 | Kwantisatie en fotonen | 139 |
| 4.2.1 | Deeltjesinterpretatie bij het gekwantiseerde elektromagnetische veld | 140 |
| 4.2.2 | Fotontoestanden en toestandsdichtheid voor fotonen | 141 |
| 4.2.3 | Nulpuntsenergie en het Casimir-effect | 142 |
| 4.2.4 | Continuümlimiet | 143 |
| 4.3 | Een nieuwe kijk op deeltjes–golf dualiteit | 144 |
| 4.4 | Interacties met niet-relativistische QM systemen | 145 |
| 4.4.1 | Klassieke limiet | 148 |
| 4.4.2 | Spontane fotonemissie (geen tentamenstof) | 149 |
| 4.4.3 | Het fotongas: kwantumstatistiek voor fotonen | 152 |
| 5 | Veeldeeltjesinterpretatie van de relativistische QM | 154 |
| 5.1 | Kwantisatie van het Klein–Gordon veld | 155 |
| 5.2 | Kwantisatie van het Dirac-veld | 159 |
| 5.2.1 | Toegift: de 1-(quasi)deeltjesbenadering voor elektronen | 163 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| A | Fourier-reeksen en Fourier-integralen | i |
| A.1 | Fourier-reeksen | i |
| A.2 | Fourier-integralen | ii |
| A.2.1 | Definitie van de δ -functie | iii |
| B | Eigenschappen van de Pauli-spinmatrices | iv |
| C | Multiplicatorenmethode van Lagrange | v |
| D | Speciale relativiteit: conventies en definities | v |
| E | Elektromagnetische orthonormaliteitsrelaties | ix |

1 Bezettingsgetalrepresentatie en tweede kwantisatie

In dit hoofdstuk zal de kwantummechanica van identieke veeldeeltjessystemen verder worden uitgewerkt. De bijbehorende toestandsruimte zal worden geconstrueerd in termen van creatie- en annihilatie-operatoren, gebruik makende van de bezettingsgetalrepresentatie. Daarbij zullen nieuwe concepten zoals quasi-deeltjes en tweede kwantisatie worden geïntroduceerd.

Overeenkomstig materiaal is te vinden in Schwabl (Hst. 1, 2 en 3) en Merzbacher (Hst. 21, 22 en oscillatordeel van Hst. 14).

1.1 Resumé identieke deeltjes in de kwantummechanica

Deeltjes heten identiek als ze niet van elkaar kunnen worden onderscheiden aan de hand van een intrinsieke eigenschap (zoals spin, lading, massa, \dots).

Deze ononderscheidbaarheid heeft belangrijke kwantummechanische implicaties in situaties waarbij de golffuncties van de identieke deeltjes overlappen, zodat de deeltjes gelijktijdig in een bepaald ruimtelijk gebied kunnen worden gevonden. Denk hierbij aan het interactiegebied van een verstrooiingsexperiment of een afgesloten ruimte. Als de deeltjes effectief gelocaliseerd zijn, zoals metaalionen in een metaalrooster, dan zal de identiteitsvraag geen rol spelen. In zo'n situatie zijn de deeltjes praktisch gezien onderscheidbaar op basis van hun plaatscoördinaat en hebben de golffuncties een verwaarloosbare overlap.

Voor identieke deeltjes worden twee extra eisen aan de kwantummechanica (QM) opgelegd.

- Voor een systeem met identieke deeltjes moet gelden dat een willekeurige verwisseling van de deeltjes geen observabele consequenties mag hebben, anders waren de deeltjes namelijk wel onderscheidbaar geweest. Dit impliceert het concept van verwisselingsontaarding, hetgeen inhoudt dat de verwachtingswaarden van het systeem voor willekeurige veeldeeltjesobservabelen niet zullen mogen veranderen als de identieke deeltjes worden verwisseld in de toestandfunctie. Hieruit volgt dan dat de relevante kwantummechanische observabelen voor identieke veeldeeltjessystemen symmetrische functies zijn van de afzonderlijke 1-deeltjes observabelen.
- De kwantumtoestand van een identiek veeldeeltjessysteem lijkt ten gevolge van de verwisselingsontaarding niet door een maximale meting te kunnen worden vastgelegd. De manier waarop de natuur dit heeft opgelost is samen te vatten in het

symmetrisatie-postulaat: identieke veeldeeltjessystemen worden beschreven door oftewel volledig symmetrische toestandfuncties als de deeltjes bosonen zijn oftewel volledig antisymmetrische toestandfuncties als de deeltjes fermionen zijn. Voor de niet-relativistische QM is het een empirisch feit dat een gemengde symmetrie niet voorkomt in de natuur.

In dit hoofdstuk zal dit postulaat op een alternatieve manier worden geformuleerd en zal daaruit worden afgeleid dat uitsluitend volledig symmetrische/antisymmetrische toestandsfuncties aan de gewenste eisen voldoen.

Volledig symmetrische toestandsfuncties worden in de zogenaamde q -representatie aangegeven met $\psi_S(q_1, \dots, q_N, t)$, waarbij q_1, \dots, q_N de coördinaten zijn van de N afzonderlijke identieke deeltjes. Deze coördinaten zijn eigenwaarden behorende bij een complete set commensurabele 1-deeltjes observabelen \hat{q} . Er zijn natuurlijk vele mogelijkheden om deze coördinaten geschikt te kiezen. Een veel gebruikte keuze voor de coördinaten is bijvoorbeeld $q_j = (\text{plaatscoördinaat } \vec{r}_j, \text{ magnetisch spinkwantumgetal } m_{s_j} \equiv \sigma_j, \dots)$, waarbij met de stippels mogelijke andere interne (intrinsieke) vrijheidsgraden van deeltje j worden aangegeven. Voor de symmetrische toestandsfuncties moet gelden dat

$$\boxed{\forall_{\hat{P}} \hat{P} \psi_S(q_1, \dots, q_N, t) = \psi_S(q_{P(1)}, \dots, q_{P(N)}, t) = \psi_S(q_1, \dots, q_N, t)}, \quad (1)$$

met \hat{P} een permutatie-operator die alle coördinaten van de identieke deeltjes verwisselt overeenkomstig

$$q_1 \rightarrow q_{P(1)}, \quad q_2 \rightarrow q_{P(2)}, \quad \dots, \quad q_N \rightarrow q_{P(N)}. \quad (2)$$

De deeltjes met toestanden beschreven door volledig symmetrische toestandsfuncties heten bosonen en hebben de volgende eigenschappen:

- bosonen hebben geheeltallige spin (zie Hst. 4 en 5);
- bosonen voldoen aan de zogenaamde Bose–Einstein statistiek (zie Hst. 2);
- bosonen zitten graag in dezelfde toestand.

Volledig antisymmetrische toestandsfuncties worden in de q -representatie aangegeven met $\psi_A(q_1, \dots, q_N, t)$. Voor deze antisymmetrische toestandsfuncties moet gelden dat

$$\boxed{\forall_{\hat{P}} \hat{P} \psi_A(q_1, \dots, q_N, t) = \psi_A(q_{P(1)}, \dots, q_{P(N)}, t) = \begin{cases} + \psi_A(q_1, \dots, q_N, t) & \text{even } \hat{P} \\ - \psi_A(q_1, \dots, q_N, t) & \text{oneven } \hat{P} \end{cases}}. \quad (3)$$

Een permutatie \hat{P} heet even/oneven als het is opgebouwd uit een even/oneven aantal verwisselingen van twee deeltjes. De deeltjes met toestanden beschreven door volledig antisymmetrische toestandsfuncties heten fermionen en hebben de volgende eigenschappen:

- fermionen hebben halftallige spin (zie Hst. 5);
- fermionen voldoen aan de zogenaamde Fermi–Dirac statistiek (zie Hst. 2);
- fermionen kunnen niet in dezelfde toestand zitten.

Als bovenstaande (anti)symmetrisatieprocedure resulteert in een ruimtelijke symmetrisatie, dan is er een verhoogde kans dat de deeltjes bij elkaar in de buurt zitten. Let wel: dit kan bijvoorbeeld optreden bij identieke fermionen die in een antisymmetrische spintoestand zitten. Een ruimtelijke antisymmetrisatie geeft daarentegen aanleiding tot een verlaagde kans dat de deeltjes bij elkaar in de buurt zitten. Let wel: dit kan bijvoorbeeld optreden bij identieke spin-1 bosonen die in een antisymmetrische spintoestand zitten.

Geïsoleerde niet-interagerende veeldeeltjessystemen: veeldeeltjessystemen waarbij de onderlinge interacties tussen de deeltjes verwaarloosd mogen worden heten niet-interagerende veeldeeltjessystemen. De eigenschappen van zulke systemen worden bepaald door het soort deeltjes en door de mogelijke invloed van een externe potentiaal die op het systeem werkt (bijvoorbeeld ten gevolge van een magnetveld). Als zo'n niet-interagerend veeldeeltjessysteem in een macroscopisch eindig volume zit opgesloten en uit een groot aantal deeltjes bestaat, dan spreken we van een ideaal gas.

Geïsoleerde niet-interagerende veeldeeltjessystemen (zoals vrije-deeltjessystemen, ideale gassen, ...) spelen een centrale rol in het college Kwantummechanica 3, zowel bij het bepalen van de fysische eigenschappen van systemen bestaande uit identieke bosonen/fermionen als bij het opzetten van de relativistische QM.

Omdat we hier dus te maken hebben met geïsoleerde systemen is er sprake van behoud van totale energie en kan de toestandfunctie van het systeem uitgedrukt worden in termen van de stationaire toestanden

$$\begin{aligned} \psi_E(q_1, \dots, q_N, t) &= \exp(-iEt/\hbar) \psi_E(q_1, \dots, q_N), \\ \text{met } \hat{H} \psi_E(q_1, \dots, q_N) &= E \psi_E(q_1, \dots, q_N). \end{aligned} \quad (4)$$

De Hamilton-operator van een niet-interagerend veeldeeltjessysteem is opgebouwd uit pure 1-deeltjes Hamilton-operatoren, d.w.z. Hamilton-operatoren die uitsluitend afhangen van observabelen behorende bij één en hetzelfde deeltje. Als we de 1-deeltjes Hamilton-operator van deeltje j aangeven met \hat{H}_j , dan geldt voor N deeltjes dat

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{j=1}^N \hat{H}_j, \quad \text{met } [\hat{H}_j, \hat{H}_k] = 0 \text{ voor alle } j, k = 1, \dots, N} \quad (5)$$

De Hamilton-operatoren van de afzonderlijke deeltjes zijn dus commensurabel. Stel de 1-deeltjes energie-eigenwaardenvergelijking

$$\hat{H}_j \psi_{\lambda_j}(q_j) = E_{\lambda_j} \psi_{\lambda_j}(q_j) \quad (6)$$

heeft als oplossing de orthonormale set energie-eigenfuncties $\{\psi_{\lambda_j}(q_j)\}$ bij de energie-eigenwaarden E_{λ_j} die gelabeld worden door een complete set kwantumgetallen. Voorbeelden van zo'n complete set kwantumgetallen zijn $\lambda_j = n_j$ voor een lineaire harmonische

oscillator of $\lambda_j = (n_j, \ell_j, m_{\ell_j}, m_{s_j})$ voor een 1-elektron atoom. Voor de orthonormale set energie-eigentoestanden van het volledige niet-interagerende N -deeltjessysteem moeten we dan drie scenario's onderscheiden.

- A) De deeltjes zijn onderscheidbaar. De orthonormale set N -deeltjes energie-eigentoestanden bestaat uit toestanden van de vorm

$$\psi_E(q_1, \dots, q_N) = \psi_{\lambda_1}(q_1) \psi_{\lambda_2}(q_2) \cdots \psi_{\lambda_N}(q_N), \quad \text{met} \quad \boxed{E = \sum_{j=1}^N E_{\lambda_j}}. \quad (7)$$

Zulke producttoestandsfuncties beschrijven een ongecorreleerd systeem waarvoor de meting van de eigenschappen van een specifiek deeltje geheel onafhankelijk van de andere deeltjes kan worden uitgevoerd.

De complete set producttoestandsfuncties spannen samen de N -deeltjes toestandsruimte voor onderscheidbare deeltjes op.

- B) De deeltjes zijn ononderscheidbare bosonen. De orthonormale set N -deeltjes energie-eigentoestanden bestaat uit volledig symmetrische toestanden van de vorm

$$\psi_S(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\mathcal{N}_S} \sum_{\text{versch.perm.}} \psi_{\lambda_1}(q_{P(1)}) \psi_{\lambda_2}(q_{P(2)}) \cdots \psi_{\lambda_N}(q_{P(N)}),$$

met $\mathcal{N}_S = \sqrt{\text{aantal verschillende permutaties van } \lambda_1, \dots, \lambda_N}.$ (8)

De mogelijke energie-eigenwaarden zijn dezelfde als in vergelijking (7).

De bosonische N -deeltjes toestandsruimte wordt opgespannen door een gereduceerde set lineaire combinaties van producttoestandsfuncties. Zoals verwacht beschrijft dit een gecorreleerd systeem waarvoor de meting van de eigenschappen van een specifiek deeltje wordt beïnvloed door de andere deeltjes.

- C) De deeltjes zijn ononderscheidbare fermionen. De orthonormale set N -deeltjes energie-eigentoestanden bestaat uit volledig antisymmetrische toestanden van de vorm

$$\begin{aligned} \psi_A(q_1, \dots, q_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\text{perm.}} (-1)^P \psi_{\lambda_1}(q_{P(1)}) \psi_{\lambda_2}(q_{P(2)}) \cdots \psi_{\lambda_N}(q_{P(N)}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\lambda_1}(q_1) & \psi_{\lambda_2}(q_1) & \cdots & \psi_{\lambda_N}(q_1) \\ \psi_{\lambda_1}(q_2) & \psi_{\lambda_2}(q_2) & \cdots & \psi_{\lambda_N}(q_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\lambda_1}(q_N) & \psi_{\lambda_2}(q_N) & \cdots & \psi_{\lambda_N}(q_N) \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (9)$$

waarbij de determinant bekend staat onder de naam Slater-determinant. De mogelijke energie-eigenwaarden zijn weer dezelfde als in vergelijking (7), met dien verstande dat $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ allemaal verschillend moeten zijn. Als namelijk twee complete sets kwantumgetallen λ_j en λ_k hetzelfde zijn, dan zijn twee kolommen in de Slater-determinant aan elkaar gelijk en verdwijnt de volledig antisymmetrische eigenfunctie ψ_A . Dit staat bekend als het

Pauli-uitsluitingsprincipe voor identieke fermionen: slechts één fermion kan in een gegeven volledig gespecificeerde 1-deeltjeskwantumtoestand zitten.

Ook de fermionische N -deeltjes toestandsruimte wordt opgespannen door een gereduceerde set lineaire combinaties van producttoestandsfuncties. Ook dit beschrijft een gecorreleerd systeem waarvoor de meting van de eigenschappen van een specifiek deeltje wordt beïnvloed door de andere deeltjes.

1.2 Bezettingsgetalrepresentatie

Doelstelling: we gaan nu de toestandsruimte (Fock-ruimte) construeren van een veeldeeltjessysteem bestaande uit een willekeurig aantal identieke deeltjes van een niet nader gespecificeerd type. Deze Fock-ruimte zegt niets over het fysische scenario waarin de beschouwde deeltjes zich bevinden, zoals onderlinge interacties, externe invloeden, etc.. Het is simpelweg de complexe vectorruimte (Hilbert-ruimte, om precies te zijn) die alle mogelijke veeldeeltjes toestandsfuncties omvat en waarin de kwantummechanische veeldeeltjestheorie geformuleerd moet worden. De feitelijke constructie van de Fock-ruimte bestaat uit het vinden van een complete set basistoestanden ten opzichte waarvan een willekeurige veeldeeltjes toestandsfunctie ontbonden kan worden. De eigenschappen van deze basistoestanden leggen dan de eigenschappen van de Fock-ruimte vast.

De algemene constructievoorschriften voor de Fock-ruimte zijn:

- toestanden mogen niet veranderen onder deeltjesverwisseling;
- om het superpositieprincipe te garanderen mag de vorm van de Fock-ruimte niet veranderen bij overgang naar een alternatieve representatie van de basistoestanden.

1.2.1 Constructie van de Fock-ruimte

Beschouw identieke deeltjes van een niet nader gespecificeerd type en neem aan dat \hat{q} een bijbehorende complete set commensurabele 1-deeltjes observabelen is. Neem aan dat de gekozen complete set commensurabele 1-deeltjes observabelen \hat{q} uitsluitend discrete volledig gespecificeerde eigenwaarden q_j heeft die worden genummerd volgens $j = 1, 2, \dots$.

De bijbehorende 1-deeltjes basis van genormeerde eigentoestanden wordt gegeven door $\{|q_j\rangle, j = 1, 2, \dots\}$. Vervolgens gaan we de veeldeeltjes toestandsruimte opspannen door middel van (speciale) lineaire combinaties van producttoestandsfuncties bestaande uit deze 1-deeltjes basistoestanden. Denk hierbij aan de 1-deeltjes Hamilton-operatoren en bijbehorende eigenfuncties die in §1.1 werden gebruikt om de toestandsruimte voor niet-interagerende deeltjes op te spannen. Omdat er sprake is van een identiek veeldeeltjessysteem is het uitgesloten dat een legitieme veeldeeltjestoestand een uitspraak kan doen over de identiteit van een deeltje in een specifieke 1-deeltjes eigentoestand. Zo'n veeldeeltjestoestand kan hooguit iets zeggen over het aantal deeltjes n_j dat in een volledig gespecificeerde 1-deeltjes eigentoestand bij de eigenwaarde q_j zit. Deze getallen n_j worden bezettingsgetallen genoemd en kunnen, mits toegestaan, de waarden $0, 1, \dots$ doorlopen.

Postulaat (ter vervanging van het symmetrisatie-postulaat): de hermitische teloperatoren $\hat{n}_1, \hat{n}_2, \dots$, die het aantal identieke deeltjes in de 1-deeltjeskwantumtoestand met eigenwaarde q_1, q_2, \dots tellen, vormen samen een complete set commensurabele veeldeeltjes observabelen. De complete set 1-deeltjes observabelen \hat{q} is hierbij vrij te kiezen.

Het postulaataspect is hier dat de toestandsruimte voor interagerende deeltjes is op te bouwen aan de hand van niet-interagerende bouwblokken, die gebaseerd zijn op 1-deeltjes observabelen. Omdat de complete set 1-deeltjes observabelen vrij kan worden gekozen, is automatisch ook het superpositieprincipe zonder enige restrictie ingebouwd. Dit laatste zal garanderen dat de Fock-ruimte geen aanleiding zal geven tot gemengde symmetrie.

De bijbehorende genormeerde eigentoestanden $|n_1, n_2, \dots\rangle$ spannen dus samen de volledige Fock-ruimte op:

| | | | |
|----------------------|---|--|------|
| 0-deeltjestoestand | : | $ \Psi^{(0)}\rangle \equiv 0, 0, \dots\rangle \equiv \underline{\text{vacuümtoestand}}$, | (10) |
| 1-deeltjestoestanden | : | $ \Psi_j^{(1)}\rangle \equiv 0, \dots, 0, n_j=1, 0, \dots\rangle \equiv q_j\rangle$, | |
| | | ... | |

met

$$\hat{n}_j |\dots, n_j, \dots\rangle = n_j |\dots, n_j, \dots\rangle, \quad (11)$$

waarbij met \dots de overige bezettingsgetallen worden aangegeven. De representatie van de toestandsfuncties die correspondeert met zo'n type basis wordt bezettingsgetalrepresentatie genoemd.

Vervolgens gaan we de Fock-ruimte vanuit het vacuüm opbouwen door stap voor stap meer deeltjes aan de basistoestanden toe te voegen. Voer hiertoe de creatie-operator \hat{a}_j^\dagger in die

aan een basistoestand $|\dots, n_j, \dots\rangle$ een deeltje met kwantumgetal q_j toevoegt volgens

$$\hat{a}_j^\dagger |\dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_j+1} \exp(i\alpha_j(\dots, n_j, \dots)) |\dots, n_j+1, \dots\rangle. \quad (12)$$

De fasefactor $\exp(i\alpha_j(\dots, n_j, \dots))$ kan hier dus in principe zowel van de basistoestand $|\dots, n_j, \dots\rangle$ als van de label j afhangen. Uit de orthonormaliteit van de veeldeeltjesbasis volgt dan automatisch dat

$$\begin{aligned} \langle \dots, n_j, \dots | \hat{a}_j^\dagger | \dots, n'_j, \dots \rangle &\stackrel{(12)}{=} \sqrt{n'_j+1} \exp(i\alpha_j(\dots, n'_j, \dots)) \delta_{n_j, n'_j+1} \\ &\stackrel{\text{definitie}}{=} \langle \dots, n'_j, \dots | \hat{a}_j | \dots, n_j, \dots \rangle^*, \end{aligned}$$

zodat

$$\hat{a}_j |\dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_j} \exp(-i\alpha_j(\dots, n_j-1, \dots)) |\dots, n_j-1, \dots\rangle \quad (13)$$

voor de annihilatie-operator \hat{a}_j . Deze definitie voor de creatie- en annihilatie-operatoren is consistent met de notie van een vacuümtoestand als een toestand zonder deeltjes, immers

$$\boxed{\hat{a}_j |\Psi^{(0)}\rangle \stackrel{(10),(13)}{=} 0 \Rightarrow \langle \Psi^{(0)} | \hat{a}_j^\dagger = 0}. \quad (14)$$

Let wel, $\hat{a}_j^\dagger \neq \hat{a}_j$, zodat de creatie- en annihilatie-operatoren zelf geen observabelen zijn. Een eerste deel van de faseconventie voor de veeldeeltjes basistoestanden wordt vastgelegd door de werking van \hat{a}_j^\dagger en \hat{a}_j op de basistoestanden $|\Psi^{(0)}\rangle$ respectievelijk $|\Psi^{(1)}\rangle$ te specificeren:

$$\hat{a}_j^\dagger |\Psi^{(0)}\rangle \equiv |\Psi_j^{(1)}\rangle, \quad \hat{a}_j |\Psi_k^{(1)}\rangle \equiv \delta_{jk} |\Psi^{(0)}\rangle \Rightarrow \exp(i\alpha_j(0, 0, \dots)) = 1. \quad (15)$$

Voor willekeurige basistoestanden geldt nu dat

$$\begin{aligned} [\hat{n}_j, \hat{a}_{k \neq j}^\dagger] |\dots, n_j, \dots, n_k, \dots\rangle &\stackrel{(11),(12)}{=} (n_j - n_j) \hat{a}_{k \neq j}^\dagger |\dots, n_j, \dots, n_k, \dots\rangle = 0, \\ [\hat{n}_j, \hat{a}_j^\dagger] |\dots, n_j, \dots\rangle &\stackrel{(11),(12)}{=} ([n_j+1] - n_j) \hat{a}_j^\dagger |\dots, n_j, \dots\rangle = \hat{a}_j^\dagger |\dots, n_j, \dots\rangle, \end{aligned}$$

resultierend in de commutatierelaties

$$\boxed{[\hat{n}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \delta_{jk} \hat{a}_k^\dagger \xrightarrow{\text{herm. conj.}} [\hat{n}_j, \hat{a}_k] = -\delta_{jk} \hat{a}_k}. \quad (16)$$

Verder kan er een direct verband worden afgeleid tussen de teloperatoren en de op bovenstaande wijze gedefinieerde creatie/annihilatie-operatoren. Hiertoe beschouwen we de volgende matrixelementen voor willekeurige basistoestanden:

$$\langle \dots, n_j, \dots | \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j | \dots, n'_j, \dots \rangle \stackrel{(13)}{=} n_j \delta_{n_j, n'_j}.$$

Deze matrix is diagonaal en heeft de correcte bezettingsgetallen als eigenwaarden, oftewel

$$\boxed{\hat{n}_j = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j}. \quad (17)$$

Overgang naar een andere discrete 1-deeltjesrepresentatie.

Ga over van de 1-deeltjes basis $\{|q_j\rangle, j = 1, 2, \dots\}$ bij de complete set observabelen \hat{q} naar de basis $\{|p_r\rangle, r = 1, 2, \dots\}$ bij de alternatieve complete set observabelen \hat{p} . Op grond van de bijbehorende volledighedsrelaties geldt dan

$$|q_j\rangle = \sum_r |p_r\rangle \langle p_r | q_j\rangle \quad \text{en} \quad |p_r\rangle = \sum_j |q_j\rangle \langle q_j | p_r\rangle, \quad (18)$$

waarbij de basisovergangsmatrix $(c_{rj}) \equiv (\langle p_r | q_j\rangle)$ voldoet aan de unitariteitscondities

$$\sum_r \langle q_k | p_r\rangle \langle p_r | q_j\rangle = \langle q_k | q_j\rangle = \delta_{jk} \quad \text{en} \quad \sum_j \langle p_r | q_j\rangle \langle q_j | p_v\rangle = \langle p_r | p_v\rangle = \delta_{rv}. \quad (19)$$

De Fock-ruimte kan nu op volledig analoge wijze worden opgezet in termen van de 1-deeltjes eigentoestanden $|p_r\rangle$ en bijbehorende creatie/annihilatie-operatoren \hat{b}_r^\dagger en \hat{b}_r . Als de twee vacuümtoestanden in beide representaties aan elkaar gelijk worden gesteld, dan moeten de volgende relaties gelden tussen de oude basistoestanden $|\Psi^{(0)}\rangle, |\Psi_j^{(1)}\rangle$ en de nieuwe basistoestanden $|\Phi^{(0)}\rangle, |\Phi_r^{(1)}\rangle$:

$$\text{vacuümtoestand : } |\Phi^{(0)}\rangle \equiv |0, 0, \dots\rangle = |\Psi^{(0)}\rangle,$$

$$\begin{aligned} \text{1-deeltjestoestanden : } \hat{a}_j^\dagger |\Psi^{(0)}\rangle &= |\Psi_j^{(1)}\rangle = |q_j\rangle \stackrel{(18)}{=} \sum_r |p_r\rangle \langle p_r | q_j\rangle \\ &= \sum_r \langle p_r | q_j\rangle |\Phi_r^{(1)}\rangle = \sum_r \langle p_r | q_j\rangle \hat{b}_r^\dagger |\Phi^{(0)}\rangle = \sum_r \hat{b}_r^\dagger \langle p_r | q_j\rangle |\Psi^{(0)}\rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

Zonder verlies van algemeenheid kan de resulterende (1-deeltjes)relatie tussen de twee sets creatie/annihilatie-operatoren tot de volledige Fock-ruimte worden uitgebreid:

$$\begin{aligned} \hat{a}_j^\dagger &= \sum_r \hat{b}_r^\dagger \langle p_r | q_j\rangle \quad \xrightarrow{\text{herm. conj.}} \quad \hat{a}_j = \sum_r \hat{b}_r \langle q_j | p_r\rangle, \\ \hat{b}_r^\dagger &= \sum_j \hat{a}_j^\dagger \langle q_j | p_r\rangle \quad \xrightarrow{\text{herm. conj.}} \quad \hat{b}_r = \sum_j \hat{a}_j \langle p_r | q_j\rangle. \end{aligned} \quad (21)$$

Op deze manier is de creatie van een deeltje met kwantumgetal q_j netjes equivalent met een lineaire superpositie van afzonderlijk gecreëerde deeltjes met alle mogelijke kwantumgetallen p_r , elk met een eigen amplitude $\langle p_r | q_j\rangle$.

Een belangrijke cross-check op de tot nu toe gevolgde procedure wordt gegeven door de zogenaamde totale teloperator

$$\boxed{\hat{N} = \sum_j \hat{n}_j}. \quad (22)$$

Deze operator telt het totale aantal deeltjes van een gegeven identiek veeldeeltjessysteem, hetgeen natuurlijk invariant moet zijn onder een willekeurige 1-deeltjes basisovergang. Nu geldt inderdaad dat

$$\hat{N} \stackrel{(17)}{=} \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \stackrel{(21)}{=} \sum_{j,r,v} \hat{b}_r^\dagger \hat{b}_v \langle p_r | q_j \rangle \langle q_j | p_v \rangle \stackrel{(19)}{=} \sum_{r,v} \hat{b}_r^\dagger \hat{b}_v \delta_{rv} = \sum_r \hat{b}_r^\dagger \hat{b}_r .$$

Constructie van de Fock-ruimte: eerste stap.

Voor een willekeurige veeldeeltjestoestand $|\Psi\rangle$ geldt dat $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger |\Psi\rangle$ en $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\Psi\rangle$ dezelfde toestand beschrijven. Dit houdt in dat er een relatie van het type

$$\left(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger - \exp(i\beta(\Psi, j, k)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger \right) |\Psi\rangle = 0$$

moet gelden, waarbij de fasefactor $\exp(i\beta(\Psi, j, k))$ zowel van de veeldeeltjestoestand $|\Psi\rangle$ als van de labels j en k zou kunnen afhangen.

We gaan eerst met behulp van het superpositieprincipe bewijzen dat $\exp(i\beta(\Psi, j, k))$ onafhankelijk moet zijn van de veeldeeltjestoestand $|\Psi\rangle$. Beschouw hiertoe twee willekeurige verschillende veeldeeltjes basistoestanden $|\Psi_1\rangle$ en $|\Psi_2\rangle$ in de q -representatie, dan beschrijft op grond van het superpositieprincipe ook $|\Psi\rangle = c_1 |\Psi_1\rangle + c_2 |\Psi_2\rangle$ met $c_{1,2} \in \mathbb{C}$ een mogelijke veeldeeltjestoestand. Hieruit volgt dan dat

$$\begin{aligned} & c_1 \exp(i\beta(\Psi, j, k)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\Psi_1\rangle + c_2 \exp(i\beta(\Psi, j, k)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\Psi_2\rangle \\ &= \exp(i\beta(\Psi, j, k)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\Psi\rangle = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger |\Psi\rangle = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger (c_1 |\Psi_1\rangle + c_2 |\Psi_2\rangle) \\ &= c_1 \exp(i\beta(\Psi_1, j, k)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\Psi_1\rangle + c_2 \exp(i\beta(\Psi_2, j, k)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\Psi_2\rangle. \end{aligned}$$

Hierbij zijn $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\Psi_1\rangle$ en $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger |\Psi_2\rangle$ wederom twee verschillende basistoestanden, zodat

$$\forall_{\Psi_1, \Psi_2} \exp(i\beta(\Psi_1, j, k)) = \exp(i\beta(\Psi_2, j, k)) \equiv \exp(i\beta(j, k)) .$$

Dit houdt in dat

$$\forall_{\Psi} \left(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger - \exp(i\beta(j, k)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger \right) |\Psi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger - \exp(i\beta(j, k)) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j^\dagger = 0 .$$

Vervolgens kan de representatie-onafhankelijkheid van de Fock-ruimte worden gebruikt door deze operatoridentiteit met behulp van vergelijking (21) om te schrijven naar een willekeurige alternatieve 1-deeltjesrepresentatie waarvoor eenzelfde operatoridentiteit geldt:

$$\sum_{r,v} \langle p_r | q_j \rangle \langle p_v | q_k \rangle \left[\hat{b}_r^\dagger \hat{b}_v^\dagger - \exp(i\beta(j, k)) \hat{b}_v^\dagger \hat{b}_r^\dagger \right] = 0 \quad \text{én} \quad \hat{b}_r^\dagger \hat{b}_v^\dagger - \exp(i\beta'(r, v)) \hat{b}_v^\dagger \hat{b}_r^\dagger = 0 .$$

Voor elke (r, v) -combinatie met een unieke werking in de p -representatie vinden we dan

$$\begin{aligned} & \langle p_r | q_j \rangle \langle p_v | q_k \rangle \left[\exp(i\beta'(r, v)) - \exp(i\beta(j, k)) \right] \\ & + \langle p_v | q_j \rangle \langle p_r | q_k \rangle \left[1 - \exp(i\beta(j, k)) \exp(i\beta'(r, v)) \right] = 0 . \end{aligned}$$

Dit moet gelden voor een willekeurige overgang naar een andere representatie, zodat

$$\exp(i\beta(j, k)) = \exp(i\beta'(r, v)) \equiv \exp(i\beta) = \pm 1 .$$

Hiermee hebben we uiteindelijk gevonden dat de fasefactor $\exp(i\beta)$ universeel is en dat er twee takken van oplossingen zijn:

$$\begin{aligned} \forall_{\Psi} \quad [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] |\Psi\rangle = 0 \Rightarrow \text{commutatierelaties: } [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] = [\hat{a}_j, \hat{a}_k] = 0 \\ \text{of} \end{aligned} \tag{23}$$

$$\forall_{\Psi} \quad \{\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger\} |\Psi\rangle = 0 \Rightarrow \text{anticommutatierelaties: } \{\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger\} = \{\hat{a}_j, \hat{a}_k\} = 0 ,$$

gebruik makende van de zogenaamde anticommutator

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} . \tag{24}$$

Constructie van de Fock-ruimte: tweede stap.

Tenslotte kan dit resultaat gecombineerd worden met de algemene commutatierelaties (16). Hiertoe maken we gebruik van het feit dat een commutator van het type $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$ zowel in termen van commutatoren als anticommutatoren kan worden uitgeschreven:

$$\boxed{[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} = \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\} - \{\hat{A}, \hat{C}\}\hat{B}} . \tag{25}$$

Voor de commuterende set oplossingen uit vergelijking (23) vinden we zo

$$[\hat{n}_j, \hat{a}_k^\dagger] \stackrel{(17)}{=} [\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \hat{a}_j^\dagger [\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] + [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] \hat{a}_j \stackrel{(23)}{=} \hat{a}_j^\dagger [\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] \stackrel{(16)}{=} \delta_{jk} \hat{a}_j^\dagger ,$$

en voor de anticommuterende set oplossingen

$$[\hat{n}_j, \hat{a}_k^\dagger] \stackrel{(17)}{=} [\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \hat{a}_j^\dagger \{\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger\} - \{\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger\} \hat{a}_j \stackrel{(23)}{=} \hat{a}_j^\dagger \{\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger\} \stackrel{(16)}{=} \delta_{jk} \hat{a}_j^\dagger .$$

Alles bij elkaar moeten de creatie/annihilatie-operatoren dus voldoen aan oftewel

$$\boxed{\text{commutatierelaties: } [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] = [\hat{a}_j, \hat{a}_k] = 0 \quad , \quad [\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \delta_{jk} \hat{1} ,} \tag{26}$$

de bijbehorende identieke deeltjes worden bosonen genoemd,

oftewel

$$\text{anticommutatierelaties: } \{\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger\} = \{\hat{a}_j, \hat{a}_k\} = 0 \quad , \quad \{\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger\} = \delta_{jk} \hat{1} \quad , \quad (27)$$

de bijbehorende identieke deeltjes worden fermionen genoemd.

In het volgende hoofdstuk zal worden afgeleid dat deze twee verschijningsvormen voor de creatie/annihilatie-operatoren van identieke veeldeeltjessystemen aanleiding geven tot volstrekt verschillende statistische theorieën. Zoals in het werkcollege zal worden aangetoond gelden de (anti)commutatierelaties in identieke vorm voor alle representaties, zodat bij een gegeven soort deeltje precies één van de twee soorten statistiek hoort en een gemengde statistiek dus is uitgesloten.

In het werkcollege zal tevens worden aangetoond dat de veeldeeltjestoestanden

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \equiv \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots |\Psi^{(0)}\rangle \equiv \prod_j \frac{(\hat{a}_j^\dagger)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}} |\Psi^{(0)}\rangle \quad (28)$$

samen de gezochte orthonormale basis van de Fock-ruimte vormen. Deze universele basis heeft precies dezelfde vorm voor bosonen en fermionen. Let wel op de volgorde van de creatie-operatoren, die is namelijk van belang voor fermionische systemen!

Eigenschappen voor bosonische veeldeeltjessystemen (zie opgave 1):

- Bovenstaande basis komt overeen met de faseconventie

$$\exp(i\alpha_j(\dots, n_j, \dots)) \equiv 1 \quad (29)$$

in vergelijking (12), zodat geldt

$$\begin{aligned} \hat{a}_j |\dots, n_j, \dots\rangle &= \sqrt{n_j} |\dots, n_j-1, \dots\rangle \quad , \\ \hat{a}_j^\dagger |\dots, n_j, \dots\rangle &= \sqrt{n_j+1} |\dots, n_j+1, \dots\rangle \quad . \end{aligned} \quad (30)$$

- Bij k -voudige annihilatie ($k = 0, 1, \dots$) wordt dit

$$(\hat{a}_j)^k |\dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_j(n_j-1)\dots(n_j-k+1)} |\dots, n_j-k, \dots\rangle \quad ,$$

hetgeen alleen tot een zinvol resultaat leidt als de reeks stopt zodra $n_j - k < 0$. Hieruit volgt dan onmiddellijk dat n_j uitsluitend de waarden

$$n_j = 0, 1, 2, \dots \quad (31)$$

kan doorlopen, zoals verwacht voor de eigenwaarden van een teloperator.

- In de basistoestanden is de volgorde van de creatie-operatoren niet belangrijk. De toestandfuncties zullen in deze versie van de Fock-ruimte volledig symmetrisch blijken te zijn onder deeltjesverwisseling, zoals verwacht voor bosonische toestanden. Dit aspect zal in § 1.3 worden toegelicht.

Eigenschappen voor fermionische veeldeeltjessystemen (zie opgave 2):

- Op grond van vergelijking (27) moet gelden dat $(\hat{a}_j^\dagger)^2 = \frac{1}{2}\{\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$. Dus geen twee fermionen kunnen in dezelfde volledig gespecificeerde 1-deeltjestoestand zitten, zoals verwacht op basis van het Pauli-uitsluitingsprincipe.
- De bezettingsgetallen kunnen slechts twee waarden aannemen, namelijk

$$\boxed{n_j = 0, 1} . \quad (32)$$

Dit volgt uit het feit dat de teloperatoren in dit geval projectie-operatoren zijn:

$$\hat{n}_j^2 \stackrel{(17)}{=} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \stackrel{(27)}{=} \hat{a}_j^\dagger (\hat{1} - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j) \hat{a}_j \stackrel{\hat{a}_j^2 = 0}{=} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j = \hat{n}_j .$$

Ook dit is in overeenstemming met het Pauli-uitsluitingsprincipe.

- Bovenstaande basis komt overeen met de faseconventie

$$\exp(i\alpha_j(\dots, n_j, \dots)) \equiv (-1)^{N_{<j}} , \quad N_{<j} \equiv \sum_{k=1}^{j-1} n_k \quad (33)$$

in vergelijking (12), zodat geldt

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{a}_j |\dots, n_j, \dots\rangle &= \delta_{n_j,1} (-1)^{N_{<j}} |\dots, n_j-1, \dots\rangle , \\ \hat{a}_j^\dagger |\dots, n_j, \dots\rangle &= \delta_{n_j,0} (-1)^{N_{<j}} |\dots, n_j+1, \dots\rangle . \end{aligned}} \quad (34)$$

- In de basistoestanden is de volgorde van de creatie-operatoren nu wel belangrijk. De toestandsfuncties zullen in deze versie van de Fock-ruimte volledig antisymmetrisch blijken te zijn onder deeltjesverwisseling, zoals verwacht voor fermionische toestanden. Dit aspect zal in § 1.3 worden toegelicht.

De toestandsfuncties voor willekeurige identieke veeldeeltjessystemen kunnen nu worden uitgedrukt in termen van de basistoestanden (28). Meestal zullen die toestandsfuncties situaties beschrijven met een vast aantal deeltjes. Echter, met name in de relativistische QM treden er situaties op waarbij dat niet het geval is. Denk daarbij aan de mogelijkheid van deeltjesverval, zoals het verval van een neutron ($n \rightarrow p e^- \bar{\nu}_e$) of het verval van een aangeslagen atoom onder emissie van een foton (zie Hst.4). Ook maser/laser-systemen vallen in deze categorie, omdat de straling in dat geval op coherente wijze (d.w.z. in fase) wordt opgebouwd. Een voorbeeld van zo'n coherente toestand zal in § 1.6 worden behandeld. Tenslotte kunnen als artefact van bepaalde benaderingsmethoden situaties ontstaan waarbij het aantal deeltjes effectief niet behouden blijft (zie § 1.6, § 1.7 en Hst. 2).

1.3 Overgang naar een continue 1-deeltjesrepresentatie

Omdat de Fock-ruimte niet afhangt van de gekozen 1-deeltjesrepresentatie, had er ook voor gekozen kunnen worden om een complete set commensurabele 1-deeltjes observabelen \hat{k} te gebruiken met een continu eigenwaardenspectrum $\{k\}$. Denk hierbij aan de plaats- of impulsoperatoren. De bijbehorende orthonormale 1-deeltjesbasis wordt dan gegeven door $\{|k\rangle\}$. In deze situatie heeft een op tellen gebaseerde bezettingsgetalrepresentatie weinig zin, tenzij de k -ruimte wordt opgedeeld in een partitie van kleine cellen.

In analogie met het voorgaande gaan we wel werken met creatie- en annihilatie-operatoren

$$\hat{a}_k^\dagger \equiv \hat{a}^\dagger(k) \quad \text{en} \quad \hat{a}_k \equiv \hat{a}(k) , \quad (35)$$

met de gebruikelijke eigenschappen

$$\boxed{\hat{a}^\dagger(k)|\Psi^{(0)}\rangle \equiv |k\rangle \quad \text{en} \quad \hat{a}(k)|\Psi^{(0)}\rangle = 0} . \quad (36)$$

De eigenschappen van deze creatie- en annihilatie-operatoren zijn rechtstreeks af te leiden uit het discrete geval door middel van een 1-deeltjesbasisovergang:

$$\begin{aligned} \hat{a}_j^\dagger &= \int dk \hat{a}^\dagger(k) \langle k|q_j\rangle \xrightarrow{\text{herm. conj.}} \hat{a}_j = \int dk \hat{a}(k) \langle q_j|k\rangle , \\ \hat{a}^\dagger(k) &= \sum_j \hat{a}_j^\dagger \langle q_j|k\rangle \xrightarrow{\text{herm. conj.}} \hat{a}(k) = \sum_j \hat{a}_j \langle k|q_j\rangle , \end{aligned} \quad (37)$$

hetgeen in analogie met vergelijking (21) volgt uit

$$\hat{a}_j^\dagger|\Psi^{(0)}\rangle = |q_j\rangle \xrightarrow{\text{voll.}} \int dk |k\rangle \langle k|q_j\rangle \xrightarrow{(36)} \int dk \langle k|q_j\rangle \hat{a}^\dagger(k)|\Psi^{(0)}\rangle .$$

Voor deze basisovergang gelden de volgende unitariteitscondities:

$$\begin{aligned} \sum_j \langle k|q_j\rangle \langle q_j|k'\rangle &\xrightarrow{\text{voll.}} \langle k|k'\rangle = \delta(k - k') , \\ \int dk \langle q_j|k\rangle \langle k|q_{j'}\rangle &\xrightarrow{\text{voll.}} \langle q_j|q_{j'}\rangle = \delta_{jj'} . \end{aligned} \quad (38)$$

Uit vergelijkingen (26) en (27) voor een discrete 1-deeltjesrepresentatie volgt dan voor een bosonisch systeem dat

$$\boxed{[\hat{a}^\dagger(k), \hat{a}^\dagger(k')] = [\hat{a}(k), \hat{a}(k')] = 0 \quad , \quad [\hat{a}(k), \hat{a}^\dagger(k')] = \delta(k - k') \hat{1}} \quad (39)$$

en voor een fermionisch systeem dat

$$\boxed{\{\hat{a}^\dagger(k), \hat{a}^\dagger(k')\} = \{\hat{a}(k), \hat{a}(k')\} = 0 \quad , \quad \{\hat{a}(k), \hat{a}^\dagger(k')\} = \delta(k - k') \hat{1}} \quad (40)$$

Bewijs: de afleiding van de verdwijnende (anti)commutatoren is triviaal. Verder geldt

$$\begin{aligned} \hat{a}(k)\hat{a}^\dagger(k') \mp \hat{a}^\dagger(k')\hat{a}(k) &\stackrel{(37)}{=} \sum_{j,j'} \langle k|q_j\rangle \langle q_{j'}|k'\rangle (\hat{a}_j \hat{a}_{j'}^\dagger \mp \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{a}_j) \stackrel{(26),(27)}{=} \sum_j \langle k|q_j\rangle \langle q_j|k'\rangle \hat{1} \\ &\stackrel{(38)}{=} \delta(k - k') \hat{1} \quad , \end{aligned}$$

waarbij het minteken (plusteken) bedoeld is voor bosonische (fermionische) systemen.

De representatie-onafhankelijke totale teloperator \hat{N} kan in dit geval worden uitgedrukt in termen van de deeltjesdichtheidsoperator

$$\boxed{\hat{n}(k) \equiv \hat{a}^\dagger(k)\hat{a}(k)} \quad , \quad (41)$$

door middel van

$$\begin{aligned} \hat{N} &\stackrel{(22)}{=} \sum_j \hat{n}_j \stackrel{(17)}{=} \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \stackrel{(37)}{=} \int dk \int dk' \hat{a}^\dagger(k) \hat{a}(k') \sum_j \langle k|q_j\rangle \langle q_j|k'\rangle \\ &\stackrel{(38)}{=} \int dk \int dk' \hat{a}^\dagger(k) \hat{a}(k') \delta(k - k') \stackrel{(41)}{=} \int dk \hat{n}(k) \quad . \end{aligned} \quad (42)$$

De basis voor de N -deeltjes toestandsfuncties ziet er in de k -representatie als volgt uit:

$$\boxed{\left\{ |k_1, \dots, k_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{a}^\dagger(k_1) \dots \hat{a}^\dagger(k_N) |\Psi^{(0)}\rangle : k_1, \dots, k_N \in \{k\} \right\}} \quad (43)$$

Dit is een direct gevolg van het feit dat

$$\int dk_1 \dots \int dk_N |k_1, \dots, k_N\rangle \langle k_1, \dots, k_N| = \hat{1}_N \quad (44)$$

de eenheidsoperator is in de N -deeltjes deelruimte, hetgeen in opgave 3 van het werkcollege zal worden bewezen. Een willekeurige N -deeltjes toestandsfunctie $|\Psi\rangle$ kan dus in de k -representatie worden gerepresenteerd door de functie

$$\psi(k_1, \dots, k_N) \equiv \langle k_1, \dots, k_N | \Psi \rangle \quad (45)$$

Zoals verwacht is deze functie volledig symmetrisch voor bosonische systemen en volledig antisymmetrisch voor fermionische systemen. Ook dit zal in opgave 3 van het werkcollege worden bewezen.

1.3.1 Plaats- en impulsrepresentatie

Bovenstaande discussie laat zich op triviale wijze uitbreiden tot gevallen waarbij het 1-deeltjes eigenwaardenspectrum gemengd is, d.w.z. deels discreet en deels continu. Hier van volgen nu een tweetal voorbeelden.

De plaatsrepresentatie: als eerste voorbeeld van een gemengde representatie beschouwen we spin- s deeltjes in de plaatsrepresentatie. Deze representatie zal gebruikt gaan worden in hoofdstuk 5 bij het opzetten van de relativistische QM. In bovenstaande uitdrukkingen moeten in dit geval de volgende substituties worden uitgevoerd:

$$\hat{k} \rightarrow (\hat{\vec{r}}, \hat{S}_z/\hbar) \quad , \quad \{k\} \rightarrow \{\vec{r} \in \mathbb{R}^3 \quad , \quad \sigma = m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s\} \quad ,$$

$$\int dk \rightarrow \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \quad , \quad \delta(k - k') \rightarrow \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad \text{en} \quad \hat{a}(k) \rightarrow \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \quad . \quad (46)$$

Op suggestieve wijze wordt de annihilatie-operator $\hat{a}(k)$ in de plaatsrepresentatie dus geschreven als een zogenaamde veldoperator $\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r})$. Deze schrijfwijze is ingevoerd met het oog op het onderwerp dat in § 1.5 behandeld zal gaan worden.

De impulsrepresentatie: als tweede voorbeeld van een gemengde representatie beschouwen we spin- s deeltjes in de impulsrepresentatie. Deze representatie is met name handig voor systemen die (in eerste benadering) bestaan uit vrije deeltjes, zoals in hoofdstuk 5 gebruikt zal worden bij het analyseren van relativistische golfvergelijkingen in de QM. In dit geval moeten de volgende substituties worden uitgevoerd:

$$\hat{k} \rightarrow (\hat{\vec{p}}, \hat{S}_z/\hbar) \quad , \quad \{k\} \rightarrow \{\vec{p} \in \mathbb{R}^3 \quad , \quad \sigma = m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s\} \quad ,$$

$$\int dk \rightarrow \sum_{\sigma} \int d\vec{p} \quad , \quad \delta(k - k') \rightarrow \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad \text{en} \quad \hat{a}(k) \rightarrow \hat{a}_{\sigma}(\vec{p}) \quad . \quad (47)$$

Het verband tussen beide representaties wordt gegeven door een Fourier-transformatie:

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \stackrel{(37)}{=} \int d\vec{p} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \hat{a}_{\sigma}(\vec{p}) = \int d\vec{p} \frac{\exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \hat{a}_{\sigma}(\vec{p}) \quad ,$$

$$\hat{a}_{\sigma}(\vec{p}) \stackrel{(37)}{=} \int d\vec{r} \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) = \int d\vec{r} \frac{\exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \quad . \quad (48)$$

Dit is in feite hetzelfde type verband dat er in de 1-deeltjes kwantummechanica bestaat tussen toestandsfuncties in de plaats- en impulsrepresentatie (zie het college Kwantummechanica 2).

1.4 Additieve veeldeeltjesgrootheden en deeltjesbehoud

Observabelen: we hebben nu de toestandsruimte geconstrueerd van systemen die bestaan uit een willekeurig aantal identieke deeltjes en we hebben bekeken hoe de basistoestanden eruit zien als er gebruik wordt gemaakt van discrete dan wel continue 1-deeltjesrepresentaties. Als volgende stap in de constructie van de veeldeeltjes “toolbox” gaan we de veeldeeltjesobservabelen onder de loep nemen.

In de Fock-ruimte zijn allerlei soorten veeldeeltjesobservabelen mogelijk, zolang deze maar netjes verwisselingsymmetrisch zijn. Een belangrijke klasse veeldeeltjesobservabelen wordt gevormd door de observabelen die horen bij zogenaamde additieve veeldeeltjesgrootheden. Deze grootheden laten zich catalogiseren aan de hand van het aantal deeltjes dat als een soort cluster moet worden samengenomen in de fysische grootheid. Vervolgens wordt dan gesommeerd/geïntegreerd over alle clusters. Kenmerkend voor additieve veeldeeltjesgrootheden is dat er een representatie bestaat waarin de bijbehorende veeldeeltjesobservabele uitsluitend is opgebouwd uit teloperatoren en/of deeltjesdichtheidsoperatoren. Dit houdt automatisch in dat zo’n veeldeeltjesobservabele de verschillende eigentoeestanden van de totale teloperator \hat{N} niet mengt (“deeltjesbehoud”).

Additieve veeldeeltjesgrootheden spelen met name een centrale rol bij het opzetten van de (vrije-deeltjes) relativistische QM en bij de beschrijving van systemen bestaande uit zwak-interagerende identieke deeltjes (zoals elektronen in een atoom of geleidingselektronen in een metaal). In laagste-orde benadering zijn de deeltjes van een zwak-interagerend systeem te beschouwen als niet-interagerend, zodat de totale energie bestaat uit een som van de afzonderlijke 1-deeltjes energieën (zie § 1.1). Als een eerste-orde correctie hierop kunnen vervolgens de interacties tussen paren van deeltjes worden meegenomen. Op die manier dragen de deeltjes in sets van twee bij tot de energiecorrectie. Dit procédé laat zich op triviale wijze uitbreiden tot grotere deeltjesclusters die (steeds zwakker) bijdragen tot de interactie-energie.

1.4.1 Additieve 1-deeltjes grootheden

Beschouw een 1-deeltjes observabele \hat{A} . Door gebruik te maken van de volledigheidrelatie kan deze observabele in de discrete q -representatie worden geschreven als

$$\hat{A} = \sum_{j,j'} |q_j\rangle \langle q_j| \hat{A} |q_{j'}\rangle \langle q_{j'}| .$$

Elke afzonderlijke term in deze som voert het deeltje vanuit een toestand $|q_{j'}\rangle$ over in een toestand $|q_j\rangle$, met het matrixelement $\langle q_j|\hat{A}|q_{j'}\rangle$ als bijbehorende gewichtsfactor. Op basis van deze 1-deeltjes observabele kan nu een veeldeeltjesobservabele worden geconstrueerd

die netjes symmetrisch is onder deeltjesverwisseling:

$$\hat{A}_{\text{tot}}^{(1)} = \sum_{\alpha} \hat{A}_{\alpha} ,$$

waarbij \hat{A}_{α} de 1-deeltjes observabele is behorende bij deeltje α . De werking van $\hat{A}_{\text{tot}}^{(1)}$ in de Fock-ruimte is dan simpelweg dat een deeltje in de toestand $|q_{j'}\rangle$ wordt geannihileerd en vervolgens met gewichtsfactor $\langle q_j | \hat{A} | q_{j'} \rangle$ in de toestand $|q_j\rangle$ wordt gecreëerd:

$$\boxed{\hat{A}_{\text{tot}}^{(1)} = \sum_{j,j'} \hat{a}_j^{\dagger} \langle q_j | \hat{A} | q_{j'} \rangle \hat{a}_{j'} = \sum_{j,j'} \langle q_j | \hat{A} | q_{j'} \rangle \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_{j'}} . \quad (49)$$

We spreken nu van een additieve 1-deeltjes grootheid als de bijbehorende veeldeeltjesobservabele in de vorm (49) kan worden weergegeven. Deze algemene schrijfwijze is namelijk hetzelfde voor willekeurige discrete 1-deeltjesrepresentaties:

$$\hat{A}_{\text{tot}}^{(1)} \stackrel{(18),(21)}{=} \sum_{r,r',j,j'} \hat{b}_r^{\dagger} \langle p_r | q_j \rangle \langle q_j | \hat{A} | q_{j'} \rangle \langle q_{j'} | p_{r'} \rangle \hat{b}_{r'} \stackrel{\text{voll.}}{=} \sum_{r,r'} \hat{b}_r^{\dagger} \langle p_r | \hat{A} | p_{r'} \rangle \hat{b}_{r'} .$$

Veeldeeltjesobservabelen behorende bij additieve 1-deeltjes grootheden zijn ook eenvoudig om te schrijven naar continue 1-deeltjesrepresentaties. Met behulp van de basisovergang (37) en de unitariteitsconditie (38) is vergelijking (49) om te zetten naar

$$\boxed{\hat{A}_{\text{tot}}^{(1)} = \int dk_1 \int dk_2 \hat{a}^{\dagger}(k_1) \langle k_1 | \hat{A} | k_2 \rangle \hat{a}(k_2) = \int dk_1 \int dk_2 \langle k_1 | \hat{A} | k_2 \rangle \hat{a}^{\dagger}(k_1) \hat{a}(k_2)} . \quad (50)$$

De algemene uitdrukkingen (49) en (50) gelden ongeacht of de 1-deeltjes observabele \hat{A} discrete of continue eigenwaarden heeft.

Speciale gevallen: stel de 1-deeltjes observabele \hat{A} heeft discrete eigenwaarden en maakt deel uit van de complete set commensurabele 1-deeltjes observabelen \hat{q} . Dan geldt

$$\langle q_j | \hat{A} | q_{j'} \rangle \equiv A_{j'} \langle q_j | q_{j'} \rangle = A_j \delta_{jj'} \stackrel{(49)}{\implies} \hat{A}_{\text{tot}}^{(1)} = \sum_j A_j \hat{n}_j .$$

Het speciale aan deze representatie is dat er in analogie met de totale teloperator \hat{N} alleen geteld hoeft te worden. Van dit concept hebben we in §1.1 al gebruik gemaakt bij de bepaling van de totale energie van een niet-interagerend veeldeeltjessysteem. Naast additieve 1-deeltjes grootheden met discrete eigenwaarden bestaan er ook additieve 1-deeltjes grootheden met continue eigenwaarden (zie onderstaande voorbeelden). In dat geval is er een continue representatie te vinden waarvoor geldt dat

$$\langle k_1 | \hat{A} | k_2 \rangle \equiv A(k_2) \langle k_1 | k_2 \rangle = A(k_1) \delta(k_1 - k_2) \stackrel{(50)}{\implies} \hat{A}_{\text{tot}}^{(1)} = \int dk_1 A(k_1) \hat{n}(k_1) .$$

Deeltjesbehoud: een kenmerkende eigenschap van additieve veeldeeltjesgrootheden is dat de observabelen alleen termen bevatten met evenveel creatie- als annihilatie-operatoren. Zulke observabelen commuteren met de totale teloperator \hat{N} en mengen derhalve de verschillende eigentoestanden van \hat{N} niet. In dat opzicht zou je kunnen spreken van “deeltjesbehoud”.

Additieve 1-deeltjes grootheden in plaats- en impulsrepresentatie.

Met het oog op latere toepassingen bekijken we een paar nuttige additieve 1-deeltjes grootheden in de gemengde plaats- en impulsrepresentaties behorende bij spin- s deeltjes.

De totale impuls: in de impulsrepresentatie maakt de 1-deeltjes impulsoperator \hat{p} deel uit van de complete set observabelen ten opzichte waarvan de veeldeeltjes Fock-ruimte is geconstrueerd. Derhalve heeft de totale-impulsoperator in de impulsrepresentatie een triviale vorm in termen van deeltjesdichtheidsoperatoren:

$$\hat{P}_{\text{tot}}^{(1)} = \sum_{\sigma} \int d\vec{p} \vec{p} \hat{n}_{\sigma}(\vec{p}) = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-i\hbar \vec{\nabla} \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \right). \quad (51)$$

Het bewijs voor de laatste stap in deze vergelijking gaat met behulp van de Fouriertransformatie (48) [zie App. A voor nadere details]:

$$\begin{aligned} -i\hbar \int d\vec{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{\nabla} \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) &= -i\hbar \int d\vec{p} \int d\vec{p}' \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{p}) \hat{a}_{\sigma}(\vec{p}') \int d\vec{r} \frac{\exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^3} \vec{\nabla} \exp(i\vec{p}' \cdot \vec{r}/\hbar) \\ &= \int d\vec{p} \int d\vec{p}' \vec{p}' \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{p}) \hat{a}_{\sigma}(\vec{p}') \int d\vec{r} \frac{\exp(i[\vec{p}' - \vec{p}] \cdot \vec{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^3} \\ &= \int d\vec{p} \int d\vec{p}' \vec{p}' \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{p}) \hat{a}_{\sigma}(\vec{p}') \delta(\vec{p} - \vec{p}') = \int d\vec{p} \vec{p} \hat{n}_{\sigma}(\vec{p}). \end{aligned}$$

De totale kinetische energie: de bijbehorende 1-deeltjes observabele $\hat{T} = \hat{p}^2/(2m)$ is wederom diagonaal in de impulsrepresentatie. In analogie met het voorgaande voorbeeld vinden we voor de totale kinetische-energie operator:

$$\hat{T}_{\text{tot}}^{(1)} = \sum_{\sigma} \int d\vec{p} \frac{\vec{p}^2}{2m} \hat{n}_{\sigma}(\vec{p}) = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \right). \quad (52)$$

De totale spin in de z -richting: in dit geval maakt de bijbehorende 1-deeltjes observabele \hat{S}_z deel uit van de complete set observabelen van zowel de plaats- als impulsrepresentatie. De totale-spinoperator in de z -richting wordt dus op triviale wijze gegeven door:

$$\hat{S}_{\text{tot}}^{(1)} \cdot \vec{e}_z = \sum_{\sigma} \int d\vec{p} \hbar\sigma \hat{n}_{\sigma}(\vec{p}) = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \hbar\sigma \hat{n}_{\sigma}(\vec{r}) \equiv \sum_{\sigma} \hbar\sigma \hat{N}_{\sigma}, \quad (53)$$

waarbij \hat{N}_{σ} het totale aantal deeltjes telt met spincomponent $\hbar\sigma$ langs de z -as.

De totale potentiële energie in een extern veld: stel dat de deeltjes onder invloed staan van een externe potentiaal $V(\vec{r})$. De bijbehorende 1-deeltjes observabele $V(\hat{\vec{r}})$ is dan diagonaal in de plaatsrepresentatie, zodat de totale potentiële-energie operator wordt gegeven door

$$\hat{V}_{\text{tot}}^{(1)} \equiv \sum_{\sigma} \int d\vec{r} V(\vec{r}) \hat{n}_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \int d\vec{k} \int d\vec{p} \mathcal{V}(\vec{k}) \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{p}) \hat{a}_{\sigma}(\vec{p} - \hbar\vec{k}) , \quad (54)$$

gebruik makende van de definitie $V(\vec{r}) \equiv \int d\vec{k} \mathcal{V}(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$. De afleiding van de rechterkant van deze uitdrukking gaat analoog aan de afleiding die in opgave 4 van het werkcollege zal worden uitgewerkt.

Tweede kwantisatie: bovenstaande additieve veeldeeltjesobservabelen zijn in de plaatsrepresentatie qua vorm equivalent met een gekwantiseerde versie van de bijbehorende 1-deeltjes verwachtingswaarden, d.w.z. een verwachtingswaarde met $\psi \rightarrow \hat{\psi}$. Dit formele verband tussen 1-deeltjes en veeldeeltjes kwantumtheorie wordt ietwat suggestief aangeduid met de term “tweede kwantisatie”.

1.4.2 Additieve 2-deeltjes grootheden

In de discrete q -representatie worden de geordende 2-deeltjes basistoestanden gegeven door

$$\begin{aligned} |\Psi_{j,k>j}^{(2)}\rangle &\equiv |0, \dots, 0, n_j = 1, 0, \dots, 0, n_k = 1, 0, \dots\rangle = \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_k^{\dagger} |\Psi^{(0)}\rangle , \\ |\Psi_{jj}^{(2)}\rangle &\equiv |0, \dots, 0, n_j = 2, 0, \dots\rangle = \frac{(\hat{a}_j^{\dagger})^2}{\sqrt{2}} |\Psi^{(0)}\rangle , \end{aligned} \quad (55)$$

waarbij de laatste 2-deeltjestoestand alleen relevant is voor bosonen. Gebruik makende van de bijbehorende volledighedsrelatie is een 2-deeltjes observabele \hat{B} dan te schrijven als

$$\hat{B} = \sum_{j,j',k,k'} |\Psi_{jk}^{(2)}\rangle \langle \Psi_{jk}^{(2)}| \hat{B} |\Psi_{j'k'}^{(2)}\rangle \langle \Psi_{j'k'}^{(2)}| .$$

Elke afzonderlijke term in deze som voert de twee deeltjes vanuit een toestand $|\Psi_{j'k'}^{(2)}\rangle$ over in een toestand $|\Psi_{jk}^{(2)}\rangle$, met het matrixelement $\langle \Psi_{jk}^{(2)}| \hat{B} |\Psi_{j'k'}^{(2)}\rangle$ als bijbehorende gewichtsfactor. Op basis van deze 2-deeltjes observabele kan nu een veeldeeltjesobservabele worden geconstrueerd die netjes symmetrisch is onder deeltjesverwisseling:

$$\hat{B}_{\text{tot}}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta \neq \alpha} \hat{B}_{\alpha\beta} ,$$

waarbij $\hat{B}_{\alpha\beta}$ de 2-deeltjes observabele is behorende bij deeltjes α en $\beta \neq \alpha$. Verder is de factor $1/2$ geïntroduceerd om dubbeltellen te voorkomen. De bijbehorende werking in de Fock-ruimte is dan simpelweg

$$\boxed{\hat{B}_{\text{tot}}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{j,j',k,k'} \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_k^{\dagger} \langle \Psi_{jk}^{(2)}| \hat{B} |\Psi_{j'k'}^{(2)}\rangle \hat{a}_{k'} \hat{a}_{j'} = \frac{1}{2} \sum_{j,j',k,k'} \langle \Psi_{jk}^{(2)}| \hat{B} |\Psi_{j'k'}^{(2)}\rangle \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_k^{\dagger} \hat{a}_{k'} \hat{a}_{j'} .} \quad (56)$$

Deze schrijfwijze, waarbij een veeldeeltjesoperator zodanig geschreven is dat alle creatie-operators vooraan staan, staat bekend onder de naam normaalordering. We spreken nu van een additieve 2-deeltjes grootheid als de bijbehorende veeldeeltjesobservabele in de vorm (56) kan worden weergegeven. Deze algemene schrijfwijze is wederom hetzelfde voor willekeurige discrete 1-deeltjesrepresentaties, aangezien net als in het geval van de 1-deeltjes observabelen elke creatie/annihilatie-operator gekoppeld is aan de overeenkomstige annihilatie/creatie-operator die verborgen zit in één van de basistoestanden in het matrixelement. Overgang naar een continue representatie levert op overeenkomstige wijze

$$\boxed{\hat{B}_{\text{tot}}^{(2)} = \frac{1}{2} \int dk_1 \cdots \int dk_4 \langle k_1, k_2 | \hat{B} | k_3, k_4 \rangle \hat{a}^\dagger(k_1) \hat{a}^\dagger(k_2) \hat{a}(k_4) \hat{a}(k_3)} . \quad (57)$$

De algemene uitdrukkingen (56) en (57) gelden wederom voor zowel discrete als continue eigenwaarden van de 2-deeltjes observabele \hat{B} .

Speciale gevallen: stel de 2-deeltjes observabele \hat{B} heeft discrete eigenwaarden en is diagonaal in de q -representatie. Dan geldt

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{jk}^{(2)} | \hat{B} | \Psi_{j'k'}^{(2)} \rangle &\equiv B_{j'k'} \langle \Psi_{jk}^{(2)} | \Psi_{j'k'}^{(2)} \rangle = B_{jk} \delta_{jj'} \delta_{kk'} \\ \xrightarrow{(56)} \hat{B}_{\text{tot}}^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_{j,k} B_{jk} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_j = \frac{1}{2} \sum_{j,k} B_{jk} (\hat{n}_j \hat{n}_k - \hat{n}_j \delta_{jk}) , \end{aligned}$$

waarbij is gebruikt dat

$$\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_j \stackrel{(16),(17)}{=} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - \hat{a}_j^\dagger \delta_{jk} \hat{a}_j \stackrel{(17)}{=} \hat{n}_j \hat{n}_k - \hat{n}_j \delta_{jk} = \underline{\text{paar-teloperator}} . \quad (58)$$

Naast additieve 2-deeltjes grootheden met discrete eigenwaarden bestaan er ook additieve 2-deeltjes grootheden met continue eigenwaarden (zie onderstaand voorbeeld). In dat geval is er een continue representatie te vinden waarvoor \hat{B} diagonaal wordt, zodat $\hat{B}_{\text{tot}}^{(2)}$ uit te drukken is in termen van paar-dichtheidsoperatoren behorende bij die representatie.

Voorbeeld: ruimtelijke paarinteracties in plaats- en impulsrepresentatie.

Beschouw een systeem bestaande uit spin- s deeltjes met een ruimtelijke onderlinge paarinteractie beschreven door de observabele $U(\hat{r}_1 - \hat{r}_2)$. Deze observabele is diagonaal in de plaatsrepresentatie, zodat de totale operator voor ruimtelijke paarinteracties tussen de deeltjes wordt gegeven door

$$\hat{U}_{\text{tot}}^{(2)} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma_1}(\vec{r}_1) . \quad (59)$$

In de impulsrepresentatie gaat dit over in (zie opgave 4 van het werkcollege)

$$\hat{U}_{\text{tot}}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int d\vec{k} \int d\vec{p}_1 \int d\vec{p}_2 \mathcal{U}(\vec{k}) \hat{a}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{p}_1) \hat{a}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{p}_2) \hat{a}_{\sigma_2}(\vec{p}_2 + \hbar\vec{k}) \hat{a}_{\sigma_1}(\vec{p}_1 - \hbar\vec{k}) , \quad (60)$$

gebruik makende van de definitie $U(\vec{r}) \equiv \int d\vec{k} \mathcal{U}(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$.

1.5 Heisenbergbeeld en tweede kwantisatie

Als voorbereiding op de relativistische behandeling van de kwantummechanica in hoofdstuk 5 bekijken we nu de tijdsafhankelijkheid van de creatie- en annihilatie-operatoren in het Heisenbergbeeld.

Beschouw hiertoe een geïsoleerd identiek veeldeeltjessysteem met een Hamilton-operator van de volgende vorm:

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_{\text{tot}}^{(1)} + C\hat{1} \quad (C \in \mathbb{R}), \quad (61)$$

waarbij de term $\hat{H}_{\text{tot}}^{(1)}$ een additieve observabele is van het soort dat in § 1.4.1 is beschreven. We gaan vervolgens de tijdsevolutie van dit veeldeeltjessysteem bekijken in het Heisenbergbeeld. Zoals in het college Kwantummechanica 2 is uitgelegd zijn alle toestandsfuncties tijdsafhankelijk in het Heisenbergbeeld en wordt de tijdsevolutie van het systeem volledig vastgelegd door de tijdsevolutie van de operatoren. De verschillen met de tot nu toe gebruikte veeldeeltjesformulering in het Schrödingerbeeld laten zich in dit geval als volgt samenvatten:

$$\begin{aligned} \text{Schrödingerbeeld} & : \text{toestandsfuncties} \rightarrow |\Psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}_{\text{tot}}t/\hbar)|\Psi(0)\rangle, \\ & \text{observabelen} \rightarrow \hat{A}(t), \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \text{Heisenbergbeeld} & : \text{toestandsfuncties} \rightarrow |\Psi_H(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle, \\ & \text{observabelen} \rightarrow \hat{A}_H(t) = \exp(i\hat{H}_{\text{tot}}t/\hbar)\hat{A}(t)\exp(-i\hat{H}_{\text{tot}}t/\hbar), \end{aligned}$$

waarbij is aangenomen dat de beide beelden samenvallen op het tijdstip $t = 0$. Bijvoorbeeld geldt dat

$$\hat{H}_{\text{tot}_H}(t) = \hat{H}_{\text{tot}}, \quad (63)$$

aangezien we hier te maken hebben met een geïsoleerd systeem. De operatoren voldoen in het Heisenbergbeeld dus aan de zogenaamde bewegingsvergelijking van Heisenberg

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{A}_H(t), \hat{H}_{\text{tot}}] + \left(\frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t}\right)_H. \quad (64)$$

We gaan nu bekijken wat dit inhoudt voor de creatie- en annihilatie-operatoren.

Het discrete geval: voor een algemene discrete 1-deeltjes representatie geldt

$$\hat{H}_{\text{tot}}^{(1)} \stackrel{(49)}{=} \sum_{r,r'} \langle p_r | \hat{H} | p_{r'} \rangle \hat{b}_r^\dagger \hat{b}_{r'} \stackrel{(63)}{=} \sum_{r,r'} \langle p_r | \hat{H} | p_{r'} \rangle \hat{b}_{r_H}^\dagger(t) \hat{b}_{r_H}(t),$$

met \hat{H} de 1-deeltjes Hamilton-operator behorende bij het additieve deel van de veeldeeltjesobservabele \hat{H}_{tot} . Hieruit volgt dat

$$\begin{aligned}
[\hat{b}_{v_H}(t), \hat{H}_{\text{tot}}] &= \sum_{r,r'} \langle p_r | \hat{H} | p_{r'} \rangle [\hat{b}_{v_H}(t), \hat{b}_{r_H}^\dagger(t) \hat{b}_{r_H}(t)] \stackrel{(26),(27)}{=} \sum_{r,r'} \langle p_r | \hat{H} | p_{r'} \rangle \hat{b}_{r_H}(t) \delta_{vr} \\
&= \sum_{r'} \langle p_v | \hat{H} | p_{r'} \rangle \hat{b}_{r_H}(t) .
\end{aligned}$$

De bewegingsvergelijking van Heisenberg wordt zo

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}_{v_H}(t) = \sum_r \langle p_v | \hat{H} | p_r \rangle \hat{b}_{r_H}(t)} , \quad (65)$$

waarbij gebruikt is dat de creatie- en annihilatie-operatoren tijdsafhankelijk zijn in het Schrödingerbeeld. Deze bewegingsvergelijking ziet er sprekend uit als de Schrödinger-vergelijking voor een 1-deeltjes toestandsfunctie in de p -representatie

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \xrightarrow{\langle p_v | * } i\hbar \frac{d}{dt} \langle p_v | \psi(t) \rangle \stackrel{\text{voll.}}{=} \sum_r \langle p_v | \hat{H} | p_r \rangle \langle p_r | \psi(t) \rangle .$$

De gekoppelde lineaire differentiaalvergelijkingen (65) ontkoppelen als een representatie wordt gebruikt waarvoor geldt dat $\langle p_v | \hat{H} | p_r \rangle = E_r \langle p_v | p_r \rangle = E_v \delta_{rv}$, zodat

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}_{v_H}(t) = E_v \hat{b}_{v_H}(t) \Rightarrow \hat{b}_{v_H}(t) = \exp(-iE_v t/\hbar) \hat{b}_{v_H}(0) \equiv \exp(-iE_v t/\hbar) \hat{b}_v .$$

Vrije deeltjes in de plaatsrepresentatie: in het Schrödingerbeeld wordt de annihilatie-operator in de plaatsrepresentatie gegeven door de tijdsafhankelijke veldoperator $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$. De bijbehorende tijdsafhankelijke operator in het Heisenbergbeeld noteren we kortweg als

$$\boxed{(\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}))_H(t) \equiv \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)} , \quad (66)$$

hetgeen met behulp van de Fourier-transformatie

$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) = \int d\vec{p} \frac{\exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \hat{a}_{\sigma_H}(\vec{p}, t) \quad (67)$$

is om te schrijven naar de impulsrepresentatie. Voor vrije deeltjes wordt de Hamilton-operator gegeven door de totale kinetische-energie operator $\hat{T}_{\text{tot}}^{(1)}$:

$$\hat{H}_{\text{tot}} \stackrel{(52)}{=} \sum_{\sigma'} \int d\vec{p}' \frac{\vec{p}'^2}{2m} \hat{n}_{\sigma'}(\vec{p}') \stackrel{(63)}{=} \sum_{\sigma'} \int d\vec{p}' \frac{\vec{p}'^2}{2m} \hat{n}_{\sigma_H}(\vec{p}', t) . \quad (68)$$

In de impulsrepresentatie ziet de bewegingsvergelijking van Heisenberg er dus als volgt uit:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_{\sigma_H}(\vec{p}, t) &\stackrel{(64),(68)}{=} \sum_{\sigma'} \int d\vec{p}' \frac{\vec{p}'^2}{2m} [\hat{a}_{\sigma_H}(\vec{p}, t), \hat{n}_{\sigma_H}(\vec{p}', t)] \stackrel{(16)}{=} \frac{\vec{p}^2}{2m} \hat{a}_{\sigma_H}(\vec{p}, t) \\
\Rightarrow \quad &\boxed{\hat{a}_{\sigma_H}(\vec{p}, t) = \exp(-iE_{\vec{p}} t/\hbar) \hat{a}_\sigma(\vec{p}) \quad \text{met} \quad E_{\vec{p}} \equiv \frac{\vec{p}^2}{2m}} . \quad (69)
\end{aligned}$$

Dit heeft de volgende consequentie voor de veldoperator $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$ in de plaatsrepresentatie:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) \stackrel{(67),(69)}{=} \int d\vec{p} \frac{\exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{\vec{p}^2}{2m} \hat{a}_{\sigma_H}(\vec{p}, t)$$

$$\stackrel{(67)}{\implies} \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)}. \quad (70)$$

- In het Heisenbergbeeld voldoet de veeldeeltjes veldoperator $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$ aan een vergelijking die qua vorm identiek is aan de vrije Schrödinger-vergelijking voor een 1-deeltjes golffunctie in de plaatsrepresentatie.¹ Daarom staat $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$ ook wel bekend onder de naam Schrödinger-veld. Vergelijking (70) kan worden opgevat als een gekwantiseerde versie van de “klassieke” Schrödinger-vergelijking voor kwantummechanische golffuncties. Ook dit rechtstreekse verband tussen een 1-deeltjes golfvergelijking en een veeldeeltjestheorie in het Heisenbergbeeld is een manifestatie van het concept tweede kwantisatie.

Tweede kwantisatie zal een cruciale rol gaan spelen in de relativistische QM, waar het idee van een relativistische 1-deeltjes kwantummechanische veldvergelijking zal moeten worden losgelaten en moeten worden vervangen door een overeenkomstige veeldeeltjesformulering die het startpunt vormt van de kwantumveldentheorie.

- Zoals we hebben gezien kan bovenstaande bewegingsvergelijking (golfvergelijking) voor $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$ simpelweg worden opgelost (ontkoppeld) door middel van een Fourier-decompositie (vlakke-golf ontbinding):

$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) \stackrel{(67),(69)}{=} \int d\vec{p} \frac{\exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(-iE_{\vec{p}}t/\hbar) \hat{a}_\sigma(\vec{p}). \quad (71)$$

Dit is in feite een manifestatie van deeltjes–golf dualiteit, want de annihilatie/creatie van een deeltje gaat automatisch gepaard met een overeenkomstige vlakke-golf factor. Later zal van dit gegeven gebruik worden gemaakt bij het construeren van de alternatieve veeldeeltjesformulering van de relativistische QM.

¹Dit verband geldt ook voor situaties waarbij een paarinteractie tussen de deeltjes wordt meegenomen, zodat ook een potentiële-energieterm aan de Hamilton-operator wordt toegevoegd.

1.6 Voorbeelden en toepassingen: bosonische systemen

In het voorgaande hebben we stevast het generieke begrip “deeltjes” gebruikt om de fundamentele kwantummechanische objecten van een specifiek kwantumsysteem aan te geven. Het lijkt overduidelijk om welke deeltjes het hierbij gaat: intuïtief verwachten we bijvoorbeeld dat de deeltjes die horen bij een atomair gassysteem de desbetreffende atomen zullen zijn. In het vervolg van dit hoofdstuk zullen we echter gaan zien dat de deeltjesinterpretatie van een kwantumsysteem in termen van de bijbehorende fundamentele energiekwanta radicaal kan veranderen als de interactieparameters van het systeem veranderen. De lering die we hieruit zullen moeten trekken is dat we flexibeler met het begrip “deeltjes” moeten omgaan dan we tot nu toe hebben gedaan. Dit is in feite één van de belangrijkste nieuwe aspecten van de veeldeeltjeskwantummechanica die in deze collegereeks aan bod zullen komen.

1.6.1 De lineaire harmonische oscillator als identiek veeldeeltjessysteem

We beginnen met één van de simpelste, maar tevens één van de meest gebruikte kwantummechanische systemen: de lineaire harmonische oscillator. Waarom de oscillator zo'n belangrijke rol speelt zal uit het vervolg duidelijk worden.

Een lineaire harmonische oscillator is overduidelijk een 1-deeltjessysteem. Echter, het bezit ook de typische eigenschappen van een identiek veeldeeltjessysteem, hetgeen een cruciale rol gaat spelen bij de beschrijving van deeltjes in de relativistische QM. Een volledig uitgewerkt voorbeeld hiervan is de fotonbeschrijving van elektromagnetische velden in hoofdstuk 4. Om de analogie tussen een lineaire harmonische oscillator en een identiek veeldeeltjessysteem te belichten gaan we uit van de Hamilton-operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \equiv \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2),$$

$$\text{met } \hat{P} \equiv \hat{p}_x \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \quad \text{en} \quad \hat{Q} \equiv \hat{x} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (72)$$

Voer vervolgens een raising-, lowering- en teloperator in volgens

$$\begin{aligned} \underline{\text{raisingoperator}} & : \hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}), \\ \underline{\text{loweringoperator}} & : \hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}), \\ \underline{\text{teloperator}} & : \hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}. \end{aligned} \quad (73)$$

De dimensieloze plaats- en impulsoperatoren \hat{Q} en \hat{P} hebben de volgende fundamentele eigenschappen:

$$\hat{Q}^\dagger = \hat{Q} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \quad , \quad \hat{P}^\dagger = \hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i\sqrt{2}} \quad \text{en} \quad [\hat{Q}, \hat{P}] = \frac{1}{\hbar} [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hat{1} . \quad (74)$$

In de laatste stap is gebruikt dat de coördinaat x en impuls p_x samen een geconjugeerd paar vormen, zodat voor de bijbehorende operatoren de gebruikelijke kanonieke kwantisatiecondities gelden. Hieruit kunnen dan de volgende eigenschappen worden afgeleid:

- Er geldt $\hat{a}^\dagger \neq \hat{a}$, zodat de raising- en loweringoperatoren niet hermitisch zijn en dus ook niet corresponderen met een observabele grootte.
- Er geldt $\hat{n}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{n}$, zodat de teloperator wel correspondeert met een observabele grootte.
- De raising- en loweringoperatoren voldoen aan bosonische commutatierelaties:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{Q} + i\hat{P}, \hat{Q} - i\hat{P}] \stackrel{(74)}{=} \hat{1} \quad \text{en} \quad [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}] = 0 . \quad (75)$$

- Uit de relatie

$$\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \stackrel{(74)}{=} \left(\frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i\sqrt{2}} \right)^2 + \left(\frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \right)^2 = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger$$

volgt tenslotte een verband tussen de Hamilton-operator en de teloperator:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \stackrel{(75)}{=} \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \hat{1} \right) . \quad (76)$$

De lineaire harmonische oscillator gedraagt zich dus als een identiek veeldeeltjessysteem bestaande uit niet-interagerende bosonen. Deze bosonen kunnen precies één waarde voor de 1-deeltjesenergie aannemen, namelijk $E_1 = \hbar\omega$. Ze zijn derhalve op te vatten als de energie-kwanta behorende bij de beschouwde harmonische vibratie/oscillatiebeweging. Deze kwanta worden gecreëerd door \hat{a}^\dagger , geannihileerd door \hat{a} en geteld door \hat{n} . Afgezien van de constante bijdrage (nulpuntsenergie) $\frac{1}{2}\hbar\omega$ heeft de Hamilton-operator de vorm van een veeldeeltjesobservabele behorende bij een additieve 1-deeltjes grootte.

De fundamentele energiekwanta van oscillatorsystemen kunnen dus als niet-interagerende bosonische deeltjes worden geïnterpreteerd. In de natuur komen vele verschillende bosonische vibratie/oscillatie-kwanta voor, met name kwanta die een deeltjesinterpretatie geven aan golfffenomenen in de klassieke fysica. Welbekende voorbeelden hiervan zijn fotonen behorende bij elektromagnetische golven (zie Hst. 4) en fononen behorende bij collectieve eigentrillingen van roosters (zie opgave 5 van het werkcollege).

Met behulp van de afleiding in § 1.2.1 kunnen de energie-eigentoestanden voor de lineaire harmonische oscillator worden geschreven als

$$|n\rangle \stackrel{(28)}{=} \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad \text{met} \quad \hat{H}|n\rangle \stackrel{(11)}{=} \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (77)$$

Verder wordt de betekenis van de benaming “raising” en “lowering” duidelijk als we de werking van de creatie- en annihilatie-operatoren bekijken:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger |n\rangle &\stackrel{(30)}{=} \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{H}\hat{a}^\dagger |n\rangle = \hbar\omega\left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)\hat{a}^\dagger |n\rangle, \\ \hat{a} |n\rangle &\stackrel{(30)}{=} \sqrt{n} |n-1\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{H}\hat{a} |n\rangle = \hbar\omega\left(n - 1 + \frac{1}{2}\right)\hat{a} |n\rangle. \end{aligned} \quad (78)$$

De raisingoperator (loweringoperator) voert een gegeven energie-eigentoestand dus over in de energie-eigentoestand bij het eerstvolgende hogere (lagere) energieniveau.

Opmerking: als was uitgegaan van een fermionische oscillator

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega(\hat{n} + C\hat{1}) = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + C\hat{1}) \quad (C \in \mathbb{R}), \\ \text{met} \quad \{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} &= \hat{1} \quad \text{en} \quad \{\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\} = \{\hat{a}, \hat{a}\} = 0, \end{aligned} \quad (79)$$

dan waren ten gevolge van het Pauli-uitsluitingsprincipe slechts twee energie-eigenwaarden mogelijk geweest, namelijk $\hbar\omega C$ en $\hbar\omega(C+1)$ corresponderend met $n = 0$ respectievelijk $n = 1$. Wel zouden \hat{a}^\dagger en \hat{a} nog steeds de raising- en loweringoperatoren zijn geweest, omdat $[\hat{a}, \hat{n}] = \hat{a}$ geldig is in zowel het bosonische als het fermionische geval.

1.6.2 Gedwongen oscillatoren: coherente toestanden en quasi-deeltjes

Voeg nu een interactie toe aan de lineaire harmonische oscillator uit § 1.6.1, zodanig dat

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega\left(\hat{n} - \lambda\hat{a}^\dagger - \lambda^*\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{1}\right) = \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\hat{1}\right) - \hbar\omega(\text{Re}\lambda)(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) - \hbar\omega(\text{Im}\lambda)(i\hat{a}^\dagger - i\hat{a}) \\ &\stackrel{(72),(74)}{=} \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - \hat{x}\text{Re}\lambda\sqrt{2m\hbar\omega^3} - \hat{p}_x\text{Im}\lambda\sqrt{2\hbar\omega/m} \quad (\lambda \in \mathbb{C}). \end{aligned} \quad (80)$$

Systemen van dit type worden gedwongen lineaire harmonische oscillatoren genoemd. Zulke systemen komen veelvuldig in de natuur voor. Voor $\lambda = q\mathcal{E}/\sqrt{2m\hbar\omega^3}$ en $\mathcal{E} \in \mathbb{R}$ heeft de interactieterm bijvoorbeeld de vorm $\hat{V} = -q\hat{x}\mathcal{E}$, hetgeen we herkennen als de interactieterm behorende bij een geladen lineaire harmonische oscillator met lading q in het externe krachtveld veroorzaakt door een klassiek elektrisch veld \mathcal{E} langs de x -as. Wat onmiddellijk opvalt aan de toegevoegde interactieterm is dat het aantal oscillatorkwanta niet behouden is onder de interactie, immers

$$[\hat{n}, \hat{H}] = -\hbar\omega[\hat{n}, \lambda\hat{a}^\dagger + \lambda^*\hat{a}] \stackrel{(16)}{=} -\hbar\omega(\lambda\hat{a}^\dagger - \lambda^*\hat{a}) \neq 0.$$

Dit is een eerste voorbeeld van een systeem met een zogenaamde niet-additieve interactie, d.w.z. een interactie waarbij het totale aantal deeltjes niet behouden blijft.

Een nieuwe deeltjesinterpretatie: in de natuur bestaan legio systemen met niet-additieve interacties. De hele deeltjesfysica, kwantumoptica en kwantumelektronica staan er in feite bol van.

Als er sprake is van niet-additieve interacties, dan is het vaak opportuun om over te gaan op een nieuwe deeltjesinterpretatie, d.w.z. een alternatieve beschrijving van het interagerende kwantumsysteem in termen van niet-interagerende energiekwanta die quasi-deeltjes worden genoemd. In termen van deze nieuwe energiekwanta krijgt de Hamilton-operator een additieve 1-deeltjes vorm, zodat het aantal quasi-deeltjes wel behouden is en er een representatie bestaat waarin de Hamilton-operator te schrijven is in termen van quasi-deeltjes teloperatoren.

Denk bij zo'n quasi-deeltje aan een deeltje dat door een bepaald medium beweegt en daarbij andere deeltjes beïnvloedt en door andere deeltjes beïnvloed wordt, zodanig dat het collectieve geheel van deeltje plus omgevingsinvloeden zich nagenoeg als een vrije entiteit gedraagt. Een voorbeeld hiervan is een geleidingselektron dat door een metaal beweegt en tijdens deze beweging trillingen (fononen) veroorzaakt in het rooster van metaalionen, terwijl de roostertrillingen op hun beurt weer de bewegingen van de geleidingselektronen kunnen beïnvloeden. Hoe sterk de eigenschappen van de quasi-deeltjes zullen afwijken van de eigenschappen van de oorspronkelijke deeltjes hangt af van de aard en sterkte van de interactie met de omgeving.

In alle gevallen die we in deze collegereeks tegen gaan komen zal in de limiet van verdwijnende omgevingsinteracties de oorspronkelijke deeltjesbeschrijving worden teruggevonden. Als de oorspronkelijke deeltjes bosonen (fermionen) zijn, dan betekent dit dat hetzelfde moet gelden voor de quasi-deeltjes.

Bij de overgang van deeltjes naar quasi-deeltjes wordt dan de ene set bosonische (fermionische) creatie- en annihilatie-operatoren vervangen door de andere. Het zal geen verrassing zijn dat zo'n deeltjes–quasi-deeltjesovergang neerkomt op het uitvoeren van een unitaire transformatie in de Fock-ruimte, omdat operatoridentiteiten zoals de bosonische commutatierelaties (fermionische anticommutatierelaties) in dat geval vorm behouden.

Quasi-deeltjes en coherente toestanden (Roy J. Glauber, 1963): in het geval van de gedwongen lineaire harmonische oscillator kan worden overgegaan op nieuwe bosonische quasi-deeltjesoperatoren \hat{c} en \hat{c}^\dagger door middel van de transformatie

$$\hat{c} = \hat{a} - \lambda \hat{1} \quad , \quad \hat{c}^\dagger = \hat{a}^\dagger - \lambda^* \hat{1} \quad \Rightarrow \quad [\hat{c}, \hat{c}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1} . \quad (81)$$

Voor de bijbehorende quasi-deeltjes teloperator \hat{n} geldt nu

$$\hat{n} = \hat{c}^\dagger \hat{c} \stackrel{(81)}{=} \hat{n} - \lambda \hat{a}^\dagger - \lambda^* \hat{a} + |\lambda|^2 \hat{1} \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \hat{1} - |\lambda|^2 \hat{1} \right) , \quad (82)$$

zodat de energie-eigentoestanden te schrijven zijn in termen van quasi-deeltjestoestanden:

$$|\tilde{n}\rangle_\lambda \stackrel{(28)}{=} \frac{(\hat{c}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |\tilde{0}\rangle_\lambda \quad , \quad \hat{H} |\tilde{n}\rangle_\lambda = \hbar\omega \left(\tilde{n} + \frac{1}{2} - |\lambda|^2\right) |\tilde{n}\rangle_\lambda \quad (\tilde{n} = 0, 1, 2, \dots) . \quad (83)$$

De grondtoestand van de gedwongen lineaire harmonische oscillator wordt gegeven door de toestand met 0 quasi-deeltjes (quasi-deeltjesvacuüm) $|\tilde{0}\rangle_\lambda \equiv |\lambda\rangle$, hetgeen voldoet aan

$$\boxed{\hat{a}|\lambda\rangle \stackrel{(81)}{=} (\hat{c} + \lambda\hat{1})|\lambda\rangle \stackrel{\text{vacuüm}}{=} \lambda|\lambda\rangle} . \quad (84)$$

Het quasi-deeltjesvacuüm is dus een eigentoestand van de oorspronkelijke annihilatie-operator \hat{a} bij de eigenwaarde λ . Zo'n toestand wordt een coherente toestand genoemd. De aanduiding coherent slaat daarbij op het feit dat in deze toestand alle mogelijke veeldeeltjestoestanden zullen voorkomen met gerelateerde fasen, in tegenstelling tot incoherente situaties waarbij de fasen volledig random zijn (zie Hst. 2).

Bewijs: schrijf de toestand $|\lambda\rangle$ in termen van de oorspronkelijke veeldeeltjesbasis volgens

$$\begin{aligned} |\lambda\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle &\stackrel{(84)}{\implies} 0 = \sum_{n=0}^{\infty} C_n (\hat{a} - \lambda\hat{1}) |n\rangle \stackrel{(78)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} C_n (\sqrt{n} |n-1\rangle - \lambda |n\rangle) \\ &\stackrel{\text{basis}}{\implies} C_{n+1} = \frac{\lambda C_n}{\sqrt{n+1}} = \dots = \frac{\lambda^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} C_0 , \end{aligned}$$

waarbij in de term met $|n-1\rangle$ de sommatieparameter n met één is opgehoogd. Vervolgens normeren we de toestand $|\lambda\rangle$:

$$1 \equiv \langle\lambda|\lambda\rangle = |C_0|^2 \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \frac{(\lambda^*)^{n'}}{\sqrt{n'!}} \langle n'|n\rangle \stackrel{\text{orth. basis}}{=} |C_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} = |C_0|^2 \exp(|\lambda|^2) .$$

Door $C_0 = \exp(-|\lambda|^2/2)$ te kiezen vinden we dan

$$\boxed{|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-|\lambda|^2/2) \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle} , \quad (85)$$

hetgeen met behulp van vergelijking (28) is om te schrijven tot

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-|\lambda|^2/2) \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = \exp(-|\lambda|^2/2) \exp(\lambda\hat{a}^\dagger) |0\rangle . \quad (86)$$

Inderdaad komen alle veeldeeltjestoestanden in zo'n coherente toestand voor, met als verwachtingswaarde en kwantummechanische onzekerheid voor het bezettingsgetal

$$\bar{n} \equiv \langle\lambda|\hat{n}|\lambda\rangle = \langle\lambda|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\lambda\rangle \stackrel{(84)}{=} |\lambda|^2 \langle\lambda|\lambda\rangle = |\lambda|^2 ,$$

$$\Delta n \equiv \sqrt{\langle\lambda|\hat{n}^2|\lambda\rangle - \langle\lambda|\hat{n}|\lambda\rangle^2} = \sqrt{\langle\lambda|(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a})|\lambda\rangle - \bar{n}^2} \stackrel{(84)}{=} \sqrt{\bar{n}} , \quad (87)$$

waarbij is gebruikt dat $\hat{n}^2 = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} \stackrel{(75)}{=} \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}$. Des te groter de waarde van $|\lambda| = \sqrt{\bar{n}}$ dus is, des te meer oscillatiekwanta zitten er gemiddeld in de grondtoestand van het interagerende systeem met steeds kleinere relatieve spreiding $\Delta n/\bar{n} = 1/\sqrt{\bar{n}} = 1/|\lambda|$.

Relatie tussen deeltjesaantal en fase: als we de complexe eigenwaarde λ schrijven als $\lambda = |\lambda| \exp(i\phi_\lambda)$, dan heeft de bijbehorende coherente toestand de karakteristieke eigenschap dat de veeldeeltjes basistoestanden $|n\rangle$ voorkomen met fasen die onderling zijn gerelateerd volgens $\exp(in\phi_\lambda)$:

$$|\lambda\rangle \stackrel{(86)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-|\lambda|^2/2) \frac{(|\lambda| \hat{a}^\dagger)^n}{n!} \exp(in\phi_\lambda) |0\rangle = \exp(-|\lambda|^2/2) \exp(|\lambda| e^{i\phi_\lambda} \hat{a}^\dagger) |0\rangle .$$

$$\Rightarrow -i \frac{\partial}{\partial \phi_\lambda} |\lambda\rangle = \hat{a}^\dagger |\lambda| e^{i\phi_\lambda} |\lambda\rangle = \hat{a}^\dagger \lambda |\lambda\rangle \stackrel{(84)}{=} \hat{a}^\dagger \hat{a} |\lambda\rangle = \hat{n} |\lambda\rangle .$$

Omdat de coherente toestanden een complete set vormen (zie opmerking 1) bestaat er dus een relatie tussen deeltjesaantal en fase, die in de coherente-toestand representatie wordt gegeven door

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi_\lambda} = \hat{n} .$$

Dit lijkt sprekend op het verband dat er in de QM bestaat tussen geconjugeerde paren van coördinaten en impulsen, zoals de coördinaat x en bijbehorende impuls p_x waarvoor in de plaatsrepresentatie geldt dat $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$. Dienovereenkomstig verwachten we dat er een soort deeltjesaantal–fase onzekerheidsrelatie zou moeten gelden van de vorm

$$\Delta n \Delta \phi_\lambda \geq 1/2 , \quad (88)$$

alhoewel een unieke fase-operator feitelijk niet bestaat in de QM aangezien ϕ_λ slechts gedefinieerd is op het interval $[0, 2\pi)$. Een toestand met een vaste waarde voor n heeft dus een volledig onbepaalde fase. Vandaar dat we in § 1.2 de vrijheid hadden om de overall fase van de telbasistoestanden te kiezen. Voor een willekeurige coherente toestand is dat niet het geval, aangezien er dan in feite sprake is van een zekere mate van compromis tussen onzekerheid in bezettingsgetal en onzekerheid in fase (zie opmerking 2).

Pseudo-klassieke eigenschappen van de coherente toestand $|\lambda\rangle$: er geldt dat

$$\langle \lambda | (\hat{a}^\dagger)^k (\hat{a})^l | \lambda \rangle = (\lambda^*)^k (\lambda)^l = \langle \lambda | \hat{a}^\dagger | \lambda \rangle^k \langle \lambda | \hat{a} | \lambda \rangle^l ,$$

zodat de kwantummechanische commutatierelaties er voor normaalgeordende operatoren helemaal niet toe lijken te doen en de operatoren effectief vervangen lijken te kunnen worden door complexe parameters. Dit klassieke gedrag geldt echter niet voor operatoren die niet normaalgeordend zijn, zoals

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

De commutatierelaties leiden dus tot een relatieve $\mathcal{O}(1/|\lambda|^2) = \mathcal{O}(1/\bar{n})$ correctie op het klassieke gedrag. In de limiet van hoge bezettingsgetallen $|\lambda| \gg 1$ is deze correctie onderdrukt en wordt een klassieke situatie benaderd waarbij de relevante veeldeeltjesoperatoren

effectief door complexe getallen kunnen worden vervangen in de verwachtingswaarden. Tevens zal in opgave 6 van het werkcollege worden aangetoond dat er dan relatief gezien steeds minder overlap zal zijn tussen de verschillende coherente toestanden (zie ook opmerking 2), zodat ze kunnen worden gezien als pseudo-klassieke systeemtoestanden bestaande uit een nagenoeg scherp bepaald, zeer groot aantal oscillatorkwanta.

Unitaire transformatie: tenslotte zal in opgave 6 van het werkcollege worden aangetoond dat een coherente toestand zoals verwacht door middel van een unitaire transformatie uit de grondtoestand van een lineaire harmonische oscillator te verkrijgen is, namelijk

$$|\lambda\rangle = \exp(\lambda\hat{a}^\dagger - \lambda^*\hat{a})|0\rangle. \quad (89)$$

Coherente toestanden zijn met name belangrijk voor de beschrijving van elektromagnetische straling die door middel van gestimuleerde emissie coherent wordt opgebouwd. Denk hierbij aan masers/lasers of elektromagnetische velden die worden veroorzaakt door klassieke elektrische stromen (zie Hst. 4). Coherente toestanden treden verder ook op bij de beschrijving van systemen met macroscopisch bezette 1-deeltjes toestanden, zoals Bose–Einstein condensaten (zie Hst. 2) en klassieke elektromagnetische velden (zie Hst. 4).

Opmerking 1: overcomplete set (geen tentamenstof).

De verzameling van alle coherente toestanden

$$\{|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-|\lambda|^2/2) \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle : \lambda \in \mathbb{C}\} \quad (90)$$

vormt een overcomplete set. Als we de complexe eigenwaarde λ door middel van poolcoördinaten in het complexe vlak schrijven als $\lambda = |\lambda| \exp(i\phi_\lambda)$, dan kan namelijk de volgende gegeneraliseerde volledighedsrelatie voor coherente toestanden worden afgeleid:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d(\operatorname{Re} \lambda) \int_{-\infty}^{\infty} d(\operatorname{Im} \lambda) |\lambda\rangle\langle\lambda| &= \int_{-\infty}^{\infty} d(\operatorname{Re} \lambda) \int_{-\infty}^{\infty} d(\operatorname{Im} \lambda) \exp(-|\lambda|^2) \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{\lambda^n (\lambda^*)^{n'}}{\sqrt{n!n'!}} |n\rangle\langle n'| \\ &\stackrel{\text{poolcoörd.}}{=} \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{|n\rangle\langle n'|}{\sqrt{n!n'!}} \int_0^{\infty} d|\lambda| |\lambda|^{n+n'+1} \exp(-|\lambda|^2) \overbrace{\int_0^{2\pi} d\phi_\lambda \exp(i\phi_\lambda[n-n'])}^{2\pi\delta_{nn'}} \\ &\stackrel{z=|\lambda|^2}{=} \pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|n\rangle\langle n|}{n!} \int_0^{\infty} dz z^n \exp(-z) = \pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| \stackrel{\text{voll.}}{=} \pi \hat{1}, \end{aligned} \quad (91)$$

waarbij is gebruikt dat $\int_0^{\infty} dz z^n \exp(-z) = n!$ voor $n = 0, 1, \dots$. Een willekeurige veeldeeltjestoestand is dus eenvoudig in termen van coherente toestanden te ontbinden!

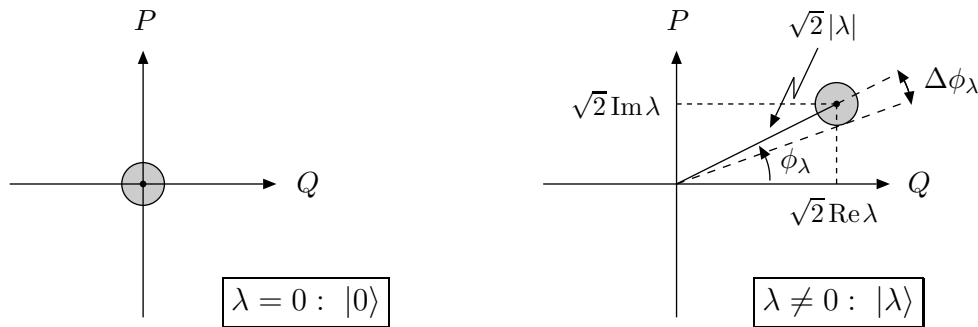
Opmerking 2: nog twee pseudo-klassieke eigenschappen (geen tentamenstof).

Een coherente toestand is tevens een voorbeeld van een kwantumtoestand met een minimale onzekerheid die in gelijke mate over de plaats- en impulsoperatoren is verdeeld. Met behulp van de voorgaande identiteit en vergelijking (74) kan namelijk worden afgeleid dat

$$(\Delta P)^2 = \langle \lambda | \hat{P}^2 | \lambda \rangle - \langle \lambda | \hat{P} | \lambda \rangle^2 = -\frac{1}{2} \langle \lambda | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 | \lambda \rangle + \frac{1}{2} \langle \lambda | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | \lambda \rangle^2 = \frac{1}{2},$$

$$(\Delta Q)^2 = \langle \lambda | \hat{Q}^2 | \lambda \rangle - \langle \lambda | \hat{Q} | \lambda \rangle^2 = +\frac{1}{2} \langle \lambda | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | \lambda \rangle - \frac{1}{2} \langle \lambda | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | \lambda \rangle^2 = \frac{1}{2},$$

zodat inderdaad $(\Delta x)(\Delta p_x) \stackrel{(72)}{=} \hbar(\Delta P)(\Delta Q) = \hbar/2$. De kwantummechanische verwachtingswaarden en spreiding in het (Q, P) -vlak zijn in het navolgende plaatje schematisch weergegeven. Uit de kwantummechanische spreiding (d.w.z. de grijsgetinte cirkels met straal $1/\sqrt{2}$) is af te lezen dat voor toenemende $|\lambda|$ zowel de relatieve spreiding in $|\lambda|$ als de absolute spreiding in de fase ϕ_λ kleiner worden. Dit laatste staat in schril contrast met het geval $\lambda = 0$ waarvoor de fase ϕ_λ volledig onbepaald is! Zoals in opgave 6 van het werkcollege zal worden aangetoond wordt voor $|\lambda| \gg 1$ een klassieke situatie benaderd met relatief gezien steeds minder overlap tussen de verschillende coherente toestanden. Tevens geldt in de vorm van $\sqrt{2}|\lambda| \Delta\phi_\lambda \geq 1/\sqrt{2} \stackrel{(87)}{\implies} \Delta n \Delta\phi_\lambda \geq 1/2$ inderdaad de geanticipeerde deeltjesaantal–fase onzekerheidsrelatie.



Tenslotte is een coherente toestand de kwantumtoestand die het klassieke gedrag van de lineaire harmonische oscillator zonder interactieterm het beste benadert. Op grond van vergelijking (65) wordt de annihilatie-operator \hat{a} van een lineaire harmonische oscillatorsysteem in het Heisenbergbeeld gegeven door

$$\hat{a}_H(t) = \hat{a} \exp(-i\omega t) \quad \Rightarrow \quad \hat{a}_H(t) | \lambda \rangle = \lambda \exp(-i\omega t) | \lambda \rangle = |\lambda| \exp(i[\phi_\lambda - \omega t]) | \lambda \rangle,$$

zodat

$$\langle \lambda | \hat{Q}_H(t) | \lambda \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Re}(\lambda \exp(-i\omega t)) \quad \text{en} \quad \langle \lambda | \hat{P}_H(t) | \lambda \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Im}(\lambda \exp(-i\omega t))$$

inderdaad het tijdsafhankelijke gedrag hebben van een harmonische oscillatiebeweging met een minimum aan kwantummechanische onzekerheid.

1.6.3 Superfluiditeit

Als tweede toepassing van de quasi-deeltjes methode bekijken we het kwantummechanische lage-temperatuurverschijnsel van superfluiditeit. Aan de hand van een expliciet voorbeeld zullen we tevens zien hoe het laag-energetische elementaire excitatiespectrum van een bosonisch veeldeeltjessysteem verandert als er van een niet-interagerende situatie wordt overgegaan naar een situatie waarbij de deeltjes een zwakke repulsieve onderlinge interactie voelen.

We spreken van een superfluïde stroming binnen een medium als er geen energie door wrijving uit het medium kan lekken. Met behulp van een elegant argument kan worden bepaald wanneer zo'n superfluïde stroming mogelijk is. Beschouw hiertoe een vloeistof die met uniforme snelheid \vec{u} langs een macroscopisch object stroomt. Ga vervolgens over op een beschrijvingskader waarbij de vloeistof stilstaat (bij het absolute nulpunt van temperatuur) en het object met snelheid $-\vec{u}$ beweegt. Wrijving (viscositeit) treedt dan op als het object een deel van de kinetische impuls en energie kan omzetten in excitaties in de vloeistof. Bekijk nu één zo'n excitatie met impuls \vec{p} en energie $\epsilon(\vec{p})$. De behouden totale impuls en energie van het volledige systeem bestaande uit de vloeistof én het macroscopische object met massa M worden gegeven door

$$\vec{P} = -M\vec{u} = \vec{p} + M\vec{u}' \quad \text{en} \quad E = \frac{1}{2}M\vec{u}^2 = \epsilon(\vec{p}) + \frac{1}{2}M\vec{u}'^2 ,$$

waarbij \vec{u}' de nieuwe snelheid van het object is na het exciteren van de vloeistof. Door beide vergelijkingen in elkaar te schuiven vinden we

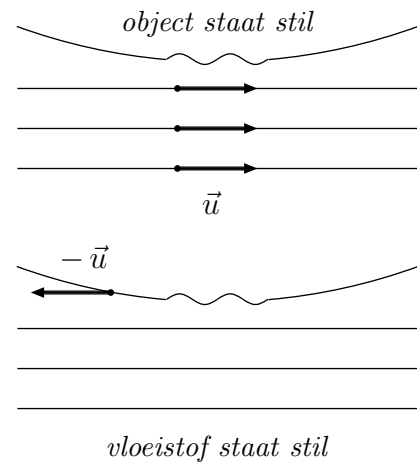
$$\epsilon(\vec{p}) + \vec{p} \cdot \vec{u} = -\frac{\vec{p}^2}{2M} .$$

Dit houdt in dat de excitatie energetisch niet mogelijk is als de stromingssnelheid van de vloeistof voldoet aan de conditie

$$u \equiv |\vec{u}| < \frac{\epsilon(\vec{p})}{|\vec{p}|} .$$

Als het spectrum $\epsilon(\vec{p})$ van de excitaties nu de eigenschap heeft dat er een minimum (kritische snelheid)

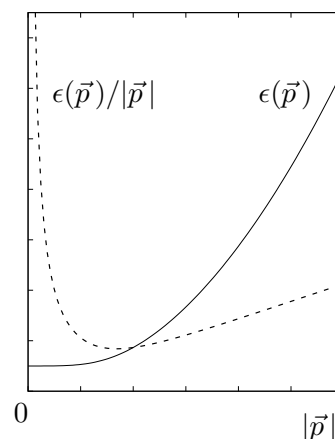
$$\boxed{u_c = \left(\frac{\epsilon(\vec{p})}{|\vec{p}|} \right)_{\min} > 0} \quad (92)$$



te vinden is, dan kan er bij voldoende lage temperaturen superfluïde stroming optreden voor snelheden $u < u_c$. Dit is het zogenaamde Landau-criterium voor superfluiditeit.

Er kunnen nu een aantal speciale vormen van het excitatiespectrum worden onderscheiden.

- $\epsilon(\vec{p}) = \vec{p}^2/(2m)$: dit komt overeen met het energiespectrum behorende bij vrije niet-relativistische deeltjes. Voorbeeld: een gas bestaande uit niet-interagerende massieve deeltjes. Dan heeft $\epsilon(\vec{p})/|\vec{p}| = |\vec{p}|/(2m)$ geen positief minimum en is er dus geen superfluïde stroming mogelijk.
- $\epsilon(\vec{p}) = c_s |\vec{p}|$: dit komt overeen met het energiespectrum behorende bij vrije massa-loze kwanta. Voorbeeld: gekwantiseerde golfenomenen, zoals geluidsgolven in een vloeistof of kristal (zie opgave 5 van het werkcollege). Dan is $\epsilon(\vec{p})/|\vec{p}|$ gelijk aan de voortplantingssnelheid c_s van de golven in het beschouwde medium. In dat geval kan er dus weldegelijk superfluïde stroming optreden voor snelheden $u < c_s$. Dit voorbeeld zal in onderstaande berekening worden uitgewerkt.
- Het excitatiespectrum heeft een eindig energiegat $\Delta = \lim_{|\vec{p}| \rightarrow 0} \epsilon(\vec{p})$ tussen de grondtoestand en de eerste aangeslagen toestand. Voorbeeld: het energiegat dat optreedt in het energiespectrum van supergeleiders ten gevolge van de attractieve interactie tussen speciale paren (Cooper-paren) van elektronen (zie Hst. 2). Ook in dat geval heeft $\epsilon(\vec{p})/|\vec{p}|$ overduidelijk een minimum (zie plaatje) en kan er superfluïde stroming optreden als de snelheid laag genoeg is.



1.6.4 Superfluiditeit voor zwak-repulsieve spin-0 bosonen (deel 1)

Als voorbeeld beschouwen we het laag-energetisch excitatiespectrum voor zwak-repulsieve bosonen.² Bekijk hiertoe een systeem bestaande uit een zeer groot, constant aantal N identieke spin-0 deeltjes met massa m . De deeltjes zitten opgesloten in een grote kubus met ribben L en periodieke randvoorwaarden, zodat er sprake is van een discreet impulspectrum

$$\{\vec{p} = \hbar\vec{k} : k_{x,y,z} = 0, \pm 2\pi/L, \pm 4\pi/L, \dots\}. \quad (93)$$

Verder wordt aangenomen dat de temperatuur zodanig laag is dat het systeem praktisch gezien in de grondtoestand zit, zodat we effectief kunnen spreken van een systeem bij temperatuur $T = 0$.

²De relevante details met betrekking tot de temperatuurafhankelijkheid en de kwantisatiecondities voor een afgesloten ruimte zijn in hoofdstuk 2 te vinden.

Zonder onderlinge interacties tussen de deeltjes: de totale kinetische-energie operator van het niet-interagerende identieke veeldeeltjessysteem kan in diagonaalvorm worden geschreven in de impulsrepresentatie:

$$\hat{T}_{\text{tot}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} (\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}), \quad (94)$$

met kinetische energie-eigenwaarden

$$E^{(0)} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k}}^{(0)}. \quad (95)$$

Voor later gebruik is in de tweede uitdrukking voor \hat{T}_{tot} de symmetrie benut van de impulsommatie onder inversie van de impulsen. Met behulp van de totale-impulsoperator

$$\hat{P}_{\text{tot}} = \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \hbar \vec{k} (\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} - \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}), \quad (96)$$

kan nu de (triviale) deeltjesinterpretatie behorende bij de gebruikte creatie- en annihilatie-operatoren rechtstreeks worden afgelezen. Deeltjes met energie $\hbar^2 \vec{k}^2 / (2m)$ en impuls $\hbar \vec{k}$ worden gecreëerd door $\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger$, geannihileerd door $\hat{a}_{\vec{k}}$ en geteld door $\hat{n}_{\vec{k}} = \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}$. Het bezettingsgetal $n_{\vec{k}}^{(0)}$ geeft aan hoeveel deeltjes er in afwezigheid van onderlinge interacties in de aangegeven impulseigentoestand zitten. Voor de grondtoestand van het niet-interagerende N -deeltjessysteem geldt dus dat $n_{\vec{0}}^{(0)} = N$ en $n_{\vec{k} \neq \vec{0}}^{(0)} = 0$.

Inclusief een zwakke repulsieve interactie tussen de deeltjes: in analogie met opgave 4 van het werkcollege is in dat geval af te leiden dat het meenemen van een zwakke paarinteractie die alleen afhangt van de afstand tussen de deeltjes aanleiding geeft tot een additieve veeldeeltjesinteractieterm van de vorm

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \mathcal{U}(q) \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'+\vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}, \quad (97)$$

waarbij

$$\mathcal{U}(q) = \frac{1}{V} \int_V d\vec{r} \mathcal{U}(r) \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (98)$$

de Fourier-getransformeerde is van de ruimtelijke paarinteractie per eenheid van volume en $q \equiv |\vec{q}|$. Zoals in opgave 4 van het werkcollege is bediscussieerd, blijft de paarimpuls van de interagerende deeltjes behouden onder de interactie (t.g.v. translatiesymmetrie) en hangt $\mathcal{U}(q)$ alleen af van de absolute waarde van \vec{q} (t.g.v. rotatiesymmetrie).

Wat verwachten we voor de energie-eigentoestanden in het interagerende geval?

- Ten eerste zal de toestand $|n_{\vec{0}} = N, n_{\vec{k} \neq \vec{0}} = 0\rangle$ niet meer de grondtoestand van het interagerende veeldeeltjessysteem zijn. Als we namelijk \hat{V} hierop loslaten vinden we

$$\begin{aligned} \hat{V}|n_{\vec{0}} = N, n_{\vec{k} \neq \vec{0}} = 0\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \mathcal{U}(q) \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{0}} \hat{a}_{\vec{0}} |n_{\vec{0}} = N, n_{\vec{k} \neq \vec{0}} = 0\rangle \\ &= \frac{1}{2} N(N-1) \mathcal{U}(0) |n_{\vec{0}} = N, n_{\vec{k} \neq \vec{0}} = 0\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \sqrt{N(N-1)} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \mathcal{U}(q) |n_{\vec{0}} = N-2, n_{\vec{q}} = n_{-\vec{q}} = 1, \text{ andere } n_{\vec{k}} = 0\rangle, \end{aligned}$$

zodat het te verwachten is dat de correcte grondtoestand expliciete (kleine) bijdragen zal bevatten van paren van deeltjes die met tegengestelde impuls in een aangeslagen 1-deeltjestoestand zitten. De totale impuls blijft daarbij onveranderd $\vec{P}_{\text{tot}} = \vec{0}$.

- In het niet-interagerende geval bestaan de laagst-energetische N -deeltjes excitaties uit situaties waarbij hooguit een paar deeltjes in aangeslagen 1-deeltjestoestanden zitten met $\mathcal{O}(\hbar/L)$ impulsen. Omdat alle deeltjes dan $\mathcal{O}(L)$ de Broglie-golflengten hebben, verwachten we dat de kwantummechanische invloedssfeer van de deeltjes zich over het hele systeem uitstrekt. In aanwezigheid van repulsie zal bij een excitatie dus meer gebeuren dan het in beweging brengen van een enkel deeltje en zal daarvoor waarschijnlijk meer energie nodig zijn dan in het niet-interagerende geval.

Benaderingen voor zwak-repulsieve verdunde Bose-gassen (Bogolyubov, 1947): als de paarinteractie maar zwak genoeg is en repulsief, dan verwachten we dat voor de laagst-energetische N -deeltjestoestanden nog steeds zo goed als alle deeltjes in de 1-deeltjes grondtoestand zitten, d.w.z. $N - \langle \hat{n}_{\vec{0}} \rangle \ll N$. Dit geeft aanleiding tot twee benaderingsstappen voor de veeldeeltjesinteractieterm die mogen worden gebruikt zolang het gas maar genoeg verdund is, zodat niet teveel deeltjes in aangeslagen 1-deeltjestoestanden terecht kunnen komen.

Benaderingsstap 1: voor de laagst-energetische N -deeltjestoestanden mogen bijdragen ten gevolge van interacties tussen deeltjes in aangeslagen 1-deeltjestoestanden worden verwaarloosd en hoeven bij benadering alleen termen te worden meegenomen met twee of meer creatie- en annihilatie-operatoren die betrekking hebben op de 1-deeltjes grondtoestand:

$$\begin{aligned} \hat{V} \approx & \frac{1}{2} \mathcal{U}(0) \overbrace{\hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{\vec{0}} \hat{a}_{\vec{0}}}^{\hat{n}_{\vec{0}}^2 - \hat{n}_{\vec{0}}} + \mathcal{U}(0) \overbrace{\hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{\vec{0}}}^{\hat{n}_{\vec{0}}} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \overbrace{\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}}^{\hat{n}_{\vec{k}}} + \frac{1}{2} \overbrace{\hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{\vec{0}}}^{\hat{n}_{\vec{0}}} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \mathcal{U}(q) \left(\hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \mathcal{U}(q) \left(\hat{a}_{\vec{0}} \hat{a}_{\vec{0}} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} \hat{a}_{-\vec{q}} \right). \end{aligned}$$

- De eerste term komt hier overeen met de configuratie $\vec{k} = \vec{k}' = \vec{q} = \vec{0}$, waarbij alle creatie- en annihilatie-operatoren betrekking hebben op de 1-deeltjes grondtoestand.
- De overige termen komen overeen met situaties waarbij slechts twee van de drie impulsen verdwijnen. De tweede term bestaat uit de configuraties $\vec{k} = \vec{q} = \vec{0}$ en $\vec{k}' = \vec{q} = \vec{0}$, de derde term uit $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q} = \vec{0}$ en $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{q} = \vec{0}$, en de laatste term uit $\vec{k} - \vec{q} = \vec{k}' + \vec{q} = \vec{0}$ en $\vec{k} = \vec{k}' = \vec{0}$.

Vervolgens kunnen we de teloperator $\hat{n}_{\vec{0}}$ overal vervangen door $\hat{N} - \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \hat{n}_{\vec{q}}$ en gebruiken dat het deeltjesaantal N vastligt en zeer groot is:

$$\hat{V} \approx \frac{N(N-1)}{2} \mathcal{U}(0) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \mathcal{U}(q) \left(N \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} + N \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} + \hat{a}_{\vec{0}} \hat{a}_{\vec{0}} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}} \right).$$

Benaderingsstap 2, traditionele aanpak: in de aanpak van Bogolyubov wordt tenslotte gebruikt dat voor de laagst-energetische N -deeltjestoestanden de operatoren $\hat{a}_{\vec{0}} \hat{a}_{\vec{0}}$ en $\hat{a}_{\vec{0}}^\dagger \hat{a}_{\vec{0}}^\dagger$ in goede benadering mogen worden vervangen door de getalswaarde N . Hierbij zouden in principe extra fasefactoren $e^{2i\phi_0}$ en $e^{-2i\phi_0}$ kunnen optreden, maar die zijn in de resterende creatie- en annihilatie-operatoren te absorberen. Deze aanpak suggereert dat we te maken hebben met een nagenoeg klassieke situatie waarbij het feit dat de operatoren $\hat{a}_{\vec{0}}$ en $\hat{a}_{\vec{0}}^\dagger$ niet commuteren een verwaarloosbaar effect heeft voor de beschouwde N -deeltjestoestanden (*als ware het coherente toestanden met $|\lambda| \gg 1$*). Deze aanname is zeer voor de hand liggend als we bedenken dat $\sqrt{N-n} \approx \sqrt{N}$ als $N \gg n$, zodat de werking van $\hat{a}_{\vec{0}}$ en $\hat{a}_{\vec{0}}^\dagger$ in absolute waarde effectief hetzelfde is voor toestanden met $N - \langle \hat{n}_{\vec{0}} \rangle \ll N$. Hiermee wordt de volgende effectieve benadering gevonden voor de totale Hamilton-operator $\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{T}_{\text{tot}} + \hat{V}$ behorende bij de laagst-energetische veeldeeltjestoestanden:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{tot}} \approx & \frac{N(N-1)}{2} \mathcal{U}(0) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + N \mathcal{U}(q) \right) \left(\hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} N \mathcal{U}(q) \left(\hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger + \hat{a}_{-\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}} \right). \end{aligned} \quad (99)$$

Door toedoen van de tweede benaderingsstap blijft het totale aantal deeltjes nu niet meer behouden onder de interactie. De achterliggende rechtvaardiging voor zo'n aanpak is puur thermodynamisch van aard (zie Hst. 2): “de fysische eigenschappen van een systeem met zeer veel deeltjes veranderen niet onder toevoeging/verwijdering van een deeltje”. Omdat benaderingen onvermijdelijk zijn voor de beschrijving van complexe veeldeeltjessystemen, kom je met name in de vaste-stoffysica en lage-temperatuurphysica veelvuldig van dit soort niet-additieve benaderde grootheden tegen. Wel zien we dat de totale impuls van het veeldeeltjessysteem nog steeds behouden is onder de interactie omdat in elke term van \hat{H} evenveel impuls gecreëerd als geannihileerd wordt.

Benaderingsstap 2, maar nu zonder verlies van deeltjesbehoud (met dank aan Leon Groenewegen): om te voorkomen dat bij de tweede benaderingsstap deeltjesbehoud geschonden wordt kunnen we gebruik maken van het feit dat volgens benaderingsstap 1 geldt dat $N \approx \hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger$. Hiermee kan de totale Hamilton-operator $\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{T}_{\text{tot}} + \hat{V}$ uit benaderingsstap 1 zonder precisieverlies worden omgeschreven tot

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\text{tot}} &\approx \frac{N(N-1)}{2} \mathcal{U}(0) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2mN} + \mathcal{U}(q) \right) \left(\hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} + \hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \mathcal{U}(q) \left(\hat{a}_0 \hat{a}_0 \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}} \right) \\
&\equiv \frac{N(N-1)}{2} \mathcal{U}(0) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + N\mathcal{U}(q) \right) \left(\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger \hat{b}_{\vec{q}} + \hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{q}} \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} N\mathcal{U}(q) \left(\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger + \hat{b}_{-\vec{q}} \hat{b}_{\vec{q}} \right), \tag{100}
\end{aligned}$$

waarbij de operatoren

$$\hat{b}_{\vec{q} \neq \vec{0}}^\dagger = \frac{\hat{a}_0 \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger}{\sqrt{N}} = \frac{\hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_0}{\sqrt{N}} \quad \text{en} \quad \hat{b}_{\vec{q} \neq \vec{0}} = \frac{\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}}{\sqrt{N}} = \frac{\hat{a}_{\vec{q}} \hat{a}_0^\dagger}{\sqrt{N}} \tag{101}$$

een inzichtelijke fysische interpretatie hebben. Met behulp van $\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger$ wordt namelijk een deeltje vanuit de 1-deeltjes grondtoestand aangeslagen naar de 1-deeltjestoestand met impuls $\hbar\vec{q} \neq \vec{0}$, terwijl $\hat{b}_{\vec{q}}$ zo'n aangeslagen deeltje doet terugvallen naar de 1-deeltjes grondtoestand. Hierbij verandert het totale aantal deeltjes dus niet! De totale Hamilton-operator heeft echter exact dezelfde vorm als in vergelijking (99), zodat het niet-additieve karakter van \hat{H}_{tot} simpelweg volgt uit het feit dat de interactie zowel deeltjesparen vanuit de 1-deeltjes grondtoestand kan aanslaan als naar de 1-deeltjes grondtoestand kan doen terugvallen. In verband met de macroscopisch bezette 1-deeltjes grondtoestand gedragen de operatoren $\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger$ en $\hat{b}_{\vec{q}}$ zich tevens bij benadering als gewone creatie- en annihilatie-operatoren:

$$[\hat{b}_{\vec{q}}, \hat{b}_{\vec{q}'}] = 0 \quad \text{en} \quad [\hat{b}_{\vec{q}}, \hat{b}_{\vec{q}'}^\dagger] = \frac{1}{N} [\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}, \hat{a}_{\vec{q}'}^\dagger \hat{a}_0] = [\hat{a}_{\vec{q}}, \hat{a}_{\vec{q}'}^\dagger] \frac{\hat{n}_0}{N} - \frac{\hat{a}_{\vec{q}'}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}}{N} \approx [\hat{a}_{\vec{q}}, \hat{a}_{\vec{q}'}^\dagger].$$

Meer details hierover staan in de bachelorscriptie van Leon Groenewegen.

Net als in § 1.6.2 is het ook hier opportuun om over te gaan op een quasi-deeltjes beschrijving die ervoor zorgt dat het benaderde systeem zich als een niet-interactief quasi-deeltjessysteem gedraagt, met een bijbehorende totale Hamilton-operator die additief is en in diagonaalvorm is gebracht.

In deze quasi-deeltjes beschrijving verwachten we dat de operatoren $\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger$ en $\hat{b}_{-\vec{q}}$ alsmede $\hat{b}_{\vec{q}}$ en $\hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger$ gecombineerd moeten worden, aangezien

- beide operatoren binnen zo'n set dezelfde impulsverandering beschrijven en dus de totale impuls van het veeldeeltjessysteem op dezelfde manier beïnvloeden;
- de quasi-deeltjes teloperatoren dan de juiste termen van de vorm $\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger \hat{b}_{\vec{q}}$, $\hat{b}_{-\vec{q}} \hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger$, $\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger$ en $\hat{b}_{-\vec{q}} \hat{b}_{\vec{q}}$ zullen genereren.

Het probleem van het vinden van de juiste quasi-deeltjes beschrijving gaan we in het nu volgende intermezzo aanpakken.

1.6.5 Intermezzo: de Bogolyubov-transformatie voor bosonen

Beschouw een veeldeeltjessysteem bestaande uit identieke bosonen die in twee verschillende volledig gespecificeerde 1-deeltjes kwantumtoestanden $|q_1\rangle$ en $|q_2\rangle$ kunnen zitten. Denk hierbij aan de impulstoestanden $|\vec{q}\rangle$ en $|-\vec{q}\rangle$ in § 1.6.4. De bijbehorende creatie- en annihilatie-operatoren worden gegeven door $\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2^\dagger$ en \hat{a}_1, \hat{a}_2 . De Fock-ruimte voor deze deeltjes wordt opgespannen door de basistoestanden $|n_1, n_2\rangle$ zoals gegeven in vergelijking (28), waarbij $n_{1,2}$ het aantal identieke deeltjes telt in elk van de twee 1-deeltjes kwantumtoestanden. Bekijk vervolgens een niet-additieve Hamilton-operator van de vorm

$$\hat{H} = E(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) + \Delta(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2 \hat{a}_1) \quad (E > 0 \text{ en } \Delta \in \mathbb{R}) . \quad (102)$$

Zo'n operator behoud het totale aantal deeltjes van het systeem duidelijk niet, aangezien het bezettingsgetal van elk van de twee kwantumtoestanden met één opgehoogd of verlaagd wordt in de Δ -termen. Het is echter op een constante term na in een additieve vorm te gieten door middel van een zogenaamde Bogolyubov-transformatie.³ Zo'n transformatie heeft het volgende algemene uiterlijk:

$$\hat{c}_1 \equiv u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger \quad , \quad \hat{c}_2 \equiv u_2 \hat{a}_2 + v_2 \hat{a}_1^\dagger \quad (u_{1,2} \text{ en } v_{1,2} \in \mathbb{R}) . \quad (103)$$

De reële constanten u_1, u_2, v_1 en v_2 worden zodanig gekozen dat de operatoren $\hat{c}_{1,2}^\dagger$ en $\hat{c}_{1,2}$ voldoen aan dezelfde bosonische commutatoralgebra als $\hat{a}_{1,2}^\dagger$ en $\hat{a}_{1,2}$. Op die manier is er een nieuwe deeltjesinterpretatie mogelijk waarbij $\hat{c}_{1,2}^\dagger$ en $\hat{c}_{1,2}$ de creatie en annihilatie van quasi-deeltjes beschrijven. Willen zowel $\hat{a}_{1,2}^\dagger, \hat{a}_{1,2}$ als $\hat{c}_{1,2}^\dagger, \hat{c}_{1,2}$ aan bosonische commutatorrelaties voldoen, dan gelden de volgende condities:

| | |
|---|-------|
| $u_1 v_2 - v_1 u_2 = 0 \quad \text{en} \quad u_1^2 - v_1^2 = u_2^2 - v_2^2 = 1$ | (104) |
| $\Rightarrow \quad u_1 = +u_2 \quad , \quad v_1 = +v_2 \quad \text{en} \quad u_1^2 - v_1^2 = 1$ | |
| $\text{of} \quad u_1 = -u_2 \quad , \quad v_1 = -v_2 \quad \text{en} \quad u_1^2 - v_1^2 = 1 .$ | |

³Als de toestanden $|q_1\rangle$ en $|q_2\rangle$ een tegengesteld kwantumgetal hebben, zoals de impuls in de toestanden $|\vec{q}\rangle$ en $|-\vec{q}\rangle$ in § 1.6.4, dan behouden zowel \hat{H} als de Bogolyubov-transformatie dit kwantumgetal.

Bewijs: de commutatierelaties $[\hat{c}_1, \hat{c}_1] = [\hat{c}_2, \hat{c}_2] = [\hat{c}_1, \hat{c}_2^\dagger] = 0$ volgen rechtstreeks uit de bosonische commutatierelaties voor $\hat{a}_{1,2}^\dagger$ en $\hat{a}_{1,2}$. Uit de eis dat de overige commutatoren

$$\begin{aligned} [\hat{c}_1, \hat{c}_2] &\stackrel{(103)}{=} [u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger, u_2 \hat{a}_2 + v_2 \hat{a}_1^\dagger] \stackrel{(26)}{=} (u_1 v_2 - v_1 u_2) \hat{1} , \\ [\hat{c}_1, \hat{c}_1^\dagger] &\stackrel{(103)}{=} [u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger, u_1 \hat{a}_1^\dagger + v_1 \hat{a}_2] \stackrel{(26)}{=} (u_1^2 - v_1^2) \hat{1} , \\ [\hat{c}_2, \hat{c}_2^\dagger] &\stackrel{(103)}{=} [u_2 \hat{a}_2 + v_2 \hat{a}_1^\dagger, u_2 \hat{a}_2^\dagger + v_2 \hat{a}_1] \stackrel{(26)}{=} (u_2^2 - v_2^2) \hat{1} , \end{aligned}$$

aan de gebruikelijke bosonische commutatierelaties moeten voldoen, volgen tenslotte de aangegeven condities voor $u_{1,2}$ en $v_{1,2}$.

In bovenstaande transformatie wordt voor het vrij te kiezen teken meestal het plusteken genomen. Deze specifieke keuze geeft dan aanleiding tot de volgende generieke vorm voor de bosonische Bogolyubov-transformatie:

$$\boxed{\hat{c}_1 \equiv u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger \quad , \quad \hat{c}_2 \equiv u_1 \hat{a}_2 + v_1 \hat{a}_1^\dagger} \quad (105)$$

met inverse

$$\boxed{\hat{a}_1 = u_1 \hat{c}_1 - v_1 \hat{c}_2^\dagger \quad , \quad \hat{a}_2 = u_1 \hat{c}_2 - v_1 \hat{c}_1^\dagger} . \quad (106)$$

In de literatuur wordt er verder meestal voor gekozen om u_1 en v_1 te parametriseren in termen van de reële parameter η volgens $u_1 = \cosh \eta$ en $v_1 = \sinh \eta$ om op die manier automatisch aan de conditie $u_1^2 - v_1^2 = 1$ te voldoen.

Het additief maken van de niet-additieve Hamilton-operator in vergelijking (102).

Om deze operator door middel van een Bogolyubov-transformatie in een additieve vorm te krijgen bekijken we twee combinaties van quasi-deeltjes teloperatoren. Ten eerste geldt

$$\begin{aligned} \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 - \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 &\stackrel{(105)}{=} (u_1 \hat{a}_1^\dagger + v_1 \hat{a}_2)(u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger) - (u_1 \hat{a}_2^\dagger + v_1 \hat{a}_1)(u_1 \hat{a}_2 + v_1 \hat{a}_1^\dagger) \\ &\stackrel{(26)}{=} u_1^2 (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) - v_1^2 (\hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger - \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger) \\ &\stackrel{(26)}{=} (u_1^2 - v_1^2) (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) \stackrel{(104)}{=} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 . \end{aligned} \quad (107)$$

Deze relatie zegt dat onder de overgang van deeltjes naar quasi-deeltjes bepaalde kwantumgetallen behouden kunnen worden gehouden, vooropgesteld dat die kwantumgetallen een tegengestelde waarde hebben in de toestanden $|q_1\rangle$ en $|q_2\rangle$ (zie de voetnoot op p. 38). Deze eigenschap zullen we in § 1.6.6 gaan gebruiken om de impulskwantumgetallen en daarmee ook de totale impuls te behouden onder de transformatie, zoals we in feite al in § 1.6.4 hadden geanticiperd. Op analoge wijze is af te leiden dat

$$\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 + \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 + \hat{1} = (u_1^2 + v_1^2) (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + \hat{1}) + 2u_1 v_1 (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2 \hat{a}_1) . \quad (108)$$

Voor $|\Delta| < E$ kan de niet-additieve Hamilton-operator \hat{H} in vergelijking (102) dan worden omgeschreven tot

$$\begin{aligned}\hat{H} &= E(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + \hat{1}) + \Delta(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2 \hat{a}_1) - E \hat{1} \\ &= \sqrt{E^2 - \Delta^2} (\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 + \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 + \hat{1}) - E \hat{1} .\end{aligned}\quad (109)$$

Bewijs: op basis van vergelijking (108) zijn we op zoek naar een factor C zodanig dat $C(u_1^2 + v_1^2) = E$ en $2Cu_1v_1 = \Delta$. Hieruit volgt dat E en C hetzelfde teken moeten hebben en dat

$$E^2 - \Delta^2 = C^2(u_1^2 - v_1^2)^2 \stackrel{(104)}{=} C^2 \stackrel{E, C > 0}{\implies} |\Delta| < E \quad \text{en} \quad C = \sqrt{E^2 - \Delta^2} .$$

Zoals aan het begin van dit intermezzo werd beloofd hebben we de Hamilton-operator nu in een vorm gekregen die uitsluitend bestaat uit de eenheidsoperator en teloperatoren voor de quasi-deeltjes. In opgave 8 van het werkcollege zal tenslotte worden aangetoond dat de bijbehorende grondtoestand, d.w.z. de toestand zonder quasi-deeltjes excitaties, opgebouwd is uit coherent gecreëerde deeltjesparen. In § 1.7.2 zal aan de hand van een soortgelijke procedure de fermionische versie van dit alles worden afgeleid.

1.6.6 Superfluiditeit voor zwak-repulsieve spin-0 bosonen (deel 2)

De benadering (100) voor de totale Hamilton-operator aan het eind van § 1.6.4 is nou precies van de vorm beschreven in het voorgaande intermezzo. Met behulp van een geschikte set Bogolyubov-transformaties kan de Hamilton-operator dan ook worden omgeschreven tot

$$\begin{aligned}\hat{H} &\approx \frac{N(N-1)}{2} \mathcal{U}(0) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + N\mathcal{U}(q) - \epsilon_{\vec{q}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \epsilon_{\vec{q}} (\hat{c}_{\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{q}} + \hat{c}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{-\vec{q}}) \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \mathcal{U}(0) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + N\mathcal{U}(q) - \epsilon_{\vec{q}} \right) + \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \epsilon_{\vec{q}} \hat{c}_{\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{q}} ,\end{aligned}\quad (110)$$

met bijbehorend quasi-deeltjes excitatiespectrum

$$\boxed{\epsilon_{\vec{q}} = \epsilon_{-\vec{q}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \sqrt{1 + \frac{4mN\mathcal{U}(q)}{\hbar^2 q^2}} .}\quad (111)$$

Voor elk paar impulsen \vec{q} en $-\vec{q}$ met $\vec{q} \neq \vec{0}$ dient daartoe een bosonische Bogolyubov-transformatie te worden gebruikt van het type

$$\hat{c}_{\vec{q}} \equiv u_{\vec{q}} \hat{b}_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} \hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger \quad , \quad \hat{c}_{-\vec{q}} \equiv u_{\vec{q}} \hat{b}_{-\vec{q}} + v_{\vec{q}} \hat{b}_{\vec{q}}^\dagger$$

gebaseerd op de volgende energieparameters in vergelijkingen (102) en (109):

$$E \rightarrow \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + N\mathcal{U}(q) \right) \quad , \quad \Delta \rightarrow \frac{1}{2} N\mathcal{U}(q) .$$

Voor de totale-impulsoperator geldt op grond van benaderingsstap 2 op pagina 37 dat

$$\begin{aligned} \hat{\vec{P}}_{\text{tot}} &\stackrel{(96)}{=} \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \hbar \vec{q} (\hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} - \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}) \approx \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \hbar \vec{q} \frac{\hat{a}_{\vec{0}} \hat{a}_{\vec{0}}^\dagger}{N} (\hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} - \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}) \quad (112) \\ &\stackrel{(101)}{=} \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \hbar \vec{q} (\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger \hat{b}_{\vec{q}} - \hat{b}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{q}}) \stackrel{(107)}{=} \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \hbar \vec{q} (\hat{c}_{\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{q}} - \hat{c}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{-\vec{q}}) = \sum_{\vec{q} \neq \vec{0}} \hbar \vec{q} \hat{c}_{\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{q}} , \end{aligned}$$

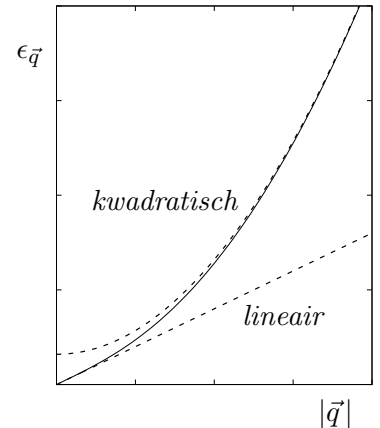
zodat we de nieuwe deeltjesinterpretatie kunnen aflezen. Quasi-deeltjes met energie $\epsilon_{\vec{q}}$ en impuls $\hbar \vec{q}$ worden gecreëerd door $\hat{c}_{\vec{q}}^\dagger$, geannihileerd door $\hat{c}_{\vec{q}}$ en geteld door $\hat{c}_{\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{q}}$. De grondtoestand van het nieuwe veeldeeltjessysteem bevat nog steeds geen kwanta met impuls $\hbar \vec{q} \neq \vec{0}$. Echter, zowel de samenstelling van deze grondtoestand in termen van de oorspronkelijke deeltjes als de vorm (dispersierelatie) van het elementaire excitatiespectrum hebben een verandering ondergaan onder invloed van de interactie.

1) Benadering van het excitatiespectrum voor zwak-repulsieve spin-0 bosonen:

- Voor hoge excitatie-energieën $\hbar^2 q^2 \gg mN|\mathcal{U}(q)|$ verschilt het quasi-deeltjes excitatiespectrum $\epsilon_{\vec{q}} \approx \hbar^2 q^2 / (2m) + N\mathcal{U}(q)$ niet wezenlijk van het niet-interagerende spectrum, zodat de quasi-deeltjes dezelfde eigenschappen hebben als de oorspronkelijke bosonen.
- Voor lage excitatie-energieën $\hbar^2 q^2 \ll mN\mathcal{U}(q)$ verandert het quasi-deeltjes excitatiespectrum in $\epsilon_{\vec{q}} \approx \hbar q \sqrt{N\mathcal{U}(q)/m} \approx \hbar q \sqrt{N\mathcal{U}(0)/m}$. De quasi-deeltjes beschrijven dan massaloze kwanta, namelijk gekwantiseerde geluidsgolven in het beschouwde medium met voortplantingssnelheid

$$c_s = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\epsilon_{\vec{q}}}{\hbar q} = \sqrt{\frac{N\mathcal{U}(0)}{m}} \quad , \quad \text{met} \quad \mathcal{U}(0) = \frac{1}{V} \int_V d\vec{r} \mathcal{U}(r) . \quad (113)$$

De laag-energetische quasi-deeltjesinterpretatie van het interagerende systeem verschilt zo dus wezenlijk van de oorspronkelijke deeltjesinterpretatie van het niet-interagerende systeem. We zien tevens dat we hiermee inderdaad een systeem hebben gevonden dat aanleiding kan geven tot superfluiditeit als $u < u_c \approx c_s$.



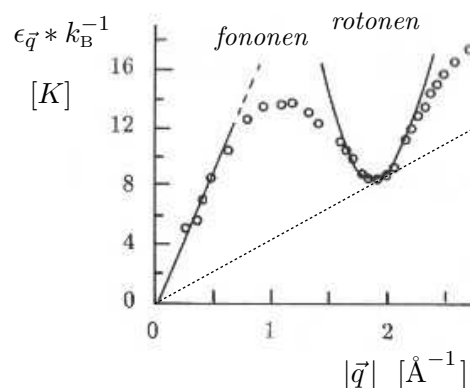
2) Benadering van de grondtoestand voor zwak-repulsieve spin-0 bosonen: ook de samenstelling van de grondtoestand van het interagerende veeldeeltjessysteem in termen van de oorspronkelijke deeltjes is wezenlijk veranderd (zie opgave 8 van het werkcollege).

- In het niet-interagerende geval zitten alle deeltjes in de 1-deeltjes grondtoestand met impuls $\vec{0}$ en energie 0 (d.w.z. $n_{\vec{0}}^{(0)} = N$ en $n_{\vec{k} \neq \vec{0}}^{(0)} = 0$). Dit condensaat heeft ruimtelijke correlaties op alle afstanden (zie opgave 7 van het werkcollege).
- In het interagerende geval geldt dit laatste nog steeds, maar de deeltjesexcitatie voor $\vec{k} \neq \vec{0}$ maken plaats voor quasi-deeltjes excitaties met dezelfde impuls, zodat in de nieuwe grondtoestand deze 1-quasi-deeltjes excitaties geen van allen bezet zijn (d.w.z. $n_{\vec{k}=\vec{0}} \approx N$ en voor de quasi-deeltjes $\tilde{n}_{\vec{k} \neq \vec{0}} = 0$). Deze situatie zonder aangeslagen quasi-deeltjes verschilt nu wezenlijk van een situatie zonder aangeslagen deeltjes. In de oorspronkelijke deeltjesinterpretatie bevat het nieuwe condensaat namelijk weldegelijk deeltjes buiten de 1-deeltjes grondtoestand in de vorm van coherent geëxciteerde deeltjesparen met tegengestelde impuls. De kinetische-energie toename wordt hierbij gecompenseerd door de afname van de repulsieve interactie-energie.

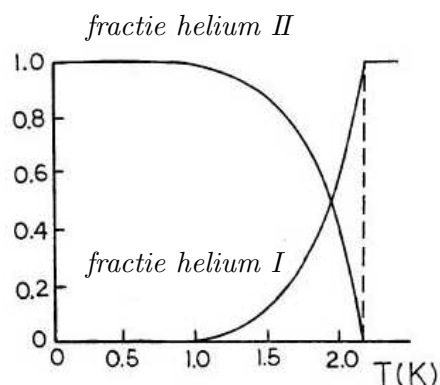
Opmerking: als de ruimtelijk gemiddelde paarinteractie $\mathcal{U}(0)$ attractief was geweest, d.w.z. $\mathcal{U}(0) < 0$, dan was de grondtoestand niet stabiel geweest. Dit is rechtstreeks af te lezen uit het complex worden van het spectrum (111) bij zeer lage energieën. Het is dan namelijk energetisch gunstiger voor het systeem om een zeer groot aantal laag-energetische deeltjesparen buiten de 1-deeltjes grondtoestand te bevatten, zodat bovenstaande aanpak voor lage energieën niet meer geldig is. De fermionische versie van zo'n “pairing” effect en de bijbehorende instabiliteit voor de vorming van gebonden deeltjesparen zal in hoofdstuk 2 worden bekeken in de context van supergeleiding. Een eerste kennismaking met dit fenomeen is in opgave 9 van het werkcollege te vinden.

1.6.7 Het rariteitenkabinet van superfluïde ^4He : het “two-fluid model”

Bovenstaand veeldeeltjessysteem staat bijvoorbeeld model voor de laag-energetische excitaties in vloeibaar ^4He , dat superfluïde wordt bij temperaturen beneden $T_\lambda = 2.18\text{ K}$ (P.L. Kapitsa, J.F. Allen en A.D. Misener, 1937). Er dient wel de kanttekening te worden geplaatst dat in dat geval de paarinteractie niet echt zwak is, omdat er per slot van rekening sprake is van een vloeistof. Dientengevolge treedt voor hogere energieën een tweede tak met excitaties op, die de kritische snelheid voor superfluiditeit verlaagt (zie plaatje).



Bij het absolute nulpunt van temperatuur is ${}^4\text{He}$ volledig superfluïde, d.w.z. er zijn geen laag-energetische excitaties thermisch aangeslagen. Voor toenemende temperatuur begint vanaf ongeveer 0.9 K een merkbare invloed van de thermisch aangeslagen excitaties te ontstaan. Op het temperatuurinterval $0 < T < T_\lambda$ is er effectief sprake van twee vloeistoffen. Enerzijds is er het condensaat zonder aangeslagen quasi-deeltjes excitaties. Deze vloeistof, helium II geheten, is superfluïde en draagt geen thermische energie. Anderzijds is er de collectie van thermisch aangeslagen quasi-deeltjes excitaties. Deze vloeistof, helium I geheten, draagt de thermische energie en geeft aanleiding tot wrijving. Voor $T > T_\lambda$ is de invloed van de helium II component verwaarloosbaar. Met behulp van dit zogenaamde “two-fluid model” kan een aantal soms verrassende fenomenen worden begrepen.



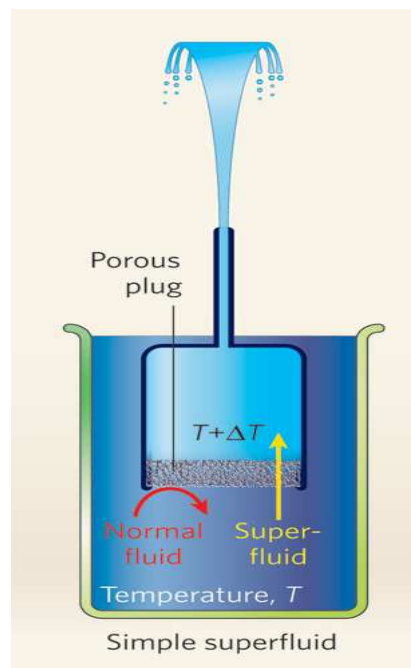
Herkenbaarheid van T_λ (P.L. Kapitsa, 1937): een markant superfluïde verschijnsel is dat bij verlaging van de temperatuur beneden T_λ het vloeibare helium abrupt ophoudt te koken en tot rust komt. De reden hiervoor is dat helium I zal wegstromen van plaatsen waar de vloeistof lokaal warmer is om zo thermische energie af te voeren, terwijl het niet-thermische helium II juist naar zulke plaatsen zal toestromen om de massadichtheid constant te houden. Het superfluïde Helium II wordt daarbij gekenmerkt door een oneindig goede warmtegeleiding, zodat het feitelijk niet mogelijk is om in deze vloeistof een temperatuurgradiënt op te zetten. Dit leidt ertoe dat in vloeibaar helium al voor temperaturen net beneden T_λ een miljoenvoudig efficiënter warmtetransport optreedt, zodat gasbellen geen tijd meer krijgen om zich te vormen.

Wrijving voor $T < T_\lambda$: objecten die zich bij een temperatuur beneden T_λ door ${}^4\text{He}$ bewegen ondervinden uitsluitend wrijving ten gevolge van de helium I component en niet ten gevolge van de helium II component. Op basis van dit gegeven kunnen bijvoorbeeld de helium I en helium II vloeistoffracties experimenteel worden bepaald (zie bovenstaand plaatje). Voor temperaturen beneden ongeveer 0.9 K gedraagt de vloeistof zich nagenoeg volledig superfluïde, zodat het blijft stromen als het eenmaal (bijvoorbeeld bij hogere T) in beweging is gebracht (“persistent current”).

Wrijvingsloze stroming door een poreuze begrenzing: ten gevolge van wrijving kan de helium I component niet door zeer nauwe kanalen heenstromen. De superfluïde helium II component daarentegen kan dat wel, zonder dat daarbij sprake moet zijn van een drukverschil tussen beide zijden van zo’n kanaal. Dus voor $T < T_\lambda$ kan ${}^4\text{He}$ door poreuze begrenzingen stromen en gedraagt deze stroming zich 100% wrijvingsloos. Zo’n situatie waarbij een selectieve superfluïde stroming optreedt wordt een superlek genoemd.

Het fonteineffect (J.F. Allen en H. Jones, 1938): beschouw een experimentele opstelling bestaande uit twee containers met ^4He die door middel van een superlek met elkaar zijn verbonden. Beide containers zijn afgekoeld tot dezelfde temperatuur beneden T_λ . Als nu één van de containers iets warmer wordt gemaakt (bijvoorbeeld door er met een zaklamp op te schijnen), dan zal in die container het aantal aangeslagen excitaties toenemen. Dit betekent dat de helium I component toeneemt ten koste van de helium II component. Om het verschil in helium II concentratie te compenseren zal er vanuit de andere container helium II door het superlek gaan stromen. Omgekeerd is er geen compenserende stroming van helium I naar de andere container mogelijk waar de helium I concentratie lager is. Hierdoor vindt er een vloeistofophoping plaats in de verwarmde container (warmtepomp). Door de verwarmde container van een capillaire uitlaatklep te voorzien kan een spectaculaire fontein (fonteineffect) worden construeerd.

Fisher and Pickett, Nature 444, 2006



Kruipende heliumfilm: ^4He heeft de eigenschap dat de onderlinge van der Waals-bindingen zwakker zijn dan de van der Waals-bindingen met andere atomen. Derhalve hecht zich makkelijk een 30 nm dikke 2-dimensionale heliumfilm (Rollin film) aan alle wanden van een afgesloten heliumcontainer. Indien een deel van deze film naar een lager niveau kan stromen/druppelen binnen de container (zie plaatje), dan zal er een superfluïde helium II stroming ontstaan die pas ophoudt als het heliumniveau overall in de container een energetisch optimum bereikt. Hierbij lijkt het dan alsof het helium de zwaartekracht trotseert.



Als je wat interessant filmmateriaal wil bekijken met betrekking tot de hierboven geschetste bizarre wereld van superfluïde ^4He , dan raad ik je aan om eens naar <http://www.youtube.com/watch?v=2Z6UJbwxBZI> te gaan of elders rond te snuffelen op YouTube.

1.7 Voorbeelden en toepassingen: fermionische systemen

1.7.1 Fermi-zee en gathetheorie

Beschouw een systeem bestaande uit een zeer groot, constant aantal N elektronen met massa m . De elektronen zitten opgesloten in een grote kubus met ribben L en periodieke randvoorwaarden, zodat er sprake is van een discreet impulspectrum

$$\{\vec{p} = \hbar\vec{k} : k_{x,y,z} = 0, \pm 2\pi/L, \pm 4\pi/L, \dots\} . \quad (114)$$

Zonder onderlinge interacties tussen de elektronen: de totale kinetische-energie operator van het niet-interagerende identieke veeldeeltjessysteem kan in diagonaalvorm worden geschreven in de impulsrepresentatie:

$$\hat{T}_{\text{tot}} = \sum_{\vec{k}} \sum_{m_s = \pm 1/2} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}, m_s}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, m_s} , \quad (115)$$

met kinetische energie-eigenwaarden

$$E = \sum_{\vec{k}, m_s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k}, m_s} . \quad (116)$$

Met behulp van de totale-impulsoperator en totale spinoperator in de z -richting

$$\hat{P}_{\text{tot}} = \sum_{\vec{k}, m_s} \hbar\vec{k} \hat{a}_{\vec{k}, m_s}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, m_s} \quad \text{en} \quad \hat{S}_{\text{tot}} \cdot \vec{e}_z = \sum_{\vec{k}, m_s} m_s \hbar \hat{a}_{\vec{k}, m_s}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, m_s} \quad (117)$$

kan zo de (triviale) deeltjesinterpretatie behorende bij de gebruikte creatie- en annihilatie-operatoren worden afgelezen. Deeltjes met kinetische energie $\hbar^2 \vec{k}^2 / (2m)$, impuls $\hbar\vec{k}$ en spincomponent $m_s \hbar$ langs de z -as worden gecreëerd door $\hat{a}_{\vec{k}, m_s}^\dagger$, geannihileerd door $\hat{a}_{\vec{k}, m_s}$ en geteld door $\hat{n}_{\vec{k}, m_s} = \hat{a}_{\vec{k}, m_s}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, m_s}$. Het bezettingsgetal $n_{\vec{k}, m_s}$ geeft aan hoeveel van de niet-interagerende deeltjes er in de aangegeven impuls- en spineigentoestand zitten.

Grondtoestand: voor de grondtoestand van het niet-interagerende N -elektronsysteem geldt nu dat $n_{\vec{k}, m_s} = 1$ als $|\vec{k}| \leq k_F$ en $n_{\vec{k}, m_s} = 0$ als $|\vec{k}| > k_F$. Zo'n systeem wordt een volledig gedegenererd elektrongas genoemd. De volledig gespecificeerde 1-deeltjes energieniveaus zijn dan van onder af aan bezet met één elektron tot aan de Fermi-energie $E_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m)$. In dat geval geldt

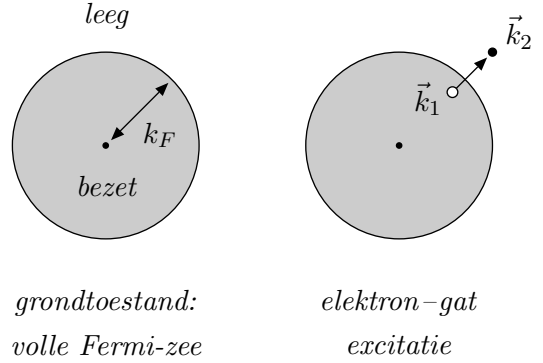
$$N = \sum_{\vec{k}, m_s} n_{\vec{k}, m_s} = 2 \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} \quad \text{en} \quad E_{\text{grond}} = 2 \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} . \quad (118)$$

De bijbehorende grondtoestandsfunctie wordt dus gegeven door

$$|\Psi_{\text{grond}}\rangle = \prod_{|\vec{k}| \leq k_F} \hat{a}_{\vec{k}, \frac{1}{2}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, -\frac{1}{2}}^\dagger |\Psi^{(0)}\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{a}_{\vec{k}, m_s} |\Psi_{\text{grond}}\rangle = 0 \quad \text{als} \quad |\vec{k}| > k_F . \quad (119)$$

Deze grondtoestand, die Fermi-zee wordt genoemd, heeft een verdwijnende totale impuls en spin, en heeft een substantiële kinetische energie. In de grondtoestand oefent het elektronogas dus weldegelijk druk uit (zie Hst. 2)!

Aangeslagen toestanden: de simpelste aangeslagen toestanden worden verkregen door één van de elektronen in de Fermi-zee te exciteren tot boven de Fermi-zee (zie plaatje). Aangezien alle toestanden binnen de Fermi-zee al bezet zijn is zo'n excitatie makkelijker vanuit energieniveaus aan de rand van de Fermi-zee dan vanuit dieper gelegen energieniveaus, omdat daarvoor beduidend meer energie nodig is.



Deze eigenschap zal bepalend blijken te zijn voor het thermische gedrag van fermionische veeldeeltjessystemen bij niet te hoge temperaturen (zie Hst. 2). Een excitatie van dit type is als volgt weer te geven in creatie- en annihilatietaal:

$$|\Psi_{\text{ex}}\rangle = \hat{a}_{\vec{k}_2, m_{s_2}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}_1, m_{s_1}} |\Psi_{\text{grond}}\rangle \quad \text{als} \quad |\vec{k}_1| \leq k_F < |\vec{k}_2| . \quad (120)$$

Omdat ten gevolge van de excitatie een gat in de Fermi-zee ontstaat wordt ook wel de terminologie elektron-gat excitatie gebruikt. In de zogenaamde gatentheorie wordt dit aspect verder uitgewerkt door met behulp van de Bogolyubov-transformaties

$$\hat{a}_{\vec{k}, m_s} \equiv \hat{c}_{-\vec{k}, -m_s}^\dagger \quad \text{als} \quad |\vec{k}| \leq k_F \quad \text{en} \quad \hat{a}_{\vec{k}, m_s}^\dagger \equiv \hat{c}_{\vec{k}, m_s}^\dagger \quad \text{als} \quad |\vec{k}| > k_F \quad (121)$$

over te gaan op een beschrijving waarbij een gat in de Fermi-zee de status krijgt van een quasi-deeltje met tegengestelde kwantumgetallen. De Fermi-zee is in dat geval een toestand zonder gaten in de zee en zonder excitaties boven de zee, d.w.z. de Fermi-zee is de bijbehorende quasi-deeltjes vacuümtoestand! Een aangeslagen toestand van bovenstaand type komt dan overeen met quasi-deeltjes paarcreatie. De gatentheorie-aanpak speelt met name een belangrijke rol bij de beschrijving van elektrische geleiding en bij Dirac's poging tot het opzetten van de relativistische kwantummechanica.

Deze aanpak kan alleen met fermionen: we hebben namelijk gebruik gemaakt van het Pauli-uitsluitingsprincipe, dat zegt dat $n_{\vec{k}, m_s} \in [0, 1]$, om de rol van bezet en leeg te verwisselen in de deeltjesinterpretatie van de gatentheorie. Het voordeel hiervan is dat de Fermi-zee (grondtoestand) de vacuümtoestand is binnen deze alternatieve deeltjesinterpretatie en dat een aangeslagen toestand overeenkomt met de creatie van een quasi-deeltjes paar. Men verkiest binnen de gatentheorie dus bewust gebruikersvriendelijkheid boven (quasi-)deeltjesbehoud!

Zwakke interacties tussen de elektronen: voor zwakke repulsieve interacties kan in het algemeen storingstheorie worden gebruikt, waarbij bovenstaande niet-interagerende situatie als ongestoord startpunt fungeert. Met behulp van gathetheorie kan daarbij de Fermi-zee als vacuümtoestand worden gehanteerd. Voor zwakke attractieve interacties is de situatie volledig anders. In opgave 9 van het werkcollege zal worden aangetoond hoe de aanwezigheid van de Fermi-zee van bezette toestanden aanleiding geeft tot de zogenaamde Cooper-instabiliteit. Dit houdt in dat twee elektronen die zich boven een Fermi-zee van bezette toestanden bevinden een “gebonden” paar met eindige bindingsenergie kunnen vormen als hun onderlinge interactie maar attractief is. In tegenstelling tot een 1-deeltjes gebonden toestand in een potentiaalput treedt dit veeldeeltjesbindingseffect op ongeacht de sterkte van de interactie en is het niet met een storingsreeks te beschrijven (zie de bespreking van het lage-temperatuurfenomeen van supergeleiding in §2.8).

1.7.2 De Bogolyubov-transformatie voor fermionen

Voor later gebruik wordt tenslotte de fermionische versie van de Bogolyubov-transformatie uit §1.6.5 afgeleid. We gaan hierbij uit van exact hetzelfde 2-niveau systeem als beschreven op pagina 38, waarbij pas na vergelijking (103) iets afwijkends gaat optreden. Dus ook in dit geval wordt de transformatie gegeven door $\hat{c}_1 = u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger$ en $\hat{c}_2 = u_2 \hat{a}_2 + v_2 \hat{a}_1^\dagger$.

In tegenstelling tot het bosonische geval willen we nu dat zowel $\hat{a}_{1,2}^\dagger, \hat{a}_{1,2}$ als $\hat{c}_{1,2}^\dagger, \hat{c}_{1,2}$ aan fermionische anticommutatierelaties voldoen. Dan moet het volgende gelden voor de reële constanten $u_{1,2}$ en $v_{1,2}$:

$$\begin{array}{l}
 u_1 v_2 + v_1 u_2 = 0 \quad \text{en} \quad u_1^2 + v_1^2 = u_2^2 + v_2^2 = 1 \\
 \Rightarrow \quad u_1 = +u_2 \quad , \quad v_1 = -v_2 \quad \text{en} \quad u_1^2 + v_1^2 = 1 \\
 \quad \text{of} \quad u_1 = -u_2 \quad , \quad v_1 = +v_2 \quad \text{en} \quad u_1^2 + v_1^2 = 1 .
 \end{array} \tag{122}$$

Bewijs: de anticommutatierelaties $\{\hat{c}_1, \hat{c}_1\} = \{\hat{c}_2, \hat{c}_2\} = \{\hat{c}_1, \hat{c}_2^\dagger\} = 0$ volgen rechtstreeks uit de fermionische anticommutatierelaties voor $\hat{a}_{1,2}^\dagger$ en $\hat{a}_{1,2}$. Uit de eis dat de overige anticommutatoren

$$\begin{aligned}
 \{\hat{c}_1, \hat{c}_2\} &\stackrel{(103)}{=} \{u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger, u_2 \hat{a}_2 + v_2 \hat{a}_1^\dagger\} \stackrel{(27)}{=} (u_1 v_2 + v_1 u_2) \hat{1} , \\
 \{\hat{c}_1, \hat{c}_1^\dagger\} &\stackrel{(103)}{=} \{u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger, u_1 \hat{a}_1^\dagger + v_1 \hat{a}_2\} \stackrel{(27)}{=} (u_1^2 + v_1^2) \hat{1} , \\
 \{\hat{c}_2, \hat{c}_2^\dagger\} &\stackrel{(103)}{=} \{u_2 \hat{a}_2 + v_2 \hat{a}_1^\dagger, u_2 \hat{a}_2^\dagger + v_2 \hat{a}_1\} \stackrel{(27)}{=} (u_2^2 + v_2^2) \hat{1} ,
 \end{aligned}$$

aan de gebruikelijke fermionische anticommutatierelaties moeten voldoen, volgen tenslotte de aangegeven condities voor $u_{1,2}$ en $v_{1,2}$.

In bovenstaande transformatie wordt voor het vrij te kiezen teken meestal het bovenste teken genomen (d.w.z. $u_1 = u_2$ en $v_1 = -v_2$). Deze specifieke keuze geeft dan aanleiding tot de volgende generieke vorm voor de fermionische Bogolyubov-transformatie:

$$\boxed{\hat{c}_1 \equiv u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger \quad , \quad \hat{c}_2 \equiv u_1 \hat{a}_2 - v_1 \hat{a}_1^\dagger} \quad (123)$$

met inverse

$$\boxed{\hat{a}_1 = u_1 \hat{c}_1 - v_1 \hat{c}_2^\dagger \quad , \quad \hat{a}_2 = u_1 \hat{c}_2 + v_1 \hat{c}_1^\dagger} . \quad (124)$$

In de literatuur wordt er verder meestal voor gekozen om u_1 en v_1 te parametriseren in termen van de reële parameter θ volgens $u_1 = \cos \theta$ en $v_1 = \sin \theta$ om op die manier automatisch aan de conditie $u_1^2 + v_1^2 = 1$ te voldoen.

Speciaal geval: als $u_1 = u_2 = 0$, dan zijn de tekens van zowel v_1 als v_2 vrij te kiezen. Meestal zal dan $v_1 = v_2 = 1$ worden gekozen, zoals in § 1.7.1 is gedaan bij de quasi-deeltjes beschrijving van gatentheorie.

Het fermionische quasi-deeltjesvacuüm : in het geval van fermionen is het verwijderen van een deeltje uit een bepaalde toestand equivalent met het creëren van een gat in de bezetting van die toestand. Het type quasi-deeltje waarmee we hier dus te maken hebben is een lineaire combinatie van een deeltje en een gat. Dit type quasi-deeltje wordt veelvuldig gebruikt in met name de vaste-stoffysica bij de beschrijving van interagerende fermionsystemen (zie § 1.7.1 en § 2.8). In opgave 10 van het werkcollege zal het fermionische quasi-deeltjesvacuüm $|\tilde{0}\rangle$ worden uitgedrukt in termen van de oorspronkelijke basistoestanden $|n_1, n_2\rangle$:

$$\boxed{|\tilde{0}\rangle \stackrel{\text{op fasefactor na}}{=} u_1 |0, 0\rangle - v_1 |1, 1\rangle = (u_1 - v_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger) |0, 0\rangle} . \quad (125)$$

Het additief maken van de niet-additieve Hamilton-operator in vergelijking (102).

Om deze operator door middel van een Bogolyubov-transformatie in een additieve vorm te krijgen bekijken we twee combinaties van quasi-deeltjes teloperatoren. Ten eerste geldt

$$\begin{aligned} \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 - \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 &\stackrel{(123)}{=} (u_1 \hat{a}_1^\dagger + v_1 \hat{a}_2)(u_1 \hat{a}_1 + v_1 \hat{a}_2^\dagger) - (u_1 \hat{a}_2^\dagger - v_1 \hat{a}_1)(u_1 \hat{a}_2 - v_1 \hat{a}_1^\dagger) \\ &\stackrel{(27)}{=} u_1^2 (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) - v_1^2 (\hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger - \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger) \\ &\stackrel{(27)}{=} (u_1^2 + v_1^2) (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) \stackrel{(122)}{=} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 . \end{aligned} \quad (126)$$

Deze relatie zegt wederom dat onder de overgang van deeltjes naar quasi-deeltjes bepaalde kwantumgetallen behouden kunnen worden gehouden, vooropgesteld dat die kwantumgetallen een tegengestelde waarde hebben in de toestanden $|q_1\rangle$ en $|q_2\rangle$. Zo'n situatie zijn we in feite al bij het voorbeeld van gatentheorie in § 1.7.1 tegengekomen.

Op analoge wijze is af te leiden dat

$$\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 + \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 - \hat{1} = (u_1^2 - v_1^2)(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 - \hat{1}) + 2u_1 v_1 (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2 \hat{a}_1). \quad (127)$$

De niet-additieve Hamilton-operator \hat{H} in vergelijking (102) is nu om te schrijven tot

$$\begin{aligned} \hat{H} &= E(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 - \hat{1}) + \Delta(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2 \hat{a}_1) + E \hat{1} \\ &= \pm \sqrt{E^2 + \Delta^2} (\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 + \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 - \hat{1}) + E \hat{1}. \end{aligned} \quad (128)$$

Bewijs: op basis van vergelijking (127) zijn we op zoek naar een factor C zodanig dat $C(u_1^2 - v_1^2) = E$ en $2Cu_1 v_1 = \Delta$. Hieruit volgt dat $E^2 + \Delta^2 = C^2(u_1^2 + v_1^2)^2 \stackrel{(122)}{=} C^2$, waarbij het teken van C wordt bepaald door het teken van $(u_1^2 - v_1^2)/E$.

Zoals gewenst bestaat de Hamilton-operator in deze vorm uitsluitend uit de eenheidsoperator en teloperatoren voor de quasi-deeltjes. De hier beschreven diagonalisatiemethode zal in § 2.8 expliciet gebruikt gaan worden bij de bespreking van het lage-temperatuurfenomeen van supergeleiding. Voor de beschrijving van de elektrongaten in § 1.7.1 hebben we gebruik gemaakt van een speciaal geval van de Bogolyubov-transformatie waarbij $\hat{c}_1 = \hat{a}_2^\dagger$ en $\hat{c}_2 = \hat{a}_1^\dagger$. In dat geval geldt $E(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) = -E(\hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_2 \hat{a}_2^\dagger - 2) = -E(\hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 + \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 - 2)$. De creatie van een gat in de Fermi-zee resulteert namelijk in een negatieve energiebijdrage ten opzichte van de Fermi-energie. Zoals boven is opgemerkt wordt het teken van de energie van de quasi-deeltjes bepaald door het teken van $(u_1^2 - v_1^2)/E$, hetgeen aangeeft of het beschouwde type quasi-deeltje meer deeltje is dan gat (plusteken) of meer gat is dan deeltje (minteken).

2 Kwantumstatistiek

In dit hoofdstuk zal kennis worden gemaakt met het concept van gemengde kwantummechanische ensembles. Aan de hand hiervan zullen de verschillende vormen van kwantumstatistiek worden afgeleid voor zich in thermisch evenwicht bevindende veeldeeltjessystemen.

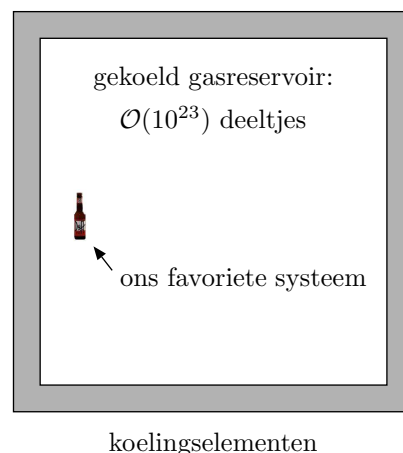
Overeenkomstig materiaal is te vinden in Griffiths (kwantumstatistiek in Hst. 5), Merzbacher (Hst. 15, 16, 22) en Bransden & Joachain (Hst. 10, 14).

Tot nu toe is er gewerkt met pure kwantummechanische ensembles behorende bij een pure kwantumtoestand, d.w.z. een collectie identieke, onafhankelijke, identiek geprepareerde systemen die door één toestandsfunctie $|\psi\rangle$ worden beschreven. Deze toestandsfunctie is op een fase na te bepalen met behulp van een maximale meting aan een complete set commensurabele observabelen. De systemen waaruit het ensemble is opgebouwd zijn onafhankelijk van elkaar en kunnen bestaan uit deeltjes, interagerende deeltjesclusters (zoals atomen/moleculen) of zelfs volledige identieke veeldeeltjessystemen (zoals gassen). Zulke pure kwantumtoestanden zijn experimenteel te realiseren door geschikte filters te gebruiken, zoals een Stern–Gerlach filter om een pure spintoestand te selecteren.

Vraag: *Wat gebeurt er als niet alle voor de systemen relevante vrijheidsgraden worden meegenomen in de beschouwing en dus kwantuminformatie wordt weggelaten?*

Deze situatie is in feite de onvermijdelijke realiteit van de kwantumwereld zoals wij die ervaren. Tijdens een kwantummechanisch experiment wordt het te beschouwen systeem bijvoorbeeld geprepareerd door middel van filters en vervolgens blootgesteld aan de omgevingsinvloeden van de experimentele opstelling (gassen, elektromagnetische velden, etc.). Al deze omgevingsinvloeden ten gevolge van het contact met een macroscopische buitenwereld leggen de eigenschappen vast van het kwantummechanisch ensemble waaraan uiteindelijk de metingen worden

verricht. Denk hierbij aan een kwantumsysteem waarvan de thermodynamische eigenschappen worden vastgelegd door het contact met een macroscopisch gasreservoir dat zich binnen het vaste volume van de meetopstelling bevindt, of een deeltjesbundel die geproduceerd wordt door een deeltjesbron en daarna door een paar filters heengaat. Het is natuurlijk niet haalbaar om de toestandsfunctie van de hele experimentele opstelling door middel van een maximale meting te bepalen. De macroscopische buitenwereld heeft simpelweg teveel vrijheidsgraden. In zulke gevallen moeten we de vrijheidsgraden van de



buitenwereld uitintegreren (lees: weglaten), zodat er een kwantummechanisch beschrijvingskader ontstaat dat van toepassing is op de gereduceerde ruimte opgespannen door de vrijheidsgraden van het beschouwde type systeem. Let wel: soms is het helemaal niet noodzakelijk om bepaalde vrijheidsgraden uit te integreren, maar is het simpelweg handiger om die vrijheidsgraden buiten de beschouwing te houden. Een voorbeeld hiervan is de (spin)polarisatie van een deeltjesbundel, waarbij het gewoon handiger is om niet te hoeven praten over de ruimtelijke vrijheidsgraden (zie § 2.2).

Het uitintegreren van vrijheidsgraden: om een idee te geven van wat er gebeurt bij het uitintegreren van kwantummechanische vrijheidsgraden beschouwen we een spin-1/2 systeem beschreven door de volgende genormeerde, pure toestandsfunctie in de plaatsrepresentatie:

$$\chi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \psi_+(\vec{r}) \chi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \psi_-(\vec{r}) \chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}},$$

$$\text{met } \int d\vec{r} \psi_\lambda^*(\vec{r}) \psi_{\lambda'}(\vec{r}) = W_\lambda \delta_{\lambda\lambda'} \quad (\lambda, \lambda' = \pm) \quad \text{en normering} \quad W_+ + W_- = 1.$$

Gemakshalve zijn hierbij $\psi_\pm(\vec{r})$ orthogonaal gekozen. Vervolgens gaan we de ruimtelijke vrijheidsgraden uitintegreren om zo met een tot de spinruimte gereduceerd systeem kwantumfysica te gaan bedrijven. Hiertoe beschouwen we een willekeurige spinobservabele \hat{A} die als een 2×2 matrix A werkt in die 2-dimensionale spinruimte en geen werking heeft in de plaatsruimte. De bijbehorende verwachtingswaarde voor de toestand $\chi(\vec{r})$ wordt dan

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d\vec{r} \chi^\dagger(\vec{r}) A \chi(\vec{r}) = \text{Tr} \left(A \int d\vec{r} \chi(\vec{r}) \chi^\dagger(\vec{r}) \right) \equiv \text{Tr}(A\rho),$$

$$\text{met } \rho = \overbrace{\int d\vec{r} \langle \vec{r} | \chi \rangle \langle \chi | \vec{r} \rangle}^{\vec{r} \text{ uitgeïntegreerd}} = \begin{pmatrix} W_+ & 0 \\ 0 & W_- \end{pmatrix} = \underline{\text{dichtheidsmatrix}} \text{ in de spinruimte}$$

en $\text{Tr} =$ spoor in de spinruimte ,

waarbij gebruik is gemaakt van het feit dat voor D -dimensionale vectoren v en op deze vectoren werkende $D \times D$ matrices M geldt dat

$$\sum_{i,j=1}^D v_i^* M_{ij} v_j = \sum_{i,j=1}^D M_{ij} (v_j v_i^*) \equiv \sum_{i,j=1}^D M_{ij} W_{ji} = \text{Tr}(MW).$$

De verwachtingswaarde voor het volledige systeem splitst nu op volgens

$$\langle \hat{A} \rangle = W_+ \text{Tr}(A \chi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^\dagger \chi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}) + W_- \text{Tr}(A \chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^\dagger \chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}) = W_+ \langle \hat{A} \rangle_+ + W_- \langle \hat{A} \rangle_-$$

in twee onafhankelijke verwachtingswaarden, één bij de pure spintoestand $\chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$ met gewicht $W_+ \geq 0$ en één bij de pure spintoestand $\chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$ met gewicht $W_- = 1 - W_+ \geq 0$. De kwantumfysica in de spinruimte wordt dus vastgelegd door de dichtheidsmatrix ρ die is opgebouwd uit statistische gewichten en projectie-operatoren op pure toestanden:

$$\rho = W_+ \chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^\dagger + W_- \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^\dagger = W_+ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + W_- \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Gemengde ensembles: het uitintegreren van kwantummechanische vrijheidsgraden geeft aanleiding tot zogenaamde gemengde ensembles. Zulke ensembles zijn een incoherent mengsel (d.w.z. een statistisch mengsel) van pure deelensembles, zodat er sprake is van een dubbele statistiek:

- enerzijds is er de statistische interpretatie van de pure kwantummechanische toestandsfuncties die de pure deelensembles beschrijven;
- anderzijds is er een statistisch mengsel van zulke deelensembles binnen het gemengde ensemble.

De kwantumfysica wordt in dit soort situaties vastgelegd door de dichtheidsoperator, die de relevante eigenschappen van het gemengde ensemble bevat. Deze relevante eigenschappen zijn de pure kwantummechanische toestandsfuncties die de pure deelensembles beschrijven en de bijbehorende statistische gewichten.

Misschien zou je denken dat er bij gemengde ensembles sprake zou kunnen zijn van een soort superpositie van pure toestandsfuncties. Zoals uit onderstaand voorbeeld zal blijken is dat echter niet het geval.

Gemengde ensembles vs pure ensembles: beschouw het voorgaande voorbeeld met gelijke statistische gewichten $W_\pm = 0.5$, zodat een statistisch mengsel ontstaat met dichtheidsmatrix $\rho = \frac{1}{2}I$ waarbij 50% van de deeltjes in de spintoestand $\chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$ zit en 50% in de spintoestand $\chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$. Zo'n incoherent mengsel van de pure spintoestanden $\chi_{\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}}$ kan niet met behulp van een lineaire combinatie van toestanden zoals $(\chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} + \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}})/\sqrt{2}$ worden beschreven, ook al resulteert zo'n pure toestand inderdaad in een 50% kans om de deeltjes in elk van beide spintoestanden te meten. Er zijn echter andere meetbare grootheden die wel tot wezenlijk verschillende meetresultaten zullen leiden in beide situaties. De toestand $(\chi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} + \chi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}})/\sqrt{2}$ is bijvoorbeeld een pure eigentoestand van de spinoperator \hat{S}_x bij de eigenwaarde $\hbar/2$. Bij meting van de spin in de x -richting zal het meetresultaat in dat geval vast moeten liggen: 100% van de deeltjes zullen de meetwaarde $\hbar/2$ opleveren! Voor het gemengde ensemble geldt daarentegen dat

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \text{Tr}(\sigma_x \rho) = \frac{\hbar}{2} \text{Tr}(\sigma_x) = 0 \neq \frac{\hbar}{2},$$

aangezien geen van beide type deeltjes waaraan de meting wordt uitgevoerd in de aangegeven eigentoestand zit. Een incoherent mengsel houdt in feite in dat de fases van de afzonderlijke bestanddelen niet gerelateerd zijn, hetgeen een lineaire combinatie van pure toestandsfuncties uitsluit. Het ensemble splitst op in onafhankelijke deelensembles met elk een specifieke spintoestandsfunctie en statistisch gewicht.

Dichtheidsoperatoren worden gebruikt in vele takken van de fysica. Verderop in dit hoofdstuk zullen we een aantal karakteristieke voorbeelden zien uit de verstrooiingsfysica en uit de statistische fysica (met toepassingen in de vaste-stoffysica, kernfysica, astrofysica en lage-temperatuurphysica). Dichtheidsoperatoren zijn verder ook een belangrijk stuk gereedschap bij de beschrijving van de toestandsfunctie-collapse van een microscopisch systeem ten gevolge van de invloed van een macroscopisch stuk meetapparatuur.

2.1 De dichtheidsoperator (J. von Neumann, 1927)

Beschouw een ensemble bestaande uit een statistisch mengsel van N onafhankelijke deelensembles, die elk beschreven worden door een pure genormeerde toestandsfunctie

$$|\psi^{(\alpha)}\rangle \equiv |\alpha\rangle, \quad \text{met} \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \quad (\alpha = 1, \dots, N). \quad (129)$$

Elk deelensemble is een collectie identieke, onafhankelijke, identiek geprepareerde systemen die door de desbetreffende toestandsfunctie $|\alpha\rangle$ worden beschreven. De onafhankelijke systemen beschreven door de verschillende toestandsfuncties $|\alpha\rangle$ zijn qua samenstelling identiek, maar bevinden zich in een andere toestand. Deze toestanden hoeven geen eigentoestanden te zijn bij dezelfde observabele, zodat in het algemeen geldt dat $\langle\alpha|\alpha'\rangle \neq 0$ als $\alpha \neq \alpha'$. Denk hierbij aan een elektronbundel waarvan 40% van de deeltjes langs de z -as zijn gepolariseerd, 30% langs de y -as en 30% langs de x -as. De bundel bestaat uit drie onafhankelijke deelensembles, die elk beschreven worden door een pure spintoestandsfunctie. De drie typen systemen die door deze pure spintoestandsfuncties worden beschreven bestaan alle drie uit één elektron, maar de spin wijst in elk van de drie gevallen in een andere richting.

Van verwachtingswaarde naar ensemblegemiddelde: laat $\{|n\rangle\}$ een orthonormale set eigentoestanden zijn bij een complete set observabelen van het beschouwde type systeem, dan geldt voor discrete waarden van n dat

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \quad \text{en} \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}. \quad (130)$$

Voor waarden van n die behoren tot het continue spectrum moet op de gebruikelijke wijze $\delta_{nn'}$ vervangen worden door $\delta(n - n')$ en de som door een integraal. De genormeerde pure toestandsfuncties $|\alpha\rangle$ kunnen nu ontbonden worden in termen van deze basis:

$$|\alpha\rangle \stackrel{(130)}{=} \sum_n |n\rangle\langle n|\alpha\rangle \equiv \sum_n c_n^{(\alpha)} |n\rangle, \quad \text{met} \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_n |c_n^{(\alpha)}|^2 = 1. \quad (131)$$

Laat \hat{A} een observabele zijn met bijbehorende dynamische variabele \mathcal{A} die betrekking heeft op het beschouwde type systeem. Voor elk van de genormeerde toestanden $|\alpha\rangle$ wordt de verwachtingswaarde (= kwantummechanisch gemiddelde) van de dynamische variabele \mathcal{A} gegeven door

$$\langle \hat{A} \rangle_\alpha \equiv \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle \stackrel{(130)}{=} \sum_{n,n'} \langle \alpha | n' \rangle \langle n' | \hat{A} | n \rangle \langle n | \alpha \rangle \stackrel{(131)}{=} \sum_{n,n'} c_n^{(\alpha)} c_{n'}^{(\alpha)*} \langle n' | \hat{A} | n \rangle . \quad (132)$$

Vervolgens brengen we in rekening dat we een statistisch mengsel van pure deelensembles hebben. Geef hiertoe het statistisch gewicht van de pure toestand $|\alpha\rangle$ in het ensemble aan met W_α , hetgeen overeenkomt met de fractie van systemen die in de toestand $|\alpha\rangle$ zitten. Kortweg, de factor W_α is de waarschijnlijkheid dat een systeem in de toestand $|\alpha\rangle$ zit. Het ensemblegemiddelde (= statistisch gemiddelde) $[\hat{A}]$ van de dynamische variabele \mathcal{A} laat zich dan representatie-onafhankelijk uitdrukken in termen van

$$\boxed{[\hat{A}] = \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \langle \hat{A} \rangle_\alpha , \quad \text{met} \quad W_\alpha \in [0, 1] \quad \text{en} \quad \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha = 1} . \quad (133)$$

Definitie van de dichtheidsoperator: de uitdrukking voor het ensemblegemiddelde is met behulp van vergelijking (132) te herschrijven tot

$$[\hat{A}] = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{n,n'} W_\alpha \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | n' \rangle \langle n' | \hat{A} | n \rangle \equiv \sum_{n,n'} \langle n | \hat{\rho} | n' \rangle \langle n' | \hat{A} | n \rangle , \quad (134)$$

waarbij de dichtheidsoperator $\hat{\rho}$ van het ensemble is opgebouwd uit projectie-operatoren op de verschillende pure toestanden:

$$\boxed{\hat{\rho} = \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha|} . \quad (135)$$

Deze dichtheidsoperator is hermitisch aangezien $W_\alpha \in \mathbb{R}$, zodat

$$\forall_{\psi_1, \psi_2} \langle \psi_2 | \hat{\rho} | \psi_1 \rangle^* \stackrel{(135)}{=} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \langle \psi_2 | \alpha \rangle^* \langle \alpha | \psi_1 \rangle^* = \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \langle \psi_1 | \alpha \rangle \langle \alpha | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{\rho} | \psi_2 \rangle .$$

In de n -representatie wordt de dichtheidsoperator gekarakteriseerd door de zogenaamde dichtheidsmatrix

$$\rho_{nn'} = \langle n | \hat{\rho} | n' \rangle \stackrel{(131),(135)}{=} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha c_n^{(\alpha)} c_{n'}^{(\alpha)*} . \quad (136)$$

Het ensemblegemiddelde van de dynamische variabele \mathcal{A} wordt in matrixtaal simpelweg gegeven door

$$[\hat{A}] \stackrel{(134)}{=} \sum_{n,n'} \langle n | \hat{\rho} | n' \rangle \langle n' | \hat{A} | n \rangle \stackrel{(130)}{=} \sum_n \langle n | \hat{\rho} \hat{A} | n \rangle = \boxed{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = [\hat{A}]} . \quad (137)$$

Eigenschappen van de dichtheidsoperator:

- Aangezien de dichtheidsoperator $\hat{\rho}$ hermitisch is bestaat er een orthonormale basis $\{|k\rangle\}$ van eigentoestanden bij de reële eigenwaarden $\{\rho_k\}$. Zo'n eigenwaarde

$$\rho_k = \langle k|\hat{\rho}|k\rangle \stackrel{(136)}{=} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha |c_k^{(\alpha)}|^2 \in [0, 1] \quad (138)$$

is te interpreteren als de waarschijnlijkheid om een systeem in de pure toestand $|k\rangle$ te vinden.

- Op grond van behoud van waarschijnlijkheid geldt

$$\boxed{\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1} . \quad (139)$$

Bewijs: $\text{Tr}(\hat{\rho}) \stackrel{(137)}{=} [\hat{1}] \stackrel{(133)}{=} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \langle \hat{1} \rangle_\alpha \stackrel{\langle \alpha|\alpha \rangle=1}{=} \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha \stackrel{(133)}{=} 1 .$

- Voor willekeurige ensembles geldt

$$\boxed{\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1} . \quad (140)$$

Bewijs: in termen van de eigenwaarden $\rho_k \in [0, 1]$ van $\hat{\rho}$ geldt automatisch dat

$$[\hat{\rho}] \stackrel{(137)}{=} \text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \sum_k \rho_k^2 \leq \sum_k \rho_k = \text{Tr}(\hat{\rho}) \stackrel{(139)}{=} 1 .$$

- Tenslotte geldt het volgende criterium voor een systeem in een pure toestand:

$$\boxed{\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1 \Leftrightarrow \hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \Leftrightarrow \text{het systeem zit in een pure toestand}} . \quad (141)$$

Bewijs (\Leftarrow): stel het systeem zit in de pure toestand $|\lambda\rangle$, dan geldt $W_\alpha = \delta_{\alpha\lambda}$ en is de dichtheidsoperator $\hat{\rho} \stackrel{(135)}{=} |\lambda\rangle\langle\lambda|$ een projectie-operator op $|\lambda\rangle$. Dit houdt in dat $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$, zodat automatisch geldt dat $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$.

Bewijs (\Rightarrow): stel $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$. Ten opzichte van de orthonormale basis $\{|k\rangle\}$ van eigentoestanden van $\hat{\rho}$ geldt dan

$$\sum_k \rho_k^2 = \sum_k \rho_k = 1 \stackrel{\rho_k^2 \leq \rho_k}{\Rightarrow} \exists_\lambda \rho_k = \delta_{k\lambda}$$

$$\Rightarrow \text{spectrale decompositie : } \hat{\rho} = \sum_k \rho_k |k\rangle\langle k| = |\lambda\rangle\langle\lambda| = \hat{\rho}^2 .$$

Aangezien de dichtheidsoperator te schrijven moet zijn als een projectie-operator $\hat{\rho} = |\lambda\rangle\langle\lambda|$ is hiermee tevens bewezen dat er sprake moet zijn van een puur ensemble, waarbij het systeem in de pure toestand $|\lambda\rangle$ zit.

Als het systeem in een pure toestand $|\lambda\rangle$ zit, dan geldt dus dat

$$\hat{\rho} = |\lambda\rangle\langle\lambda| \equiv \hat{\rho}_\lambda, \quad (142)$$

zodat alle eigenwaarden van $\hat{\rho}$ gelijk zijn aan 0 behalve één eigenwaarde 1 behorende bij de eigentoestand $|\lambda\rangle$. Het ensemblegemiddelde van de dynamische variabele \mathcal{A} is in deze situatie natuurlijk gelijk aan de verwachtingswaarde voor de toestand $|\lambda\rangle$:

$$[\hat{A}] = \text{Tr}(\hat{\rho}_\lambda \hat{A}) \stackrel{(133)}{=} \langle \hat{A} \rangle_\lambda = \langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle. \quad (143)$$

2.2 Voorbeeld: polarisatie van een spin-1/2 ensemble

Als eerste toepassing van het dichtheidsmatrixformalisme beschouwen we een bundel bestaande uit spin-1/2 deeltjes. Een goed begrip van de eigenschappen van zo'n bundel is met name belangrijk voor verstrooiingsexperimenten in de hoge-energiefysica, waar meestal sprake is van tenminste één bundel met spin-1/2 deeltjes (zoals elektronen, positronen, protonen of antiprotonen). In verstrooiingsexperimenten worden bundels met een zodanig lage dichtheid gebruikt dat de deeltjes als onafhankelijk mogen worden beschouwd. Hierdoor wordt het zinvol om de bundel niet meer te zien als een identiek veeldeeltjessysteem, maar als een (gemengd) ensemble van bundeldeeltjes waarmee vervolgens een herhaald kwantummechanisch verstrooiingsexperiment kan worden uitgevoerd.

De pure toestanden voor de bundeldeeltjes zijn bijvoorbeeld te ontbinden ten opzichte van de basis $\{|\vec{p}, m_s\rangle : \vec{p} \in \mathbb{R}^3 \text{ en } m_s = \pm 1/2\}$, waarbij \vec{p} de impulseigenwaarde van een bundeldeeltje is en $m_s \hbar$ de spincomponent langs de z -as. Laat nu de impulsvariabelen weg in de beschouwing en ga werken met de gereduceerde dichtheidsmatrix in de 2-dimensionale spinruimte. Spininformatie is namelijk een belangrijk stuk gereedschap om verstrooiingsdata in detail te kunnen analyseren.

Ter voorbereiding: het samenvoegen van twee pure bundels.

Beschouw twee bundels. Bundel a bestaat uit N_a spin-1/2 deeltjes geprepareerd in de pure spintoestand $|\chi^{(a)}\rangle$ en bundel b bestaat uit N_b spin-1/2 deeltjes geprepareerd in de pure spintoestand $|\chi^{(b)}\rangle$. Vervolgens worden de bundels samengevoegd. Zo ontstaat een statistisch mengsel van de twee gegeven deelensembles, met gewichten $W_a = N_a/(N_a+N_b)$ en $W_b = N_b/(N_a+N_b)$. De dichtheidsoperator van dit gemengde ensemble wordt dan gegeven door

$$\hat{\rho} = W_a |\chi^{(a)}\rangle\langle\chi^{(a)}| + W_b |\chi^{(b)}\rangle\langle\chi^{(b)}|. \quad (144)$$

Ten opzichte van de gebruikelijke basis $\{|\chi_1\rangle \equiv \chi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}, |\chi_2\rangle \equiv \chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}\}$ geldt

$$|\chi^{(a)}\rangle = c_1^{(a)} |\chi_1\rangle + c_2^{(a)} |\chi_2\rangle \quad \text{en} \quad |\chi^{(b)}\rangle = c_1^{(b)} |\chi_1\rangle + c_2^{(b)} |\chi_2\rangle, \quad (145)$$

zodat de dichtheidsmatrix van de vorm

$$\rho \stackrel{(136)}{=} \begin{pmatrix} W_a |c_1^{(a)}|^2 + W_b |c_1^{(b)}|^2 & W_a c_1^{(a)} c_2^{(a)*} + W_b c_1^{(b)} c_2^{(b)*} \\ W_a c_1^{(a)*} c_2^{(a)} + W_b c_1^{(b)*} c_2^{(b)} & W_a |c_2^{(a)}|^2 + W_b |c_2^{(b)}|^2 \end{pmatrix} \quad (146)$$

is in de spinruimte. Als de oorspronkelijke pure bundeltoestanden samenvallen met de gekozen basis van de spinruimte, d.w.z. $|\chi^{(a)}\rangle = |\chi_1\rangle$ en $|\chi^{(b)}\rangle = |\chi_2\rangle$, dan simplificeert de dichtheidsmatrix tot een diagonale matrix

$$\rho = \begin{pmatrix} W_a & 0 \\ 0 & W_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{N_a}{N_a + N_b} & 0 \\ 0 & \frac{N_b}{N_a + N_b} \end{pmatrix}. \quad (147)$$

Polarisatie van een willekeurig spin-1/2 ensemble: beschouw de 2×2 dichtheidsmatrix ρ in de spinruimte. Deze matrix is te ontbinden als

$$\rho = A_0 I + \vec{A} \cdot \vec{\sigma} \quad (A_0 \in \mathbb{C} \text{ en } A_{x,y,z} \in \mathbb{C}), \quad (148)$$

in termen van de eenheidsmatrix I en de Pauli-spinmatrices σ_x, σ_y en σ_z die samen een basis vormen van 2×2 matrices (zie App. B). Uit de spooreigenschappen (B.5) voor deze basismatrices kunnen we afleiden dat

$$\text{Tr}(\rho) = A_0 \text{Tr}(I) + \vec{A} \cdot \text{Tr}(\vec{\sigma}) \stackrel{(B.5)}{=} 2A_0 \stackrel{(139)}{=} 1,$$

$$[\sigma_j] = \text{Tr}(\rho \sigma_j) = A_0 \text{Tr}(\sigma_j) + \sum_k A_k \text{Tr}(\sigma_k \sigma_j) \stackrel{(B.5)}{=} \sum_k 2A_k \delta_{jk} = 2A_j \quad (j, k = x, y, z).$$

In termen van de spinoperator $\hat{S} = \hbar \vec{\sigma} / 2$ wordt de dichtheidsmatrix dan gegeven door

$$\rho = \frac{1}{2} (I + \vec{P} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}, \quad \vec{P} = [\vec{\sigma}] = \frac{2}{\hbar} [\hat{S}] \in \mathbb{R}^3. \quad (149)$$

De dichtheidsmatrix wordt vastgelegd door drie (reële) parameters $P_{x,y,z}$, die samen de polarisatievector \vec{P} van het ensemble vormen. Dat ρ drie vrijheidsgraden heeft is relatief eenvoudig te begrijpen. Een complexe 2×2 matrix die hermitisch is en waarvan het spoor gelijk is aan 1 wordt vastgelegd door $2 \times (2 \times 2) \times \frac{1}{2} - 1 = 3$ onafhankelijke reële parameters.

De fysische interpretatie van de polarisatievector \vec{P} : hiertoe maken we gebruik van het feit dat de eigenwaarden λ van de matrix 2ρ moeten voldoen aan

$$(1 + P_z - \lambda)(1 - P_z - \lambda) - P_x^2 - P_y^2 = (1 - \lambda)^2 - \vec{P}^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = 1 \pm |\vec{P}|. \quad (150)$$

Dus in diagonaalvorm ziet de dichtheidsmatrix er als volgt uit

$$\rho^{\text{diag}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + |\vec{P}| & 0 \\ 0 & 1 - |\vec{P}| \end{pmatrix}, \quad (151)$$

hetgeen wordt verkregen uit vergelijking (149) door de kwantisatie-as (z -as) parallel aan \vec{P} te leggen. Definieer nu de spineigenvectoren χ_{\uparrow} en χ_{\downarrow} voor spinkwantisatie langs \vec{P} , zodat $(\vec{P} \cdot \vec{\sigma})\chi_{\uparrow} = |\vec{P}|\chi_{\uparrow}$ en $(\vec{P} \cdot \vec{\sigma})\chi_{\downarrow} = -|\vec{P}|\chi_{\downarrow}$. Dan volgt uit vergelijking (147) dat

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(1 + |\vec{P}|) &= W_{\uparrow} = \frac{N_{\uparrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} & \text{en} & \quad \frac{1}{2}(1 - |\vec{P}|) = W_{\downarrow} = \frac{N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} \\ \Rightarrow |\vec{P}| &= W_{\uparrow} - W_{\downarrow} = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} \in [0, 1], \end{aligned} \quad (152)$$

waarbij N_{\uparrow} en N_{\downarrow} het aantal spin-1/2 deeltjes telt in de spintoestanden χ_{\uparrow} en χ_{\downarrow} . Op die manier is $|\vec{P}|$ dus te interpreteren als de polarisatiegraad van het beschouwde ensemble en $\vec{e}_p = \vec{P}/|\vec{P}|$ als de polarisatierichting.

Speciale gevallen:

- Als het ensemble in een pure spintoestand zit, dan geldt op grond van vergelijking (141) dat $\rho = \rho^2$. Hieruit leiden we onmiddellijk af dat ρ nu vastgelegd moet zijn door slechts twee reële parameters en een teken (vanwege het kwadrateren). Met behulp van vergelijking (149) alsmede de relatie

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) \stackrel{(B.6)}{=} (\vec{A} \cdot \vec{B})I + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \quad (\vec{A}, \vec{B} \in \mathbb{R}^3) \quad (153)$$

kan de eis $\rho = \rho^2$ namelijk worden uitgewerkt tot

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{P} \cdot \vec{\sigma}) = \rho^2 = \frac{1}{4}(I + \vec{P} \cdot \vec{\sigma})^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1 + \vec{P}^2}{2} I + \vec{P} \cdot \vec{\sigma} \right) \Rightarrow |\vec{P}| = 1.$$

In diagonaalvorm wordt de dichtheidsmatrix dan gegeven door de projectie-operator

$$\rho_{\text{puur}}^{\text{diag}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} : \text{volledige polarisatie met kwantisatie-as parallel aan } \vec{P}. \quad (154)$$

Er is dus sprake van maximale orde (lees: maximale kwantuminformatie), met alle deeltjes gepolariseerd in de richting van de polarisatievector \vec{P} .

- Voor $0 < |\vec{P}| < 1$ is het ensemble gedeeltelijk gepolariseerd en geldt de ongelijkheid $\frac{1}{2} < \text{Tr}(\rho^2) = \frac{1}{2}(1 + \vec{P}^2) < 1$.
- We spreken van een ongepolariseerd ensemble als $|\vec{P}| = 0$. In dat geval geldt dat

$$\boxed{\rho_{\vec{P}=\vec{0}} = \frac{1}{2} I}, \quad (155)$$

zodat $\text{Tr}(\rho^2)$ de minimale waarde $\text{Tr}(\rho^2) = \frac{1}{2}$ aanneemt. In deze situatie zitten er evenveel deeltjes in de spin “ \uparrow ” toestand als in de spin “ \downarrow ” toestand. Er is dus sprake van een gelijk mengsel van twee volledig gepolariseerde deelensembles, één met spin parallel aan de kwantisatie-as en één met spin antiparallel aan de kwantisatie-as. Let wel: de richting van de kwantisatie-as kan hier willekeurig gekozen worden! Een ongepolariseerd spin-1/2 ensemble is in feite een voorbeeld van een volledig random ensemble met maximale wanorde (zie §2.4).

- Een ensemble (bundel) met polarisatiegraad $|\vec{P}|$ kan nu worden opgevat als zijnde samengesteld uit een volledig gepolariseerd deel en een volledig ongepolariseerd deel. In diagonaalvorm geldt immers:

$$\rho^{\text{diag}} \stackrel{(151)}{=} |\vec{P}| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1 - |\vec{P}|}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Keuzevrijheid: de dichtheidsmatrix (155) voor een volledig random ensemble hangt niet af van de gekozen representatie van de beschouwde ruimte, in tegenstelling tot de dichtheidsmatrix (154) voor een puur ensemble. Verder is een gegeven gemengd ensemble op verschillende manieren te ontbinden in pure ensembles. Bijvoorbeeld resulteert een mengsel waarin 20% van de deeltjes in de positieve x -richting gepolariseerd zijn, 20% in de negatieve x -richting, 30% in de positieve z -richting en 30% in de negatieve z -richting in een netto ongepolariseerd ensemble, want $0.2(\rho_{\vec{P}=\vec{e}_x} + \rho_{\vec{P}=-\vec{e}_x}) + 0.3(\rho_{\vec{P}=\vec{e}_z} + \rho_{\vec{P}=-\vec{e}_z}) = \frac{1}{2} I$.

2.3 De bewegingsvergelijking voor de dichtheidsoperator

De volgende stap op weg naar de kwantumstatistiek is het bepalen van de bewegingsvergelijking voor de dichtheidsoperator in het Schrödingerbeeld. Beschouw hiertoe een statistisch mengsel van pure toestanden dat op $t = t_0$ wordt gekarakteriseerd door de dichtheidsoperator

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_{\alpha=1}^N W_{\alpha} |\alpha(t_0)\rangle \langle \alpha(t_0)|. \quad (156)$$

Neem aan dat de gewichten W_{α} van het statistische mengsel niet van de tijd afhangen, dan geldt voor de tijdsevolutie van de dichtheidsoperator

$$|\alpha(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\alpha(t_0)\rangle \Rightarrow \hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha=1}^N W_{\alpha} |\alpha(t)\rangle \langle \alpha(t)| = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{\dagger}(t, t_0). \quad (157)$$

Zoals in het college Kwantummechanica 2 is aangetoond voldoet bovenstaande evolutieoperator $\hat{U}(t, t_0)$ aan de differentiaalvergelijking

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad (158)$$

waarbij $\hat{H}(t)$ de Hamilton-operator is behorende bij het type systeem waaruit het ensemble is opgebouwd. Hieruit volgt dan de bewegingsvergelijking voor de dichtheidsoperator:

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]}, \quad (159)$$

hetgeen bekend staat onder de naam Liouville-vergelijking. Dit is het kwantummechanische analogon van de bewegingsvergelijking voor de faseruimtewaarschijnlijkheidsdichtheid in de klassieke statistische mechanica, die in termen van een Poissonhaakje te schrijven is als $\partial\rho_{\text{cl}}/\partial t = -\{\rho_{\text{cl}}, \mathcal{H}_{\text{cl}}\}$. Vandaar dat $\hat{\rho}$ de ‘‘dichtheidsoperator’’ wordt genoemd.

Let wel: $\hat{\rho}(t)$ heeft niet de typische tijdsevolutie die je zou verwachten voor een kwantummechanische operator, immers $\hat{\rho}(t)$ is gedefinieerd in termen van toestandsfuncties. Derhalve is de dichtheidsoperator tijdsafhankelijk in het Heisenbergbeeld en tijdsafhankelijk in het Schrödingerbeeld, in tegenstelling tot een normale kwantummechanische operator.

Tijdsevolutie van het ensemblagemiddelde van de dynamische variabele \mathcal{A} : het ensemblagemiddelde $[\hat{A}]$ zoals gedefinieerd in §2.1 voldoet aan de evolutievergelijking

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [\hat{A}] &\stackrel{(137)}{=} \frac{d}{dt} \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \text{Tr}\left(\hat{\rho} \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right) + \text{Tr}\left(\frac{d\hat{\rho}}{dt} \hat{A}\right) \\ &\stackrel{(159)}{=} \text{Tr}\left(\hat{\rho} \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right) - \frac{i}{\hbar} \text{Tr}(\hat{H}\hat{\rho}\hat{A} - \hat{\rho}\hat{H}\hat{A}) = \text{Tr}\left(\hat{\rho} \frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right) - \frac{i}{\hbar} \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}\hat{H} - \hat{\rho}\hat{H}\hat{A}) \\ &\stackrel{(137)}{=} \boxed{\left[\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \right] - \frac{i}{\hbar} [\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}] = \frac{d}{dt} [\hat{A}]}, \end{aligned} \quad (160)$$

waarbij $\partial\hat{A}/\partial t$ betrekking heeft op de expliciete tijdsafhankelijkheid van \hat{A} . In de voorlaatste stap is gebruikt dat het spoor niet verandert onder cyclische permutaties van de operatoren, d.w.z. $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$. De evolutievergelijking (160) heeft hiermee dezelfde vorm als de evolutievergelijking voor de kwantummechanische verwachtingswaarde van de dynamische variabele \mathcal{A} . Echter, nu is er wel twee keer gemiddeld!

2.4 Kwantummechanische ensembles in thermisch evenwicht

Zoals we hebben gezien is er een enorm verschil tussen pure ensembles (met maximale orde) en volledig random ensembles (met maximale wanorde). We gaan dit verschil nu eerst in wat meer algemeenheid onder de loep nemen.

Laat $\{|k\rangle\}$ een orthonormale set eigentoestanden zijn van $\hat{\rho}$ bij de eigenwaarden $\{\rho_k\}$, zodanig dat deze eigentoestanden samen de (gereduceerde) D -dimensionale ruimte opspannen waarop de mogelijke pure toestandsfuncties van de deelensembles gedefinieerd zijn. Deze dimensionaliteit D geeft dus het aantal onafhankelijke kwantumtoestanden aan die

mogelijk zijn binnen de ruimte waarop de systemen worden beschouwd. Zo heeft de dichtheidsmatrix in de spin-1/2 spinruimte bijvoorbeeld dimensionaliteit $D = 2$. Ten opzichte van bovenstaande basis geldt

$$\rho_{\text{puur}} = \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 0 & & & \emptyset \\ & & & 1 & & \\ & & & & 0 & \\ \emptyset & & & & & \ddots \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad \text{vs} \quad \rho_{\text{random}} = \frac{1}{D} \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \emptyset \\ & & \ddots & & & \\ & & & \emptyset & & 1 \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Voorbeelden van deze beide extreme vormen van de dichtheidsmatrix zijn gegeven in vergelijkingen (154) en (155) in §2.2. Bij het pure ensemble is de dichtheidsmatrix de projectie-operator op de bijbehorende pure toestand, hetgeen afhangt van de gekozen representatie van de D -dimensionale ruimte. Bij het volledig random ensemble krijgt elk van de orthonormale basistoestanden hetzelfde statistische gewicht $1/D$, zodat $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$. Elke toestand is dan even waarschijnlijk en de dichtheidsmatrix is proportioneel met de D -dimensionale eenheidsmatrix, hetgeen nou juist niet verandert bij overgang naar een andere representatie.

Om het verschil beter te kunnen kwantificeren voeren we de volgende grootte in:

$$\sigma \equiv -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \stackrel{\text{voll.}}{=} -\sum_{k,k'=1}^D \langle k|\hat{\rho}|k'\rangle \langle k'|\ln \hat{\rho}|k\rangle = -\sum_{k=1}^D \rho_k \ln(\rho_k) \equiv \frac{S}{k_B}, \quad (161)$$

waarbij ρ_k de waarschijnlijkheid is om een systeem in de pure basistoestand $|k\rangle$ te vinden. Deze grootte is minimaal voor pure toestanden en maximaal voor een volledig random ensemble:

$$\sigma_{\text{puur}} = 0 \quad \text{vs} \quad \sigma_{\text{random}} = -\sum_{k=1}^D \frac{1}{D} \ln(1/D) = \ln(D). \quad (162)$$

Dat σ_{random} maximaal is zal in §2.4.3 worden bewezen. In overeenstemming met de klassieke thermodynamica kan uit $\sigma = S/k_B$ en $\sigma_{\text{random}} = \ln(D)$ worden afgeleid dat de grootte S te interpreteren is als de kwantummechanische entropie⁴ en dat k_B niets anders is dan de welbekende constante van Boltzmann. Je zou zelfs kunnen zeggen dat deze definitie beter is dan de klassieke definitie. In de klassieke mechanica bestaat het concept

⁴Deze entropiedefinitie wordt ook in de informatietheorie gebruikt in de vorm van de zogenaamde Shannon-entropie $-\sum_k P_k \ln(P_k)$, hetgeen de inverse maat is voor de hoeveelheid informatie die besloten ligt in de waarschijnlijkheidsverdeling $\{P_1, \dots, P_N\}$. Bij elk type waarschijnlijkheidsverdeling hoort zo een bepaald type ensemble. Voor een kanoniek ensemble zal in het college Statistische Mechanica een expliciet verband worden gelegd tussen de thermodynamische en kwantummechanische entropiedefinities.

van tellen van toestanden helemaal niet en kan er hooguit worden gewerkt met faseruimte-volumen die door een willekeurige normeringsfactor dimensieloos moeten worden gemaakt. Derhalve is de klassieke entropie slechts op een additieve constante na te definiëren. In de QM is er wel een natuurlijke tel/normeringseenheid in de vorm van \hbar .

2.4.1 Thermisch evenwicht (thermodynamisch postulaat)

Een kwantummechanisch ensemble heet in thermisch evenwicht te zijn als het effectief aan de evenwichtsvoorwaarden

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \hat{H} = 0 \quad \text{en} \quad \frac{d}{dt} \hat{\rho} = 0} \xrightarrow{(159)} [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0 \quad (163)$$

voldoet en als de bijbehorende constante entropie maximaal is. Deze laatste voorwaarde voor de entropie is het kwantummechanische analogon van de klassieke wet van entropietoename voor macroscopische systemen in niet-evenwichtsconfiguraties (tweede wet van de thermodynamica).

In thermisch evenwicht zijn nu alle gemiddelde systeemgrootheden $[\hat{A}]$ constant, vooropgesteld dat $\partial \hat{A} / \partial t = 0$. Een voorbeeld hiervan is de gemiddelde systeemenergie, d.w.z. $\hat{A} = \hat{H}$.

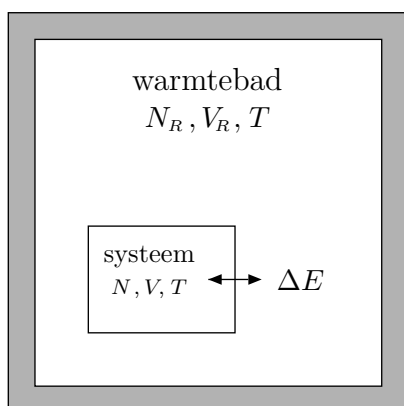
Bewijs : $\frac{d}{dt} [\hat{A}] \xrightarrow{(160), \partial \hat{A} / \partial t = 0} \text{Tr} \left(\frac{d\hat{\rho}}{dt} \hat{A} \right) \xrightarrow{(163)} 0$.

In thermisch evenwicht commuteert de dichtheidsoperator dus met de Hamilton-operator en is er een simultane orthonormale set eigenfuncties $\{|k\rangle\}$ bij zowel \hat{H} als $\hat{\rho}$:

$$\hat{H}|k\rangle = E_k|k\rangle \quad \text{en} \quad \hat{\rho}|k\rangle = \rho_k|k\rangle. \quad (164)$$

Aan de hand van deze basis gaan we in § 2.4.2–2.4.4 de entropie maximaliseren voor een drietal verschillende situaties.

2.4.2 Kanonieke ensembles (J.W. Gibbs, 1902)



(N, V, T)-ensemble



gesloten fles in een waterreservoir

Beschouw nu een stelsel met een vast aantal N identieke deeltjes in een vast volume V . Neem verder aan dat het beschouwde stelsel in thermisch evenwicht is met een qua vrijheidsgraden veel groter warmtebad, waarmee het in zwak energiecontact staat en waarmee het samen een geïsoleerd geheel (gesloten systeem) vormt.

Zwak energiecontact: met een zwak energiecontact wordt bedoeld dat het ingebedde systeem en het warmtebad energie kunnen uitwisselen, aangezien alleen de totale energie van het volledige gesloten systeem behouden is, maar dat de energieniveaus en energieën van warmtebad en ingebed systeem daarbij nauwelijks beïnvloed worden. Omdat de onderlinge interactie zo zwak is kunnen zowel het warmtebad als het systeem dan op elk willekeurig moment in een definitieve energie-eigentoestand zitten (scheiding van variabelen). Het systeem en warmtebad zijn dan nagenoeg onafhankelijk van elkaar op het zwakke energiecontact na, hetgeen de energie van het systeem tijdsafhankelijk maakt. Dit zwakke energiecontact is niet onbelangrijk, aangezien het systeem hierdoor in thermisch evenwicht kan komen met het warmtebad. Een zwak energiecontact ontstaat bijvoorbeeld als het systeem en warmtebad door een wand van elkaar gescheiden zijn, waarbij de energie door middel van botsingen met de atomen in de scheidingswand kan worden overgedragen. In dat geval voelt slechts een verwaarloosbare fractie van de opgesloten deeltjes de aanwezigheid van de scheidingswand als de gemiddelde de Broglie-golflengte van de deeltjes veel kleiner is dan de afmeting van het systeem (zie § 2.5). Dit is bijvoorbeeld van toepassing op systemen met een voldoende grote afmeting en/of een voldoende hoge temperatuur.

Het warmtebad bepaalt het mengsel: we zullen zien dat in thermisch evenwicht alle energietoestanden van een gesloten systeem gelijke waarschijnlijkheid hebben, d.w.z. er is sprake van een volledig random ensemble. Voor een vaste totale energie van het volledige gesloten systeem zal het aantal energietoestanden van het warmtebad het grootst zijn bij de hoogste energie van het warmtebad en dus de laagste energie van het ingebedde N -deeltjessysteem. De vrijheidsgraden van het grote warmtebad worden vervolgens uitgeïntegreerd, zodat ingebedde N -deeltjessystemen met de laagste energieën automatisch het hoogste statistische gewicht zullen krijgen. Dit geeft aanleiding tot een zogenaamd kanoniek ensemble dat ook wel (N, V, T) -ensemble wordt genoemd, hetgeen een statistisch mengsel is van N -deeltjessystemen in specifieke energie-eigentoestanden. Door het zwakke energiecontact met het warmtebad heeft zo'n N -deeltjessysteem in thermisch evenwicht namelijk geen vaste energiewaarde, maar is er wel sprake van een vast ensemblegemiddelde dat we zullen aangeven met \bar{E} .

De kanonieke dichtheidsoperator: om de dichtheidsoperator van een kanoniek ensemble in thermisch evenwicht te bepalen moeten we de entropie maximaliseren met als additionele randvoorwaarden dat $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ en $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H}) = [\hat{H}] \equiv \bar{E} = \text{constant}$. Gebruik

hiervoor de Lagrange-multiplier methode (zie App. C) en varieer naar zowel de eigenwaarden ρ_k als de Lagrange-multipliers, d.w.z.

$$0 = \delta\left(\sigma - \beta\{\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H}) - \bar{E}\} - \lambda\{\text{Tr}(\hat{\rho}) - 1\}\right) \stackrel{(164)}{=} \delta\left(\beta\bar{E} + \lambda - \sum_k \rho_k \{\ln(\rho_k) + \beta E_k + \lambda\}\right)$$

voor alle variaties $\delta\rho_k$, $\delta\beta$ en $\delta\lambda$. Let wel: er hoeft hier niet gevarieerd te worden naar de energie-eigenwaarden E_k , aangezien die energie-eigenwaarden bij een zwak energiecontact onafhankelijk zijn van het statistische mengsel. Uit de Lagrange-multiplier methode volgt automatisch dat aan de randvoorwaarden moet worden voldaan en dat tevens

$$\forall_{\delta\rho_k} \sum_k \delta\rho_k \{\ln(\rho_k) + 1 + \beta E_k + \lambda\} = 0 \quad \Rightarrow \quad \rho_k = \exp(-1 - \lambda) \exp(-\beta E_k) .$$

De Lagrange-multiplier λ kan nu geëlimineerd worden door middel van de randvoorwaarde

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \exp(-1 - \lambda) \sum_{k'} \exp(-\beta E_{k'}) = 1 ,$$

zodat voor de eigenwaarden ρ_k geldt dat

$$\rho_k = \frac{\exp(-\beta E_k)}{\sum_{k'} \exp(-\beta E_{k'})} . \quad (165)$$

In deze sommen loopt de sommatie over alle verschillende N -deeltjes energie-eigenwaarden, inclusief de volledige ontaarding van de energieniveaus. Aan de hand van de Lagrange-multiplier β definiëren we vervolgens de temperatuur van het beschouwde ensemble:

$$\boxed{T \equiv \frac{1}{k_B \beta}} . \quad (166)$$

Door het contact met het warmtebad is er uit de volledige wanorde van het gesloten systeem orde geschapen in de energiedistributie van het ingebedde N -deeltjes-systeem. Let wel: als de N -deeltjesgrondtoestand niet ontaard is, dan kan het kanoniek ensemble in de lage-temperatuurlimiet $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) overgaan in een puur ensemble waarbij alle N -deeltjessystemen in de grondtoestand zitten.

Tenslotte wordt de kanonieke partitiefunctie (normeringsfactor)

$$\boxed{Z_N(T) \equiv \sum_{k'} \exp(-\beta E_{k'}) = \sum_{k'} \langle k' | \exp(-\beta \hat{H}) | k' \rangle = \text{Tr}(\exp(-\beta \hat{H}))} \quad (167)$$

ingevoerd, zodat de dichtheidsoperator van een kanoniek ensemble in spectrale decompositie te schrijven is als

$$\hat{\rho} \stackrel{(164)}{=} \sum_k \rho_k |k\rangle\langle k| \stackrel{(165)}{=} \sum_k \frac{\exp(-\beta E_k)}{Z_N(T)} |k\rangle\langle k| = \frac{1}{Z_N(T)} \exp(-\beta \hat{H}) \sum_k |k\rangle\langle k|$$

$$\xrightarrow{\text{voll.}} \boxed{\hat{\rho}(\hat{H}) = \frac{1}{Z_N(T)} \exp(-\beta \hat{H}) = \frac{\exp(-\beta \hat{H})}{\text{Tr}(\exp(-\beta \hat{H}))}} . \quad (168)$$

De label N in $Z_N(T)$ slaat op het aantal deeltjes waaruit het beschouwde type ingebedde systeem bestaat. Een gemiddelde fysische grootheid van het ingebedde systeem wordt dan gegeven door het ensemblegemiddelde

$$\boxed{[\hat{A}] = \frac{1}{Z_N(T)} \text{Tr}(\hat{A} \exp(-\beta \hat{H}))}, \quad (169)$$

zodat de gemiddelde systeemenergie uit de partitiefunctie kan worden afgeleid:

$$\boxed{\bar{E} = [\hat{H}] = \frac{\text{Tr}(\hat{H} \exp(-\beta \hat{H}))}{Z_N(T)} = \frac{-\partial Z_N(T)/\partial \beta}{Z_N(T)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z_N(T))}. \quad (170)$$

Deeltjesaantal en het kanoniek-ensembleconcept: de vaste systemen van een kanoniek ensemble kunnen even zo goed uit één enkel deeltje bestaan als uit een macroscopisch aantal deeltjes (zoals een gas). Bedenk wel dat voor een 1-deeltjessysteem het kanoniek-ensembleconcept inhoudt dat het beschouwde deeltje uitsluitend zwak energiecontact mag hebben met de deeltjes van het warmtebad. Elke verdere invloed van het warmtebad is per definitie weggelaten. Dit is over het algemeen niet correct als het beschouwde deeltje in contact staat met identieke soortgenoten en de deeltjesdichtheid niet laag is, zodat de kwantummechanische overlap van de deeltjes relevant wordt. Dan moet namelijk ook de effectieve kwantummechanische interactie geïnduceerd door de (anti)symmetrisatieprocedure worden meegenomen. Vooral bij grote deeltjesaantallen gaan de speciale kwantummechanische eigenschappen van identieke veeldeeltjessystemen dan een rol spelen (zie § 2.5–2.7). In onderstaande twee voorbeelden gaan we nu desondanks twee kanonieke ensembles bekijken waarvan de systemen uit één enkel deeltje bestaan. De reden hiervoor is dat we eerst de link willen leggen met de klassieke statistische fysica alvorens de specifieke kwantummechanische aspecten onder de loep te nemen. Het zal eenvoudiger blijken te zijn om dat laatste met het grootkanoniek-ensembleconcept aan te pakken.

Equipartitie van energie: als standaardvoorbeeld van een kanoniek ensemble beschouwen we een kanoniek ensemble waarvan de systemen bestaan uit één enkel vrij spin-0 deeltje met massa m dat opgesloten zit in een macroscopische afgesloten ruimte (doos). Omdat kwantummechanische veeldeeltjesaspecten bij een 1-deeltjessysteem natuurlijk nog geen rol spelen, zal de gemiddelde energie per deeltje in dat geval moeten voldoen aan het klassieke principe van equipartitie van energie voor een ideaal gas. Dit zegt dat elke kinetische en elastische vrijheidsgraad van het beschouwde type systeem (d.w.z. een plaats/impulsvrijheidsgraad die kwadratisch voorkomt in de Hamiltoniaan) een bijdrage $k_B T/2$ zal leveren tot de gemiddelde energie. Dit wordt inderdaad bevestigd door de kwantummechanische berekening (zie opgave 14 van het werkcollege), zodat onze kwantummechanische definities van de entropie, temperatuur en constante van Boltzmann dus in ieder geval consistent zijn met de klassieke thermodynamische definities.

Voorbeeld: magnetisatie. Beschouw een kanoniek ensemble waarvan de systemen bestaan uit één enkel vrij elektron dat onder invloed staat van een constant homogeen magneetveld in de z -richting, $\vec{\mathcal{B}} = \mathcal{B}\vec{e}_z$. In de spinruimte geeft dit aanleiding tot een interactie

$$\hat{H}_B^{\text{spin}} = -\hat{\mathcal{M}}_S \cdot \vec{\mathcal{B}} = \frac{2\mu_B \mathcal{B}}{\hbar} \hat{S}_z, \quad (171)$$

in termen van het Bohr-magneton μ_B . De volledige Hamilton-operator $\hat{H} = \hat{H}^{\text{plaats}} + \hat{H}_B^{\text{spin}}$ van het elektron commuteert met \hat{S}_z , zodat hetzelfde moet gelden voor $\hat{\rho}(\hat{H})$. Ten opzichte van een basis van eigenvectoren van \hat{S}_z is de dichtheidsmatrix dus diagonaal in de spinruimte. Voor een gegeven ruimtelijk energieniveau heeft de dichtheidsoperator in de spinruimte de volgende vorm:

$$\rho^{\text{spin}} = \frac{1}{\exp(-\beta\mu_B \mathcal{B}) + \exp(\beta\mu_B \mathcal{B})} \begin{pmatrix} \exp(-\beta\mu_B \mathcal{B}) & 0 \\ 0 & \exp(\beta\mu_B \mathcal{B}) \end{pmatrix}. \quad (172)$$

Voor de polarisatievector van dit ensemble geldt dan

$$\begin{aligned} \rho^{\text{spin}} &= \frac{\cosh(\beta\mu_B \mathcal{B}) I - \sinh(\beta\mu_B \mathcal{B}) \sigma_z}{2 \cosh(\beta\mu_B \mathcal{B})} = \frac{1}{2} (I - \tanh(\beta\mu_B \mathcal{B}) \sigma_z) \\ &\xrightarrow{(149)} \vec{P} = -\tanh(\beta\mu_B \mathcal{B}) \vec{e}_z = \frac{2}{\hbar} [\hat{S}_z] \vec{e}_z. \end{aligned} \quad (173)$$

Hieruit kan de volgende formule worden afgeleid voor de magnetisatie, d.w.z. het gemiddeld magnetisch moment per elektron in de richting van het magneetveld:

$$\overline{M}_S \equiv \frac{1}{\mathcal{B}} [\hat{\mathcal{M}}_S \cdot \vec{\mathcal{B}}] = -\frac{2\mu_B}{\hbar} [\hat{S}_z] = \mu_B \tanh(\beta\mu_B \mathcal{B}). \quad (174)$$

Als nu $\beta\mu_B \mathcal{B} \ll 1$, omdat bijvoorbeeld het magneetveld zwak is of de temperatuur hoog, dan geldt de welbekende wet van Curie:

$$\overline{M}_S \approx \mu_B (\beta\mu_B \mathcal{B}) \stackrel{(166)}{=} \frac{\mu_B^2}{k_B T} \mathcal{B} \Rightarrow \chi_s(T) \equiv \left(\frac{d\overline{M}_S}{d\mathcal{B}} \right)_{\mathcal{B}=0} = \frac{\mu_B^2}{k_B T} \propto T^{-1}, \quad (175)$$

waarbij $\chi_s(T)$ de paramagnetische susceptibiliteit van het spinensemble wordt genoemd.

2.4.3 Microkanonieke ensembles

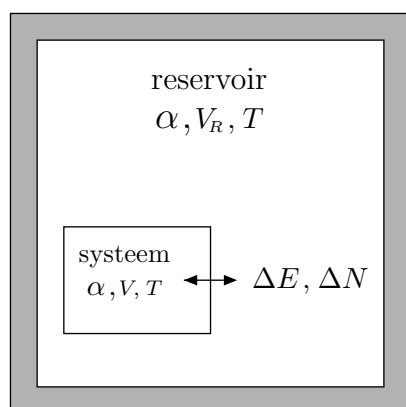
Als in bovenstaande afleiding de randvoorwaarde $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H}) = \bar{E}$ niet wordt opgelegd, dan wordt bij maximalisering van de entropie het ensemble met de maximale wanorde gevonden. Er is dan namelijk geen uitgeïntegreerd warmtebad om enige orde in het ensemble te creëren. We spreken in dat geval van een microkanoniek ensemble of ook wel van een (N, V, E) -ensemble, hetgeen de thermodynamische eigenschappen vastlegt van een gesloten systeem in thermisch evenwicht. Bij afwezigheid van energiecontact ligt de totale energie vast en niet slechts de gemiddelde waarde van de totale energie. Als we

aannemen dat de dichtheidsmatrix ρ dimensionaliteit D heeft, dan vinden we met behulp van de Lagrange-multiplier methode dat

$$\delta\left(\sigma - \lambda\{\text{Tr}(\hat{\rho}) - 1\}\right) \stackrel{(164)}{=} \delta\left(\lambda - \sum_{k=1}^D \rho_k \{\ln(\rho_k) + \lambda\}\right) = 0$$

voor alle variaties $\delta\rho_k$ en $\delta\lambda$. Hieruit volgt dat $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ en $\ln(\rho_k) + 1 + \lambda = 0$. Door nu de twee condities $\rho_k = \exp(-1 - \lambda)$ en $\text{Tr}(\hat{\rho}) = D \exp(-1 - \lambda) = 1$ te combineren, vinden we uiteindelijk de typische diagonale vorm $\rho_k = 1/D$ zoals die in §2.4 voor een volledig random ensemble is gegeven. Hiermee is tevens de bewering bewezen dat de dichtheidsmatrix van een volledig random ensemble aanleiding geeft tot volledig maximale entropie. Let wel: uit vergelijking (168) is af te lezen dat een microkanoniek ensemble overeenkomt met de hoge-temperatuurlimiet $T \rightarrow \infty$ ($\beta \rightarrow 0$) van een kanoniek ensemble.

2.4.4 Grootkanonieke ensembles (J.W. Gibbs, 1902)



(α, V, T) of (μ, V, T) -ensemble



open fles in een waterreservoir



Tenslotte beschouwen we een kwantummechanisch ensemble dat aan dezelfde eisen voldoet als een kanoniek ensemble, met uitzondering van het feit dat er nu naast uitwisseling van energie ook uitwisseling van deeltjes kan plaatsvinden met een reservoir. De veeldeeltjessystemen waaruit het ensemble is opgebouwd bevatten dus een variabel aantal deeltjes, maar de totale veeldeeltjes Hamilton-operator \hat{H}_{tot} van zo'n open veeldeeltjessysteem voldoet wel aan bepaalde deeltjesbehoudswetten.⁵ We weten dat de dichtheidsoperator een bewegingsconstante moet zijn en dat er uitsluitend orde ontstaat in het ensemble door het contact met het reservoir. Daarom verwachten we dat de dichtheidsoperator alleen zal afhangen van observabelen die horen bij die behouden grootheden die tussen reservoir en systeem kunnen worden uitgewisseld, d.w.z. in dit geval de totale veeldeeltjes Hamilton-operator en de behouden combinaties van totale teloperatoren. Voor het gemak zullen we

⁵Voor deeltjes zonder behoudswet, zoals thermische fotonen, is alleen het kanoniek-ensembleconcept te gebruiken. Dit zal nog nader worden toegelicht bij de bespreking van het fotongas in hoofdstuk 4.

aannemen dat het open systeem uit één type deeltje bestaat, d.w.z. er is geen sprake van een mengsel, én dat er geen reacties kunnen optreden die het deeltjesaantal kunnen veranderen (zoals deeltjesverval). In dat geval moet \hat{H}_{tot} dus netjes additief zijn, d.w.z. $[\hat{H}_{\text{tot}}, \hat{N}] = 0$, zodat \hat{N} een bewegingsconstante is. Op die manier heeft het deeltjesaantal dezelfde status gekregen als de energie bij een kanoniek ensemble, aangezien nu het open systeem geen vast deeltjesaantal heeft maar het volledige gesloten systeem wel. In thermisch en diffusief evenwicht wordt het resulterende type ensemble een grootkanoniek ensemble genoemd of ook wel een (α, V, T) -ensemble of (μ, V, T) -ensemble.

Naast de gemiddelde energie moet nu dus ook het gemiddeld aantal deeltjes van het open systeem als randvoorwaarde worden opgelegd bij het maximaliseren van de entropie. Gebruik hiervoor de totale teloperator \hat{N} die het totale aantal deeltjes van het open systeem telt en die dus eigenwaarden $0, 1, 2, \dots$ heeft. Aangezien naast de Hamilton-operator ook de dichtheidsoperator additief is, om zo een additieve entropie te garanderen, zal de teloperator commuteren met zowel de Hamilton-operator als de dichtheidsoperator. Wel zullen beide operatoren afhankelijk zijn van het precieze aantal deeltjes dat in het open systeem aanwezig is. Dit leidt tot de volgende set commensurabele observabelen: \hat{N} , $\hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N})$ en $\hat{\rho}(\hat{N})$, met bijbehorende orthonormale basis $\{|k, N\rangle\}$ die voldoet aan

$$\begin{aligned} \hat{N}|k, N\rangle &= N|k, N\rangle \quad , \quad \hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N})|k, N\rangle = E_k(N)|k, N\rangle \\ \text{en} \quad \hat{\rho}(\hat{N})|k, N\rangle &= \rho_k(N)|k, N\rangle . \end{aligned} \tag{176}$$

De grootkanonieke dichtheidsoperator: om de dichtheidsoperator van een grootkanoniek ensemble in thermisch en diffusief evenwicht te bepalen moeten we de entropie maximaliseren met als randvoorwaarden dat $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$, $[\hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N})] \equiv \bar{E}_{\text{tot}} = \text{constant}$ en $[\hat{N}] \equiv \bar{N} = \text{constant}$. Gebruik makende van de Lagrange-multiplier methode vinden we

$$\begin{aligned} 0 &\equiv \delta \left(\sigma - \alpha \{ [\hat{N}] - \bar{N} \} - \beta \{ [\hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N})] - \bar{E}_{\text{tot}} \} - \lambda \{ \text{Tr}(\hat{\rho}) - 1 \} \right) \\ &\stackrel{(176)}{=} \delta \left(\alpha \bar{N} + \beta \bar{E}_{\text{tot}} + \lambda - \sum_N \sum_k \rho_k(N) \{ \ln(\rho_k(N)) + \alpha N + \beta E_k(N) + \lambda \} \right) \end{aligned} \tag{177}$$

voor alle variaties $\delta \rho_k(N)$, $\delta \alpha$, $\delta \beta$ en $\delta \lambda$. Hieruit volgt automatisch dat aan de randvoorwaarden moet worden voldaan en dat

$$\forall \delta \rho_k(N) \quad \sum_N \sum_k \delta \rho_k(N) \{ \ln(\rho_k(N)) + 1 + \alpha N + \beta E_k(N) + \lambda \} = 0 .$$

Gecombineerd met de randvoorwaarde $\text{Tr}(\rho) = 1$ resulteert dit in

$$\rho_k(N) = \frac{\exp(-\beta E_k(N) - \alpha N)}{\sum_{N'} \sum_{k'} \exp(-\beta E_{k'}(N') - \alpha N')} . \tag{178}$$

De temperatuur T van het beschouwde ensemble wordt net als in vergelijking (166) gedefinieerd als $T \equiv 1/k_B\beta$. Tenslotte wordt de grootkanonieke partitiefunctie

$$\boxed{\mathcal{Z}(\alpha, T) \equiv \sum_{N'} \sum_{k'} \exp(-\beta E_{k'}(N') - \alpha N') \stackrel{(167)}{=} \sum_{N'} \exp(-\alpha N') Z_{N'}(T)} \quad (179)$$

ingevoerd, zodat de dichtheidsoperator van een grootkanoniek ensemble te schrijven is als

$$\boxed{\hat{\rho} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\alpha, T)} \exp(-\beta \hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N}) - \alpha \hat{N}) = \hat{\rho}(\hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N}), \hat{N})} \quad (180)$$

De grootheid $\exp(-\alpha)$ is op te vatten als de vluchtigheid van het beschouwde ensemble, hetgeen het gemak weergeeft waarmee een extra deeltje aan het open systeem is toe te voegen:

- als $\exp(-\alpha)$ klein is, dan domineren de bijdragen van kleine N -waarden en zijn kwantummechanische veeldeeltjesaspecten niet belangrijk;
- als $\exp(-\alpha)$ niet klein is, dan wordt deeltjesuitwisseling makkelijker en zijn kwantummechanische veeldeeltjesaspecten wel van belang.

Deze vluchtigheid wordt vaak geschreven als $\exp(\beta\mu)$, waarbij $\mu = -\alpha/\beta$ bekend staat onder de naam chemische potentiaal. De gemiddelde totale energie en het gemiddelde aantal deeltjes van het open systeem zijn nu regelrecht uit de grootkanonieke partitiefunctie af te leiden:

$$\boxed{\bar{E}_{\text{tot}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(\mathcal{Z}(\alpha, T)) \quad \text{en} \quad \bar{N} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln(\mathcal{Z}(\alpha, T))} \quad (181)$$

Opmerking: als er wel sprake is van chemische reacties, deeltjesverval of relativistische energieën, dan geldt er geen individueel deeltjesbehoud. Wel bestaan er bepaalde combinaties van deeltjesaantallen die behouden zijn. Bij het maximaliseren van de entropie dienen die behoudswetten dan op het niveau van ensemblagemiddelden als randvoorwaarden te worden opgelegd. Dit kan weer met behulp van de Lagrange-multiplier methode worden geïmplementeerd, waarbij elke behoudswet een specifieke Lagrange-multiplier en een daaraan gerelateerde chemische potentiaal zal hebben. Bijvoorbeeld kan er bij relativistische energieën deeltje–antideeltje paarcreatie optreden, zodat alleen het verschil tussen het aantal deeltjes en antideeltjes behouden is (hetgeen equivalent is met ladingsbehoud). Een ander voorbeeld is een statistisch mengsel van A -, B - en C -deeltjes waarvoor de reverseerbare reactie $A \rightleftharpoons B + C$ zich in chemisch evenwicht bevindt. In dat geval is de deeltjesaantalcombinatie $2N_A + N_B + N_C$ behouden.

Mogelijke realisatie: als er sprake is van een zeer groot aantal deeltjes binnen een macroscopisch volume, dan is een grootkanoniek ensemble rechtstreeks te realiseren door het macroscopische volume op te delen in zeer veel identieke cellen. De voorwaarde hierbij is dat de cellen zelf ook weer voldoende macroscopisch zijn om van een zwak energiecontact met het reservoir (d.w.z. de andere cellen) te kunnen spreken. Aan zo'n ensemble kunnen vervolgens herhaalde metingen worden verricht door deze metingen lokaal uit te voeren. Zo kan bijvoorbeeld de interne structuur van een ster worden bepaald door de ster op te delen in macroscopische volume-elementen die zeer klein zijn vergeleken bij de ster zelf (zie opgave 19 van het werkcollege). De relevante “meetbare” grootheden zijn in dat geval de lokale deeltjesdichtheden en de lokale totale energiedichtheid.

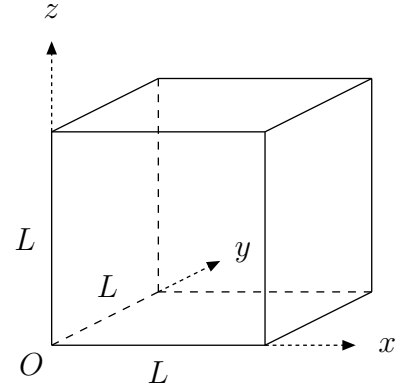
2.4.5 Even alles op een rijtje gezet

De verschillen tussen de drie ensemblevormen zitten in de toenemende mate van orde die door het contact met het reservoir wordt gecreëerd in het ingebedde systeem. In de microkanonieke situatie is dit contact zodanig zwak dat we net zo goed kunnen spreken van de afwezigheid van enig contact: E en N liggen vast. Thermisch evenwicht is dan equivalent met de afwezigheid van orde. In de kanonieke situatie is er sprake van energie-uitwisseling tussen reservoir en systeem, met behoud van totale energie. Omdat het reservoir zoveel meer vrijheidsgraden heeft dan het systeem zal er in thermisch evenwicht orde ontstaan in de energiemix van het systeem, met een voorkeur voor lagere energieën (en dus hogere reservoirenergieën). In de grootkanonieke situatie is er tevens deeltjesuitwisseling mogelijk en vertalen de bijbehorende deeltjesbehoudswetten zich in extra orde in de deeltjesmix van het systeem. De verschillende ensemblevormen leiden tot dezelfde fysische resultaten als de relatieve fluctuaties rond de thermische evenwichtswaarden \bar{E}_{tot} en \bar{N} zeer klein zijn, zodat de energie en het deeltjesaantal van het systeem effectief vastliggen. Naar keuze kan dan de meest geschikte (meestal grootkanonieke) ensemblevorm worden gebruikt. Dit geldt bijvoorbeeld voor systemen bestaande uit zeer veel deeltjes in verband met de extra factor $1/\sqrt{N}$ die dan in het algemeen optreedt in de gemiddelde relatieve spreidingen.

2.5 Fermi-gassen bij $T = 0$

Verscheidene fysische systemen kunnen modelmatig worden benaderd aan de hand van een N -deeltjessysteem bestaande uit een groot aantal niet-interagerende identieke fermionen die opgesloten zitten in een afgesloten ruimte (doos). Als de afmetingen van de doos en het aantal deeltjes N maar groot genoeg zijn, dan zal de precieze vorm van de doos niet van belang blijken te zijn in de beschouwing. Dit type veeldeeltjessysteem wordt een Fermi-gas genoemd. Voorbeelden van zulke fysische systemen zijn geleidingslektronen in metalen (zie § 2.5.3), zware kernen (zie § 2.5.4), compacte geïmplodeerde sterren (zie § 2.5.5), etc.. In deze voorbeelden zijn de relevante deeltjes elektronen, protonen en/of neutronen.

Voor de bepaling van de eigenschappen van zo'n Fermi-gas gaan we uit van een grote kubus met ribben L en met de oorsprong in één van de hoekpunten (zie plaatje). Het volume van deze kubus is dus $V = L^3$. We nemen eerst aan dat zich in deze kubus N vrije identieke fermionen met spin s en massa m bevinden. Situaties waarbij de deeltjes onder invloed staan van een constante attractieve potentiaal of een constant homogeen magneetveld komen daarna aan de beurt.



Voor de 1-deeltjes Hamilton-operator van een deeltje in een doos geldt

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) \quad , \quad V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{binnen de doos} \\ \infty & \text{anders} \end{cases} . \quad (182)$$

Deze (kinetische) 1-deeltjes Hamilton-operator hangt niet van de spin van het deeltje af. Derhalve gaan we nu eerst het ruimtelijke 1-deeltjes eigenwaardenprobleem oplossen en brengen vervolgens de ontarding ten gevolge van de spin van het deeltje in rekening. De ruimtelijke 1-deeltjes energie-eigenfuncties voldoen aan de ruimtelijke vergelijking

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \psi_{\vec{\nu}}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{\vec{\nu}}(\vec{r}) = E_{\nu} \psi_{\vec{\nu}}(\vec{r}) ,$$

$$\text{met } \psi_{\vec{\nu}}(\vec{r}) = 0 \text{ buiten de doos én op de rand van de doos} . \quad (183)$$

Voor de kubusvormige doos reduceert het probleem tot het oplossen van de welbekende eigenwaardenvergelijking voor een deeltje in een 1-dimensionale oneindige potentiaalput. De genormeerde ruimtelijke 1-deeltjes energie-eigenfuncties zijn dan staande golven binnen de kubus (zie App. A.1):

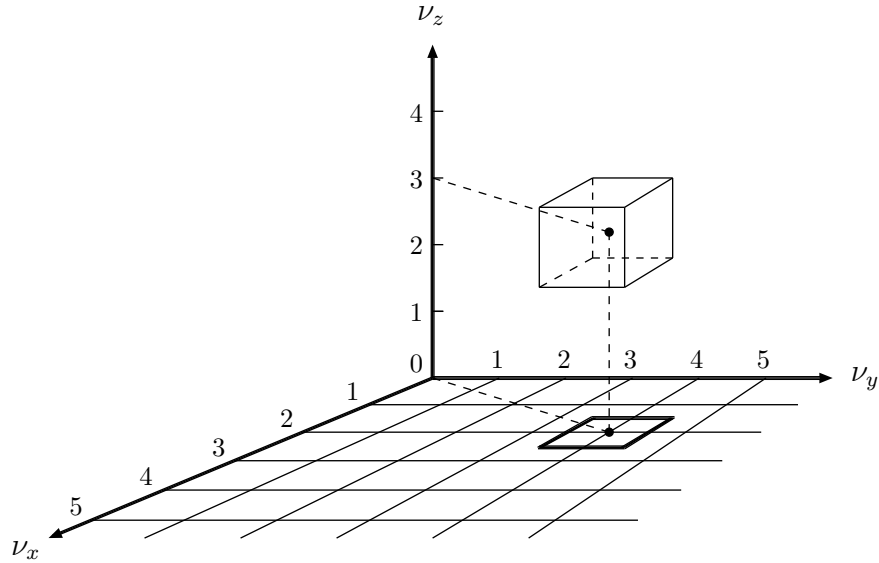
$$\psi_{\vec{\nu}}(\vec{r}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{\nu_x \pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{\nu_y \pi}{L} y\right) \sin\left(\frac{\nu_z \pi}{L} z\right) , \quad (184)$$

$$E_{\nu} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (\nu_x^2 + \nu_y^2 + \nu_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \vec{\nu}^2 \equiv \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \nu^2 \quad (\nu_{x,y,z} = 1, 2, \dots) .$$

Omdat E_{ν} slechts van $\nu = |\vec{\nu}|$ afhangt en niet van $\nu_{x,y,z}$ afzonderlijk, zijn vrijwel alle kinetische energieniveaus ontard. Toevoeging van het spingedeelte levert tenslotte

$$\psi_{\vec{\nu}, m_s}(\vec{r}, \sigma) = \psi_{\vec{\nu}}(\vec{r}) \chi_{s, m_s}(\sigma) \quad (m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s) , \quad (185)$$

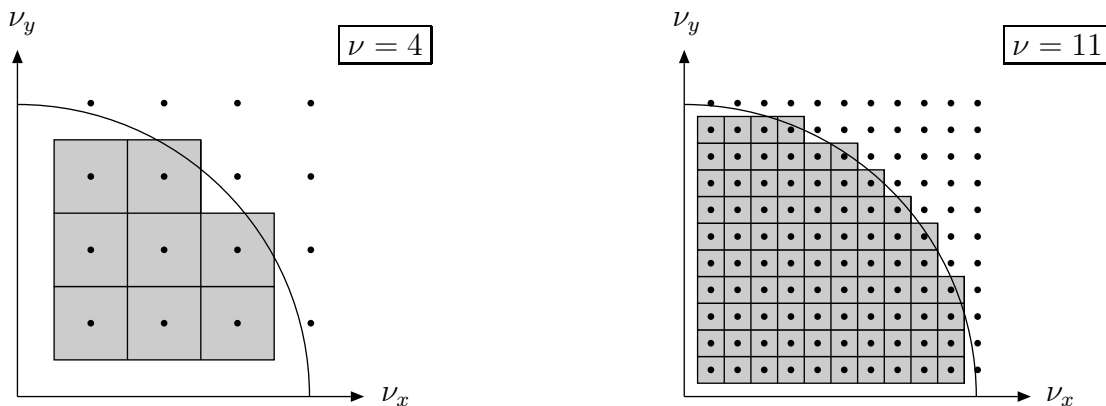
waarbij de 1-deeltjes spinvector $\chi_{s, m_s}(\sigma)$ zoals gebruikelijk een spin- s deeltje beschrijft met spincomponent $m_s \hbar$ langs de z -as. Op die manier wordt de ontardingsgraad van de energie-eigenwaarden E_{ν} verhoogt met een factor $2s+1$.



Nu gaan we gebruik maken van het feit dat de doos macroscopische afmetingen heeft. De 1-deeltjes energieniveaus liggen dan zeer dicht bij elkaar, zodat het beter is om te gaan werken met een continue toestandsdichtheid $D(E_{\text{kin}})$ die het aantal 1-deeltjes kwantumtoestanden telt per eenheid van kinetische energie. In deze continuümlimiet wordt het aantal 1-deeltjes kwantumtoestanden met kinetische energie in het interval $(E_{\text{kin}}, E_{\text{kin}} + dE_{\text{kin}})$ simpelweg gegeven door $D(E_{\text{kin}})dE_{\text{kin}}$. Om $D(E_{\text{kin}})$ te bepalen is het verstandig om de gekwantiseerde golfvector

$$\vec{k} = \pi \vec{\nu} / L \quad (\nu_{x,y,z} = 1, 2, \dots) \quad (186)$$

in te voeren, de bijbehorende toestandsdichtheid $D(k)$ af te leiden en tenslotte de relatie $E_{\text{kin}}(k) = \hbar^2 k^2 / (2m)$ voor de kinetische energie te gebruiken. Zoals in bovenstaand plaatje is aangegeven bevat een eenheidskubus in de $\vec{\nu}$ -ruimte precies één ruimtelijke kwantumtoestand en dus $2s+1$ volledig gespecificeerde kwantumtoestanden (inclusief spin). Omdat moet gelden dat $\nu_{x,y,z} > 0$, bevinden alle toegestane $\vec{\nu}$ -waarden zich in één octant van de $\vec{\nu}$ -ruimte.



Het aantal toestanden $N(k)$ met golfvector kleiner dan $k = \pi\nu/L$ is voor niet te kleine waarden van ν in zeer goede benadering gerelateerd aan het overeenkomstige volume in de $\vec{\nu}$ -ruimte (zoals in het voorgaande plaatje is geschetst voor een 2-dimensionaal rooster):

$$N(k) = \int_0^k dk' D(k') \approx (2s+1) \frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi \nu^3 \right) \stackrel{(186)}{=} \frac{2s+1}{6\pi^2} V k^3. \quad (187)$$

Hieruit halen we door middel van differentiatie dat

$$\boxed{D(k) \approx \frac{d}{dk} N(k) = \frac{2s+1}{2\pi^2} V k^2}. \quad (188)$$

Deze uitdrukking is in feite algemeen geldig voor een willekeurig spin- s deeltje in een doos. Pas bij de overgang naar $D(E_{\text{kin}})$ treedt er verschil op tussen bijvoorbeeld relativistische en niet-relativistische situaties, omdat de relatie tussen E_{kin} en k dan anders is (zie opgave 17 van het werkcollege).

In de hier beschouwde niet-relativistische situatie geldt de relatie $k = \sqrt{2mE_{\text{kin}}/\hbar^2}$, zodat

$$\boxed{D(E_{\text{kin}}) = \left(\frac{dk}{dE_{\text{kin}}} \right) D(k) = \frac{2s+1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} V E_{\text{kin}}^{1/2}}. \quad (189)$$

Het is duidelijk dat deze benadering niet werkt voor hele lage kinetische 1-deeltjes energieën, aangezien bijvoorbeeld voor $k < \pi/L$ helemaal geen energieniveaus mogelijk zijn. In dit lage-energiebereik manifesteert zich het discrete karakter van de energieniveaus ten gevolge van de eindigheid van de doos, die in feite helemaal niet als macroscopisch te beschouwen is voor de Broglie-golflengten $\lambda(k) = 2\pi/k = \mathcal{O}(L)$. Zoals we zullen zien spelen zulke lage kinetische energieën een relevante rol bij een bosonisch gas als de temperatuur zeer laag is (zie § 2.7), maar niet bij een Fermi-gas, omdat het aantal verschillende laag-energetische kinetische energieniveaus $N(k) \stackrel{(187)}{=} \mathcal{O}[V/\lambda^3(k)]$ niet groot is.

Verder zien we dat het aantal toestanden per eenheid van kinetische energie en per eenheid van volume van de doos in de continuümlimiet wordt gegeven door $D(E_{\text{kin}})/V$, hetgeen onafhankelijk is van het volume. In de continuümlimiet doet de precieze vorm van de doos er dan ook in het algemeen niet toe. Als S het oppervlak is van de rand van de macroscopische doos, dan wordt de invloed van de rand op $D(E_{\text{kin}})$ onderdrukt met een factor $S/(kV)$ (zie opgave 16 van het werkcollege), hetgeen aangeeft dat er alleen kwantummechanische gevoeligheid voor de rand is binnen een afstand van orde $\lambda(k)$ vanaf de rand. Deze onderdrukkingsfactor is klein als de kinetische energie hoog genoeg is, zoals gemiddeld gezien geldt voor een Fermi-gas met een voldoende groot aantal deeltjes.

Fermi-gas in een constante attractieve potentiaal: zoals we in §2.5.3 en §2.5.4 zullen zien wordt een Fermi-gas in bepaalde fysische scenario's binnen de doos gehouden door een constante attractieve potentiaal $V = -V_0 < 0$ binnen de doos. Dit heeft totaal geen invloed op de kinetische energieniveaus en bijbehorende eigenfuncties die zijn afgeleid in het voorgaande. Wel zal elk 1-deeltjes energieniveau een verschuiving

$$E_\nu \xrightarrow{V_0 \neq 0} E_\nu - V_0 \quad (190)$$

ondergaan, waarbij E_ν de kinetische bijdrage is tot de totale 1-deeltjes energie. Met de definitie

$$E \equiv E_{\text{kin}} - V_0 \geq -V_0 \quad (191)$$

kan de 1-deeltjes toestandsdichtheid van het gebonden systeem worden uitgedrukt in termen van de 1-deeltjes toestandsdichtheid (189) voor vrije deeltjes binnen de doos:

$$\boxed{D_{V_0}(E) = D(E_{\text{kin}}) = D(E + V_0)} . \quad (192)$$

Fermi-gas in een constant homogeen magneetveld: stel dat het vrije Fermi-gas onder invloed staat van een constant homogeen magneetveld in de z -richting, $\vec{\mathcal{B}} = \mathcal{B} \vec{e}_z$. In de spinruimte geeft dit aanleiding tot een extra interactie

$$\hat{H}_B^{\text{spin}} = C \hat{S}_z \quad (C \in \mathbb{R}, C \propto \mathcal{B}) . \quad (193)$$

Omdat deze operator uitsluitend in de spinruimte werkt en de Hamilton-operator (182) uitsluitend in de plaatsruimte, worden de 1-deeltjes energie-eigenfuncties nog steeds gegeven door vergelijking (185). Wel zal de $(2s+1)$ -voudige spinontaarding van de kinetische 1-deeltjes energieniveaus worden opgeheven volgens

$$E_\nu \xrightarrow{\mathcal{B} \neq 0} E_\nu + m_s \hbar C \equiv E_{\nu, m_s} , \quad (194)$$

waarbij E_ν de kinetische bijdrage is tot de totale 1-deeltjes energie E_{ν, m_s} voor een deeltje met spincomponent $m_s \hbar$ langs de z -as. Voor elke waarde van het spinkwantumgetal m_s is er dus sprake van een constante potentiaalverschuiving $V = m_s \hbar C$. Met de definitie

$$E_{m_s} \equiv E_{\text{kin}} + m_s \hbar C \geq m_s \hbar C \quad (195)$$

kan de toestandsdichtheid voor elk van de $2s+1$ spintoestanden worden uitgedrukt in termen van de 1-deeltjes toestandsdichtheid (189) voor vrije deeltjes binnen de doos:

$$\boxed{D_{m_s}(E_{m_s}) = \frac{1}{2s+1} D(E_{\text{kin}}) = \frac{1}{2s+1} D(E_{m_s} - m_s \hbar C)} . \quad (196)$$

2.5.1 Grondtoestand van een Fermi-gas

In §2.4.2 is aangetoond dat een gas bij temperatuur $T = 0$ in de grondtoestand komt te zitten (volledig gedegenereerd gas). Voor gassen bestaande uit bosonen of onderscheidbare deeltjes houdt dit automatisch in dat alle deeltjes in de laagste 1-deeltjes energie-eigentoestand terecht komen. Voor een Fermi-gas is dit niet mogelijk, aangezien op grond van het Pauli-uitsluitingsprincipe maximaal één fermion in een volledig gespecificeerde kwantumtoestand kan zitten. In dat geval gaan de N deeltjes de verschillende kinetische 1-deeltjes energietoestanden van onder af aan bezetten tot aan de Fermi-energie $E_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / (2m)$. Toestanden met $E_{\text{kin}} > E_F$ zijn niet bezet (vacant) voor een Fermi-gas bij $T = 0$ en kunnen alleen worden aangeslagen door de temperatuur te verhogen of door paarinteracties in de beschouwing te betrekken (zie §2.8). De toestanden met $E_{\text{kin}} \leq E_F$ vormen samen de Fermi-zee. De precieze waarde van de Fermi-energie kan rechtstreeks uit vergelijking (187) worden gehaald. Er moet namelijk gelden dat

$$N = N(k_F) = \int_0^{k_F} dk D(k) \stackrel{(187)}{=} \frac{2s+1}{6\pi^2} V k_F^3, \quad (197)$$

zodat

$$k_F = \left(\frac{6\pi^2}{2s+1} \right)^{1/3} \rho_N^{1/3} \quad \text{en} \quad E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{2s+1} \right)^{2/3} \rho_N^{2/3} \quad (198)$$

in termen van de deeltjesdichtheid $\rho_N = N/V$. Omdat N groot is zal de precieze bezettingsgraad van het hoogste energieniveau onbelangrijk zijn. Het feit dat slechts een beperkt aantal deeltjes in de laagste kinetische 1-deeltjes energietoestanden zit zorgt er verder voor dat de toestandsdichtheid in zeer goede benadering vervangen mag worden door de continue functie uit vergelijking (189). Merk op dat $E_F \propto \rho_N^{2/3}/m$, hetgeen inhoudt dat de Fermi-energie toeneemt met toenemende deeltjesdichtheid en dat het intrinsiek een factor 10^3 kleiner zal zijn voor protonen en neutronen dan voor elektronen. De totale kinetische energie van de grondtoestand van het Fermi-gas bedraagt nu

$$E_{\text{kin,tot}}^{T=0} = \int_0^{k_F} dk \frac{\hbar^2 k^2}{2m} D(k) \stackrel{(188)}{=} \frac{2s+1}{10\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} V k_F^5 \stackrel{(197),(198)}{=} \frac{3}{5} N E_F. \quad (199)$$

Dit houdt in dat de gemiddelde kinetische energie per deeltje ondanks de extreem lage temperatuur toch tamelijk groot is, namelijk

$$\bar{E}_{\text{kin}} = \frac{E_{\text{kin,tot}}^{T=0}}{N} = \frac{3}{5} E_F. \quad (200)$$

Vaak wordt dan ook aan zo'n Fermi-gas bij $T = 0$ een soort effectieve (klassieke) temperatuur toegekend aan de hand van het klassieke principe van equipartitie van energie:

$$T_{\text{cl}} \equiv \frac{E_{\text{kin,tot}}^{T=0}}{3Nk_B/2} \stackrel{(199)}{=} \frac{2}{5} \frac{E_F}{k_B} \equiv \frac{2}{5} T_F \propto \frac{\rho_N^{2/3}}{m}, \quad (201)$$

waarbij T_F de zogenaamde Fermi-temperatuur is. Voor een constant aantal deeltjes heeft zo'n volledig gedegenererd Fermi-gas dan ook een eindige druk ("degeneracy pressure")

$$P = - \left(\frac{\partial E_{\text{kin,tot}}^{T=0}}{\partial V} \right)_N \stackrel{(198),(199)}{=} \frac{2}{3} \frac{E_{\text{kin,tot}}^{T=0}}{V} \stackrel{(201)}{=} k_B \rho_N T_{\text{cl}} \propto \frac{\rho_N^{5/3}}{m}, \quad (202)$$

hetgeen voldoet aan een soort effectieve (klassieke) gaswet. Des te hoger de deeltjesdichtheid in het Fermi-gas is, des te meer verliezen de deeltjes hun individualiteit en des te hoger zal de effectieve temperatuur zijn. In die situatie zullen de fermionen moeilijker zijn aan te slaan. Voor eindige temperaturen $T \ll T_F$ gedraagt een Fermi-gas zich dan ook nagenoeg als een volledig gedegenererd Fermi-gas (zie § 2.7).

Rekenhulp: om een idee te geven wat het deeltjesspecifieke verband is tussen E_F , T_F en ρ_N zijn een aantal karakteristieke waarden in een tabel gezet. Hierbij geven ρ_N^{rel} en T_F^{rel} aan bij welke deeltjesdichtheid dan wel Fermi-temperatuur geldt dat $E_F = mc^2$, zodat alleen voor $\rho_N \ll \rho_N^{\text{rel}}$ dan wel $T_F \ll T_F^{\text{rel}}$ de niet-relativistische aanpak geldig is:

$$E_F = mc^2 (\rho_N / \rho_N^{\text{rel}})^{2/3} \quad \text{en} \quad T_F = T_F^{\text{rel}} (\rho_N / \rho_N^{\text{rel}})^{2/3}. \quad (203)$$

| deeltje | mc^2 in MeV | T_F^{rel} in K | ρ_N^{rel} in m^{-3} |
|----------|---------------|-------------------------|--|
| elektron | 0.51100 | 0.5930×10^{10} | 1.6589×10^{36} |
| proton | 938.27 | 1.0888×10^{13} | 1.0269×10^{46} |
| neutron | 939.57 | 1.0903×10^{13} | 1.0312×10^{46} |

Grondtoestand van een Fermi-gas in een constante attractieve potentiaal: stel het Fermi-gas staat onder invloed van een constante attractieve potentiaal $V = -V_0 < 0$ binnen de doos. Alles wat betrekking heeft op het kinetische deel van de energie blijft dan hetzelfde, zoals E_F , $E_{\text{kin,tot}}^{T=0}$, \bar{E}_{kin} alsmede de thermische gasdruk P . Wel zal de totale energie van het volledig gedegenererde Fermi-gas een verschuiving ondergaan:

$$E_{\text{tot}}^{T=0} = \frac{3}{5} N E_F - N V_0 \quad \Rightarrow \quad \bar{E}_b \equiv V_0 - \bar{E}_{\text{kin}} = V_0 - \frac{3}{5} E_F, \quad (204)$$

waarbij \bar{E}_b staat voor de gemiddelde bindingsenergie per deeltje.

2.5.2 Fermi-gas met periodieke randvoorwaarden

Met het oog op de toepassingen in hoofdstuk 1 en verderop in het dictaat maken we even een korte zijstap naar niet-interagerende periodieke systemen met periode L . De randvoorwaarde uit de voorgaande beschouwing maakt dan plaats voor een set ruimtelijke periodiciteitscondities voor de golf functie van het systeem:

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + L\vec{e}_x) = \psi(\vec{r} + L\vec{e}_y) = \psi(\vec{r} + L\vec{e}_z) . \quad (205)$$

De ruimtelijke 1-deeltjes energie-eigenfuncties zijn nu lopende golven (zie App. A.1)

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i[xk_x + yk_y + zk_z]) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) , \\ E_k &= \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} , \end{aligned} \quad (206)$$

in termen van de gekwantiseerde golfvectoren

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L} \vec{\nu} , \quad \text{met } \nu_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots . \quad (207)$$

De overige stappen zijn identiek aan de voorgaande beschouwing. Zo bevat een eenheidskubus in de \vec{k} -ruimte precies $(2s+1)L^3/(2\pi)^3 = (2s+1)V/(8\pi^3)$ volledig gespecificeerde kwantumtoestanden (inclusief spin). Het aantal toestanden $N(k)$ met golfvector kleiner dan k is dan in de continuümlimiet gerelateerd aan het overeenkomstige volume in de \vec{k} -ruimte:

$$N(k) = \int_0^k dk' D(k') \approx (2s+1) \frac{V}{8\pi^3} \left(\frac{4}{3} \pi k^3 \right) = \frac{2s+1}{6\pi^2} V k^3 . \quad (208)$$

Deze uitdrukking is identiek aan het resultaat (187) voor een deeltje binnen een kubus met ribben L . Derhalve zijn ook de 1-deeltjes toestandsdichtheden identiek voor beide soorten systemen. Het belangrijkste verschil tussen beide soorten systemen is de afwezigheid van randeffecten in het periodieke geval. Dit verschil valt echter weg in de limiet $L \rightarrow \infty$. Effectief hebben we dan te maken met een systeem zonder expliciete periodiciteit of omsluiting. In zulke gevallen kiezen we er meestal voor om uit te gaan van een systeem met periode L alvorens de continuümlimiet $L \rightarrow \infty$ te nemen (zie App. A.2).

Grondtoestand: een Fermi-gas met periodieke randvoorwaarden vult in de grondtoestand alle 1-deeltjes energie-eigentoestanden binnen een Fermi-bol met straal

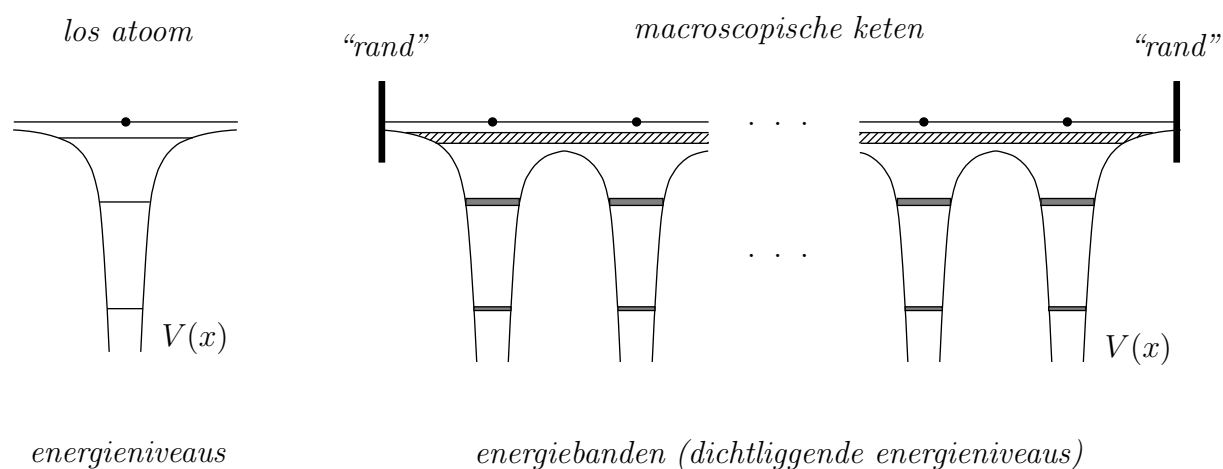
$$k_F = \left(\frac{6\pi^2}{2s+1} \right)^{1/3} \rho_N^{1/3} \quad (209)$$

in de \vec{k} -ruimte, waarvoor geldt dat $N(k_F) = N$. Op het Fermi-oppervlak van de Fermi-bol zijn de energie en impuls gelijk aan de Fermi-energie E_F en de Fermi-impuls p_F :

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad \text{en} \quad p_F = \hbar k_F . \quad (210)$$

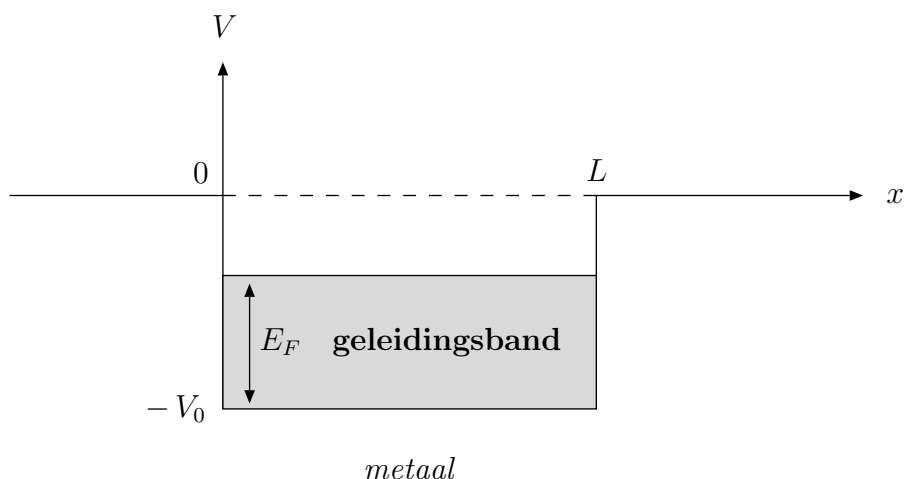
2.5.3 Fermi-gas model voor geleidingselektronen in een metaal

Als eerste voorbeeld van een Fermi-gas beschouwen we de geleidingselektronen in een metaal. In een metaal zijn de elektronen van de metaalatomen in twee categorieën onder te verdelen. Het grootste deel van de elektronen zit in zeer smalle (nagenoeg atomaire) energiebanden en is effectief gebonden aan de kernen van de metaalatomen, waarmee ze samen metaalionen vormen. Anderzijds zijn er de zogenaamde geleidingselektronen, die in de niet volledig gevulde hoogste energieband (geleidingsband) zitten. In een individueel, op zichzelf staand metaalatoom zijn dit de valentie-elektronen gebonden in de buitenste atoomschil. Binnen een metaalrooster kunnen ze echter in eerste benadering vrij rondbewegen (“nearly-free electron model”). Dit fenomeen treedt op wanneer de gemiddelde afstand tussen de metaalionen kleiner is dan de gemiddelde uitbreidheid van de atomaire golffuncties van deze geleidingselektronen. In dit overgesimplificeerde, semi-klassieke plaatje worden de geleidingselektronen als het ware door het metaalrooster uit de metaalatomen geperst, zoals in onderstaand plaatje is geschetst. Hierbij geeft het gearceerde gebied de geleidingsband aan. Bij karakteristieke metaaldichtheden $\rho_{N_{\text{at}}} = 10^{28} - 10^{29}$ metaalatomen/m³ komt het volume per metaalatoom inderdaad overeen met een bolvormig volume waarvan de straal $r_s = (3/4\pi\rho_{N_{\text{at}}})^{1/3}$ slechts 2–6 keer zo groot is als de Bohr-straal $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ m.



De geleidingselektronen vormen zo in eerste benadering een Fermi-gas (elektrongas), met de rand van het metaal als begrenzing van de macroscopische doos (Sommerfeld, 1928).⁶ In deze zeer ruwe benadering worden de expliciete elektron–elektron alsmede elektron–ion interacties gerepresenteerd door een gemiddelde constante (attractieve) potentiaal $V = -V_0 < 0$.

⁶Het elektrongas vormt samen met de metaalionen een neutraal geheel. Zo’n combinatie van een elektrongas en een complementaire collectie positief geladen deeltjes wordt ook wel een plasma genoemd.



Zoals we in §2.5.1 hebben gezien geeft dit aanleiding tot een constante additieve bijdrage $-NV_0$ tot de totale energie van het elektrongas. Deze constante term speelt geen rol bij de thermische respons van het systeem, maar het zorgt er wel voor dat de geleidingselectronen in het metaal opgesloten zitten. Binnen het metaal zijn de geleidingselectronen bij benadering als vrij te beschouwen omdat verstrooiing onderdrukt is. Op basis van het Pauli-uitsluitingsprincipe zijn bezette 1-deeltjes energieniveaus namelijk niet toegankelijk als verstrooiingseindtoestanden. Dit elimineert het overgrote deel van de elektron–elektron en elektron–ion botsingen. Toegestane botsingen met voldoende energie-overdracht vormen feitelijk het mechanisme van zwak energiecontact waarmee het Fermi-gas van geleidingselectronen in thermodynamisch evenwicht kan komen met de omgeving binnen het metaal. Dit speelt dan ook een belangrijke rol bij de thermische eigenschappen van metalen, zoals we nu zullen zien.

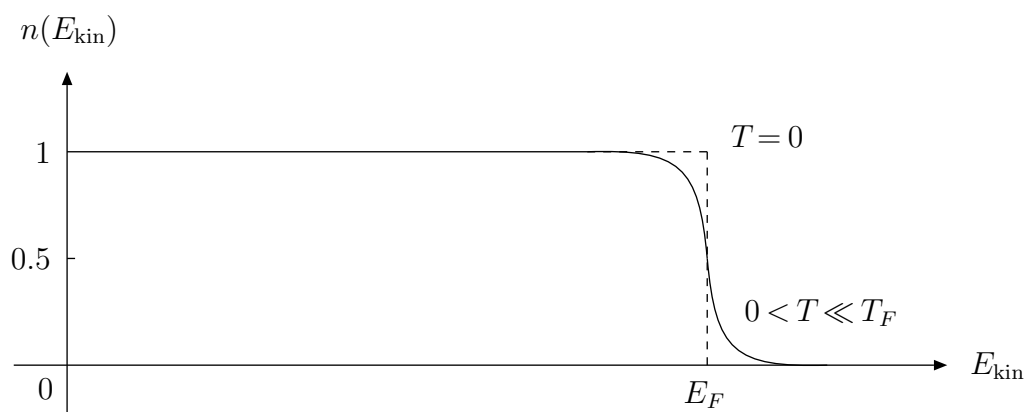
De warmtecapaciteit van metalen bij kamertemperatuur.

Beschouw de warmtecapaciteit $(\partial E_{\text{tot}}/\partial T)_{V,N}$ van een ideaal gas bestaande uit een constant aantal N geleidingselectronen in een vast volume V . In de klassieke statistische mechanica draagt elk vrij deeltje van een ideaal gas $3k_B/2$ bij tot de warmtecapaciteit op grond van het principe van equipartitie van energie. Voor N geleidingselectronen wordt op die manier een totale klassieke warmtecapaciteit van tenminste $3Nk_B/2$ verwacht, hetgeen van geen meter klopt met de veel lagere experimenteel waargenomen waarden van de warmtecapaciteit van metalen.

Vraag: *Kunnen we dit met onze huidige kennis begrijpen?*

Zoals in het voorgaande is aangegeven, vormen de geleidingselectronen in eerste benadering een Fermi-gas met de rand van het metaal als begrenzing van de macroscopische doos. De deeltjesdichtheid van de geleidingselectronen in het Fermi-gas is gelijk aan de dichtheid van de metaal-atomen in het metaal vermenigvuldigd met het aantal geleidingselectronen Z_v per metaal-atoom. Voor een gangbare geleider zoals koper (Cu) of zilver (Ag) is $Z_v = 1$ en

is de deeltjesdichtheid van de geleidingslektronen dus gelijk aan de dichtheid van de metaalionen in het metaal. Voor een elektrongas bij $T = 0$ is de gemiddelde kinetische energie per geleidingselektron gelijk aan $\bar{E}_{\text{kin}} = 3E_F/5$, hetgeen overeenkomt met een klassiek gas bij een temperatuur $T_{\text{cl}} = 2E_F/(5k_B) = 2T_F/5$. Als rekenvoorbeeld bekijken we nu zilver, waarvoor de deeltjesdichtheid $\rho_N = 5.8 \times 10^{28}$ deeltjes/m³ bedraagt voor zowel de metaalionen als de geleidingslektronen. Met behulp van de tabel bij vergelijking (203) vinden we voor de Fermi-energie $E_F \approx 5.5$ eV, zodat de effectieve klassieke temperatuur gelijk is aan $T_{\text{cl}} \approx 2.5 \times 10^4$ K. Als er nu thermische energie aan het systeem wordt toegevoegd, dan kunnen de geleidingslektronen aangeslagen toestanden met kinetische 1-deeltjes energie $E_{\text{kin}} > E_F$ gaan bezetten. Bij kamertemperatuur, d.w.z. $T_k \approx 300$ K, bedraagt de beschikbare thermische energie per geleidingselektron $3k_B T_k/2 \approx 0.039$ eV $\ll E_F$. Derhalve kan slechts een kleine fractie van de geleidingslektronen worden aangeslagen, namelijk alleen geleidingslektronen met kinetische energie $E_{\text{kin}} = E_F - \mathcal{O}(k_B T_k)$. In het onderstaande plaatje is dit weergegeven aan de hand van de bezettingsgraad $n(E_{\text{kin}})$ van de volledig gespecificeerde kwantumtoestanden met gegeven kinetische energie E_{kin} .



De distributies voor $T = 0$ en $0 < T \ll T_F$ verschillen slechts weinig. Verderop in dit hoofdstuk zal nog worden aangetoond dat de fractie van de geleidingslektronen dat bij kamertemperatuur deelneemt aan de warmtegeleiding van een metaal slechts van de orde grootte T_k/T_F is. Deze warmtegeleiding wordt dan ook grotendeels bepaald door de thermische beweging van de ionen in het metaalrooster en niet zozeer door de vrij bewegende geleidingslektronen! Daarom zal je je vingers niet zomaar branden aan een stuk metaal bij kamertemperatuur, ondanks het feit dat het metaal in een bepaald opzicht karakteristieke eigenschappen bezit van een klassiek gas bij een temperatuur $T_{\text{cl}} = \mathcal{O}(10^4$ K).

Let wel: bovenstaande Fermi-gas benadering is niet toepasbaar op alle eigenschappen van een metaal. Om de elektrische geleiding van metalen adequaat te begrijpen zijn de interacties tussen de geleidingslektronen en het rooster van metaalionen bijvoorbeeld onontbeerlijk. Deze interacties geven bijvoorbeeld aanleiding tot de bandenstructuur in metalen en de Cooper-paar interacties in lage-temperatuur supergeleiders.

2.5.4 Fermi-gas model voor zware kernen

Tot nu toe is het alleen mogelijk om de collectieve kernkrachten in atoomkernen aan de hand van modellen te beschrijven. Deze modellen parametriseren onze huidige experimentele en theoretische kennis. Enerzijds is de straal van de ladingsdistributie in de kern, d.w.z. de protondistributie, te bepalen aan de hand van verstrooiings- en spectroscopie-experimenten. Voorbeelden: de verstrooiing van elektronen aan atoomkernen en de Röntgen-spectra van muonische atomen, waarbij een elektron is vervangen door een muon dat 200 keer zo zwaar is en derhalve een Bohr-straal heeft die 200 keer zo klein is. Anderzijds geeft de verstrooiing van α -deeltjes (heliumkernen) aan atoomkernen informatie over de straal van de volledige nucleondistributie (zie plaatje), d.w.z. protonen en neutronen samen. Er treedt namelijk een relatief scherp bepaalde energiedrempel op waarboven de α -deeltjes voldoende energie hebben om de Coulomb-repulsie van de kern te overwinnen en de kernkrachten te voelen. Via deze experimenten weten we dat de nucleondichtheid nagenoeg constant is binnen de kern:

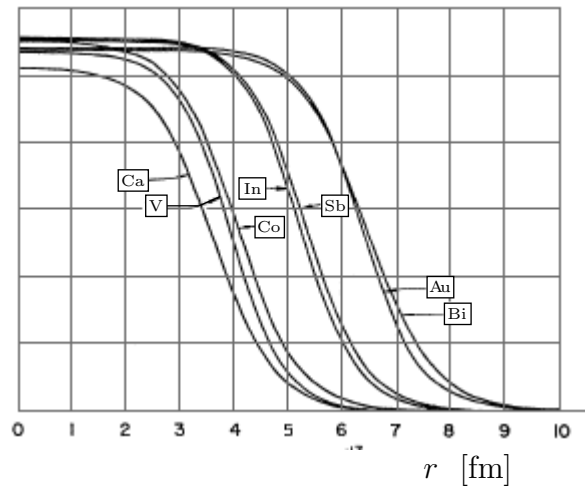
$$\rho_N \approx 0.17 \times 10^{45} \text{ nucleonen/m}^3 \Rightarrow \text{massadichtheid} \approx 2.8 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3. \quad (211)$$

Deze dichtheid is nagenoeg onafhankelijk van het type kern en valt relatief snel af in de buurt van de rand van de kern. Het is derhalve zinvol om aan een atoomkern een bolvormig volume met effectieve straal R toe te kennen, waarin bij constante nucleondichtheid ρ_N alle nucleonen van de desbetreffende kern bevat zijn. Deze kernstraal voldoet dan ruwweg aan de relatie

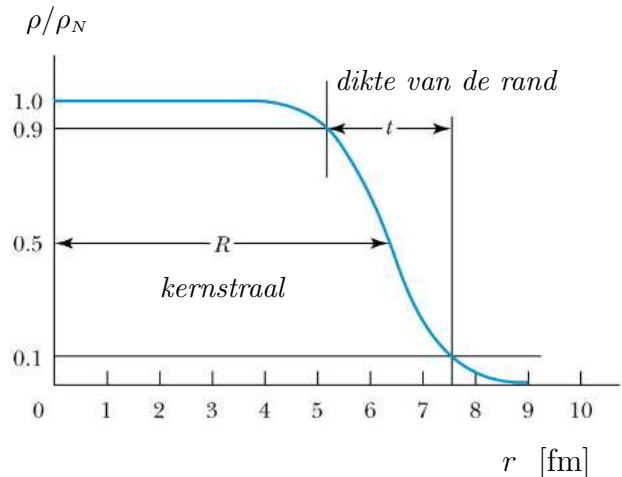
$$R \approx r_0 A^{1/3}, \quad \text{met} \quad r_0 \equiv \left(\frac{3}{4\pi\rho_N} \right)^{1/3} \approx 1.12 \times 10^{-15} \text{ m} = 1.12 \text{ fm}. \quad (212)$$

De grootheid A is het massagetal van de kern, hetgeen de som is van het aantal protonen Z (ladingsgetal) en het aantal neutronen $A-Z$.

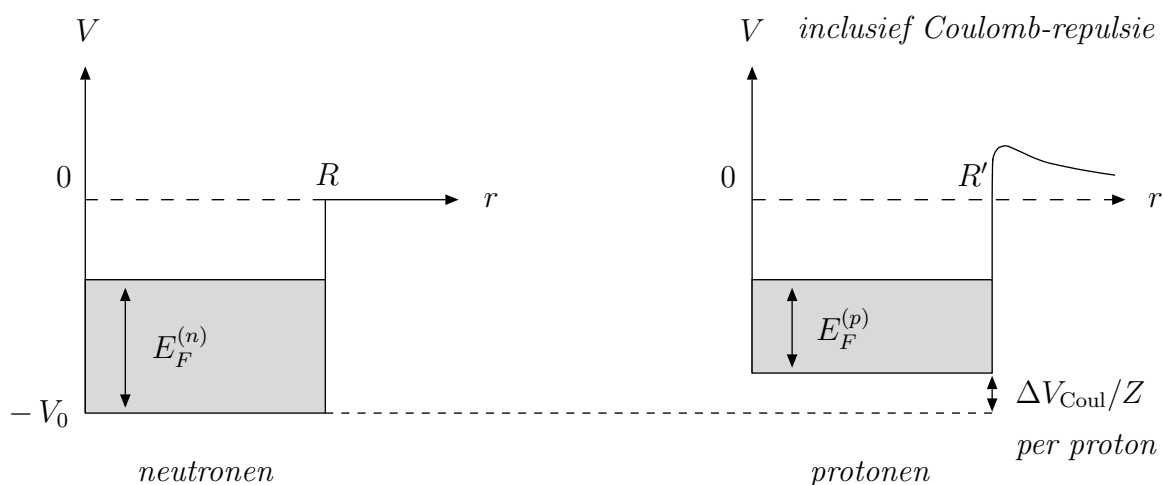
Hahn – Ravenhall – Hofstadter (1956)



*nucleon*distributie in willekeurige eenheden



Thomas–Fermi model: deze observaties geven aanleiding tot een simpel Fermi-gas model (Thomas–Fermi model) voor atoomkernen. In dit model bestaat de kern uit twee onafhankelijke Fermi-gassen van protonen en neutronen, die binnen een bol met straal R worden gehouden door een constante attractieve potentiaal $V = -V_0 < 0$ binnen de bol. Deze potentiaalput vervangt de gemiddelde korte-afstandsinteractie met de naburige nucleonen. De massaverdelingen van de twee soorten nucleonen binnen de kern worden in eerste benadering uniform genomen, d.w.z. randeffecten worden verwaarloosd. Op het eerste gezicht lijkt het onzinnig om de sterke wisselwerkingen tussen de nucleonen buiten beschouwing te laten. Echter, een aantal eigenschappen van atoomkernen zijn puur het gevolg van het Pauli-uitsluitingsprincipe. Aan de hand van het Fermi-gas model kan worden bepaald welke eigenschappen in deze categorie vallen en welke eigenschappen alleen met behulp van de expliciete dynamica van de kernkrachten verklaard kunnen worden. Het model kan verder worden verfijnd door ook de Coulomb-repulsie tussen de protonen mee te nemen alsmede een benadering voor de kernkrachten tussen twee nucleonen. Op die manier wordt het model natuurlijk wel een stuk gecompliceerder, aangezien de interacties zeer gevoelig zijn voor de afstand tussen de nucleonen en dus ook voor de 2-deeltjes spin-toestanden van de interagerende nucleonen. Ruimtelijke symmetrisatie/antisymmetrisatie zorgt er immers voor dat de gemiddelde deeltjesafstand kleiner/groter wordt.



In de grondtoestand vullen beide Fermi-gassen alle energieniveaus tot aan de Fermi-energie, zodat de totale grondtoestandsenergie van een zware kern in dit uiterst simpele model $\frac{3}{5} [ZE_F^{(p)} + (A-Z)E_F^{(n)}] - AV_0$ bedraagt. Als er geen Coulomb-repulsie tussen de protonen in rekening wordt gebracht, dan is deze totale grondtoestandsenergie minimaal voor $Z = A/2$ (zie opgave 18 van het werkcollege). Het Fermi-gas model voorspelt dan ook kernen die in de grondtoestand uit evenveel protonen als neutronen bestaan:

$$\rho_N^{(p)} = \rho_N^{(n)} = \frac{\rho_N}{2} \stackrel{(203),(211)}{=} 8.25 \times 10^{-3} \rho_N^{\text{rel}}. \quad (213)$$

Het empirische feit dat de verhouding $Z/(A - Z)$ afneemt voor toenemende waarden van A kan pas worden verklaard als ook de Coulomb-repulsie tussen de protonen in rekening wordt gebracht (zie opgave 18 van het werkcollege), zodat het energetisch gunstiger wordt als er iets meer neutronen dan protonen in de kern zitten. Omdat de massa's van het proton (M_p) en neutron (M_n) nagenoeg aan elkaar gelijk zijn, zullen beide Fermi-gassen dezelfde Fermi-energie hebben:

$$E_F \stackrel{(198)}{=} \frac{\hbar^2}{2M_p} \left(3\pi^2 \frac{\rho_N}{2} \right)^{2/3} \stackrel{(203),(213)}{\longrightarrow} E_F \approx 38 \text{ MeV}, \quad (214)$$

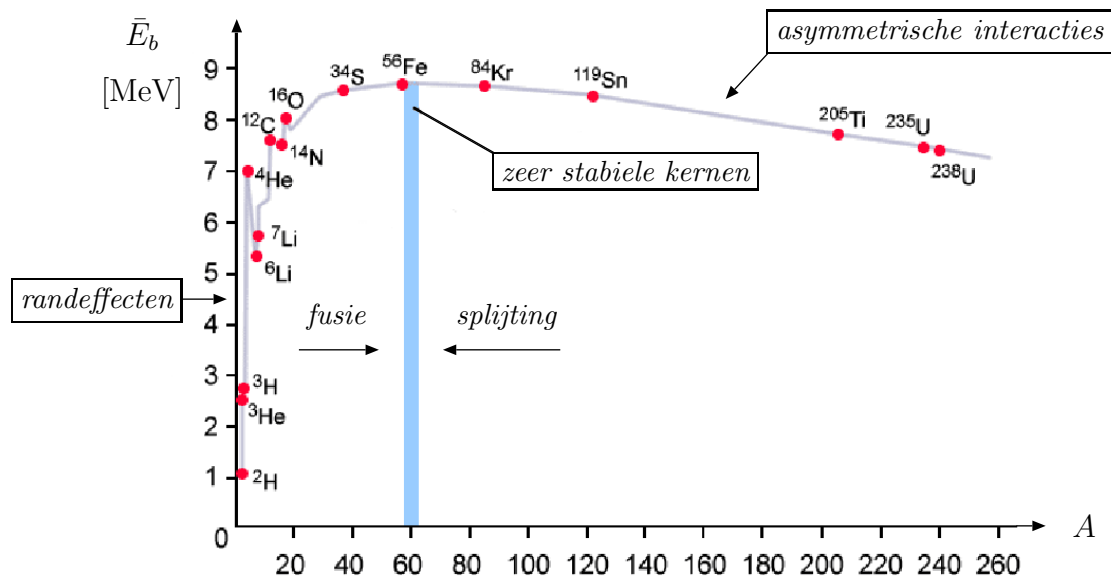
met bijbehorende Fermi-temperatuur $T_F = E_F/k_B \stackrel{(203)}{=} \mathcal{O}(10^{11} \text{ K})$. De gemiddelde kinetische energie per nucleon wordt dan

$$\bar{E}_{\text{kin}} = \frac{3}{5} E_F \approx 23 \text{ MeV} \quad (215)$$

en de gemiddelde bindingsenergie per nucleon

$$\bar{E}_b = V_0 - \bar{E}_{\text{kin}}. \quad (216)$$

Aan de hand van laag-energetische verstrooiing van neutronen aan complexe kernen wordt experimenteel gevonden dat de diepte van de potentiaalput V_0 ongeveer 40 MeV bedraagt. Op basis hiervan voorspelt het Fermi-gas model dus een bindingsenergie per nucleon van $40 \text{ MeV} - 23 \text{ MeV} = 17 \text{ MeV}$.



De experimentele data voor de bindingsenergie per nucleon (zie plaatje) volgt rechtstreeks uit het verschil tussen de massa van zo'n zware kern en de som van de rustmassa's van de

afzonderlijke nucleonen:

$$A\bar{E}_b = [ZM_p + (A - Z)M_n - M]c^2 ,$$

$$M_p c^2 = 938.27 \text{ MeV} \quad \text{en} \quad M_n c^2 = 939.57 \text{ MeV} . \quad (217)$$

Deze data is in een vorm te gieten die bekend staat als de semi-empirische massaformule (Bethe–Weizsäcker formule, 1935):

$$\bar{E}_b = a_v - a_s A^{-1/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{4/3}} - a_a \left(\frac{2Z - A}{A} \right)^2 + \text{paarinteracties} ,$$

$$a_v = 15.8 \text{ MeV} , \quad a_s = 18.3 \text{ MeV} , \quad a_c = 0.71 \text{ MeV} \quad \text{en} \quad a_a = 23.2 \text{ MeV} . \quad (218)$$

De zogenaamde volumecoëfficiënt a_v wordt dus bijna helemaal bepaald door het Pauli-uitsluitingsprincipe. In het werkcollege zal verder worden aangetoond dat het Fermi-gas model minder succesvol is in het voorspellen van de asymmetriecoëfficiënt a_a , die de invloed van $Z \neq A/2$ op de bindingsenergie weergeeft. Dat is geen verrassing, we verwachten immers dat nucleon-gevoelige interacties zoals Coulomb- en isospininteracties hierbij een rol spelen. De bindingsenergie-effecten veroorzaakt door een uniforme ladingsverdeling van protonen binnen de kern kloppen echter weer uitstekend met de Coulomb-coëfficiënt a_c .

Opmerkingen: het feit dat de totale bindingsenergie van een zware kern nagenoeg proportioneel is met het massagetal A wordt saturatie genoemd. In feite zijn de eerste tekenen van saturatie al merkbaar bij relatief lichte kernen met $A \geq 12$. Het fysische plaatje hierachter is dat de nucleonen van zware kernen slechts met een klein vast aantal naaste burens interageren in verband met de korte dracht van de kernkrachten, die exponentieel afvallen met een karakteristieke lengteschaal van ongeveer 1.4 fm. Voor een dichtste bolstapeling van nucleonen is het aantal naaste burens inderdaad 12. Dit staat in schril contrast met interacties met lange dracht, zoals Coulomb-interacties, waarbij alle paarinteracties van de deeltjes moeten worden meegenomen. In zo'n geval wordt een bindingsenergie verwacht die proportioneel is met het aantal paren $\frac{1}{2}A(A - 1)$, zoals is af te lezen uit de Coulomb-repulsie term $\propto Z^2$ in de massaformule. Dit saturatie-effect legitimeert de zienswijze dat elk nucleon in het binnenste van de kern een effectieve (gemiddelde) nucleaire potentiaal ondervindt die niet afhangt van het totale aantal nucleonen. Het saturatie-effect maakt tevens duidelijk dat de rand van de kern een dubbele invloed zal uitoefenen op de bindingsenergie (zie de randterm $\propto A^{-1/3} = r_0/R$ in de massaformule). Enerzijds zijn er de randeffecten op de toestandsdichtheid van het Fermi-gas, zoals uitgewerkt in opgave 16(ii) van het werkcollege. Anderzijds valt de deeltjesdichtheid snel af in de buurt van de rand, zodat nucleonen aan de rand van de kern minder naaste burens en dus minder bindingsenergie zullen hebben. Dit laatste geeft aanleiding tot oppervlaktespanning, zoals bij een druppel. Vandaar dat het Fermi-gas model inclusief randeffecten ook wel het “liquid drop model” wordt genoemd.

2.5.5 Sterren in het eindstadium van de sterevolutie

Een ster kan worden opgevat als een veeldeeltjessysteem waarvoor geldt dat de gravitatie-druk in evenwicht is met de thermische druk en stralingsdruk. Tijdens de sterevolutie worden verschillende stadia van kernfusie-ontbranding doorlopen, waarbij van binnen uit de kernfusiebrandstof stapsgewijs (en schilsgewijs) wordt opgebruikt. In het eindstadium van de sterevolutie raakt de kernfusiebrandstof op in het binnenste van de ster, alwaar zich matig-reactieve kernen zoals ^{12}C - en ^{16}O -kernen hebben opgehoopt. Met het effectief stoppen van de fusiereacties in het binnenste van de ster valt ook de stralingsdruk weg. Omdat één component van de compenserende druk nu afwezig is begint de ster in te storten en gaat het op zoek naar een nieuw evenwicht. Terwijl de ster implodeert worden de buitenste massaschillen afgestoten, zodat uiteindelijk een kern overblijft met een dunne atmosfeer. Deze kern gaat nu afhankelijk van de massa verschillende fasen doorlopen.

Fase 1: Fermi-gas model voor het binnenste van witte dwergen.

Bij het imploderen neemt de thermische (kinetische) druk in het binnenste van de ster toe. Neem voor het gemak aan dat het binnenste van de ster bestaat uit één karakteristiek atoomsoort met ladingsgetal Z en massagetal $A = 2Z$. Als de druk nu zo groot wordt dat de afstand tussen de kernen kleiner wordt dan de Bohr-straal $a_Z = a_0/Z$ van een 1-elektron atoom bestaande uit een kern met lading Ze en één elektron, dan worden de atomen door de druk volledig geïoniseerd (drukionisatie). De elektronen die uit de atomen geperst zijn vormen in eerste benadering een elektrongas binnen een bolvormig volume.⁷ Voor atomen met $A = 12-16$ treedt dit fenomeen op wanneer de massadichtheid in het binnenste van de ster de 10^7 kg/m^3 barrière overschrijdt. Een ster die tijdens deze elektrongas-fase stabiel wordt heet een witte dwerg.

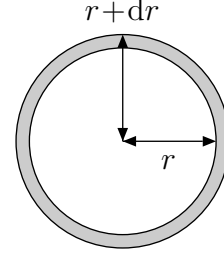
Neem nu aan dat de elektrondichtheid van het elektrongas uniform is, hetgeen in een verfijning van het model kan worden vervangen door een meer realistisch dichtheidsprofiel (zie opgave 19 van het werkcollege). De constante dichtheid kan dan door middel van de plasmarelatie

$$\rho_N^{(e)} = Z\rho_N^{(kern)} = \frac{\rho_M}{AM_p} Z \quad (219)$$

worden uitgedrukt in termen van de uniforme massadichtheid ρ_M in het binnenste van de ster. Hier is AM_p de massa per kern en legt Z het aantal vrijgekomen elektronen per kern vast. Voor de typische witte-dwergwaarden $\rho_M = 10^7-10^{11} \text{ kg/m}^3$ wordt de elektrondichtheid voor $A = 2Z$ gegeven door $\rho_N^{(e)} = 10^{33}-10^{37} \text{ elektronen/m}^3$ en bedraagt de bijbehorende Fermi-temperatuur $T_F = 10^8-10^{10} \text{ K}$. Voor de typische temperatuur van een witte dwerg geldt $T < 10^7 \text{ K}$, hetgeen (veel) kleiner is dan de Fermi-temperatuur van het elektrongas dat dus bij benadering in de grondtoestand zal zitten.

⁷Net als in §2.5.3 vormen de elektronen en de ionen (kernen) samen een plasma.

Aangezien de kinetische energie van de elektronen veel groter is dan de thermische energie van de veel zwaardere kernen, moeten we nu op zoek gaan naar een stabiele evenwichtsconditie op basis van de kinetische energie van het elektrongas bij $T = 0$ en de gravitatiepotentiaal van de ster. De gravitatiepotentiaal wordt simpelweg verkregen door de bolvormige ster in bolschillen op te bouwen:



$$\begin{aligned}
 E_{\text{grav}} &= - \int_0^R dr (4\pi r^2 \rho_M) \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \rho_M \right) \frac{G_N}{r} = - \frac{16}{3} \pi^2 \rho_M^2 G_N \int_0^R dr r^4 \\
 &= - \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \rho_M \right)^2 \frac{3G_N}{5R} = - \frac{3G_N M^2}{5R}. \quad (220)
 \end{aligned}$$

Hier zijn M en R de massa en straal van de geïmplodeerde ster en is G_N de welbekende gravitatieconstante van Newton. De totale energie van de ster wordt dan bij benadering gegeven door

$$\begin{aligned}
 E_T &\stackrel{(199)}{=} \frac{3}{5} N E_F - \frac{3G_N M^2}{5R} \stackrel{(198)}{=} N \frac{3\hbar^2}{10m_e} (3\pi^2 \rho_N^{(e)})^{2/3} - \frac{3G_N M^2}{5R} \\
 &\stackrel{(219)}{=} \left(\frac{M}{AM_p} Z \right) \frac{3\hbar^2}{10m_e} \left(\frac{3\pi^2 Z \rho_M}{AM_p} \right)^{2/3} - \frac{3G_N M^2}{5R} \\
 &\stackrel{\rho_M = M/V}{=} \left[\frac{3}{10} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{Z}{AM_p} \right)^{5/3} \right] \frac{M^{5/3}}{R^2} - \frac{3G_N M^2}{5R} \equiv a \frac{M^{5/3}}{R^2} - \frac{3G_N M^2}{5R}.
 \end{aligned}$$

De evenwichtsconditie luidt nu $dE_T/dR = 0$, oftewel

$$- \frac{2aM^{5/3}}{R^3} + \frac{3G_N M^2}{5R^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad MR^3 = \left(\frac{10a}{3G_N} \right)^3 \stackrel{A=2Z}{=} 7.30 \times 10^{50} \text{ kg m}^3. \quad (221)$$

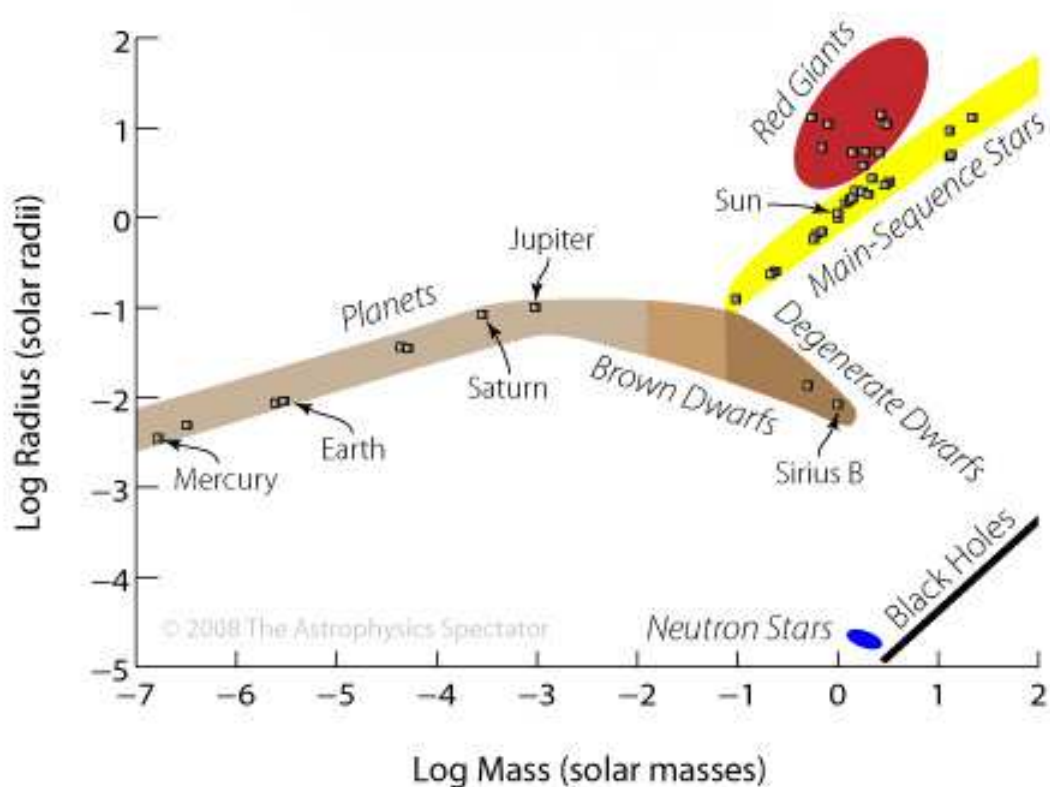
Hiermee is dus een verband gelegd tussen de massa en straal ($\sim 10^4$ km) van een witte dwerg. Let wel: tegen de intuïtie in wordt de straal van de witte dwerg kleiner voor toenemende massa, in overeenstemming met de waarnemingen. Er is hier dus sprake van een puur kwantummechanisch fenomeen ten gevolge van gedegenererde materie dat zich direct waarneembaar manifesteert in een object van astronomische afmetingen!

Vraag: *Is de niet-relativistische aanpak hier wel geschikt?*

Voor een massadichtheid $\rho_M = 10^7 \text{ kg/m}^3$ geldt dat $\rho_N^{(e)} = 3 \times 10^{33} \text{ elektronen/m}^3 \ll \rho_N^{\text{rel}}$, zoals gegeven in tabel (203). Bij ‘lage’ massadichtheden is de niet-relativistische aanpak inderdaad geschikt. Bij ‘hoge’ massadichtheden moeten wel relativistische correcties worden meegenomen. Voor een massadichtheid $\rho_M = 10^{11} \text{ kg/m}^3$ geldt zelfs dat $\rho_N^{(e)} = 3 \times 10^{37} \text{ elektronen/m}^3 \gg \rho_N^{\text{rel}}$. In dat geval moet het Fermi-gas (ultra-)relativistisch

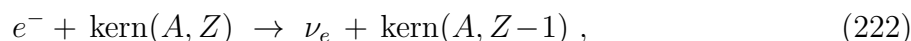
worden behandeld. De ultra-relativistische behandeling, waarbij de elektronmassa verwaarloosd mag worden, geeft aanleiding tot een volledig ander soort evenwichtsconditie (zie opgave 19 van het werkcollege): stabiele witte dwergen hebben een bovengrens M_C op de massa. Deze bovengrens van ongeveer 1.4 zonnemassa's wordt de Chandrasekhar limiet genoemd.

straal versus massa voor hemellichamen



Fase 2: Fermi-gas model voor het binnenste van neutronensterren.

Zware sterren kunnen fase 1 doorlopen zonder een stabiel evenwicht te bereiken. Zo'n ster zal dan verder instorten. Bij toenemende massadichtheid kunnen de elektronen worden ingevangen door de protonen via het inverse β -vervalproces



waarbij de nagenoeg massalozе neutrino's verdampen (koeling). Het fysische mechanisme achter dit inverse β -vervalproces is het volgende. Aan de rechterkant van de vergelijking hebben de kernen minder totale bindingsenergie in verband met de veranderde balans tussen het aantal protonen en neutronen. Bij voldoende hoge dichtheden wordt deze energietoename echter gecompenseerd door een energieafname ten gevolge van de reductie van het aantal elektronen in het elektrongas. Bij een massadichtheid van ongeveer $\rho_M = 10^{15} \text{ kg/m}^3$ wordt de kinetische druk van de neutronen belangrijker dan de druk

van het elektrongas. Bij nog hogere dichtheden van 10^{17} – 10^{18} kg/m³ zal er uiteindelijk een Fermi-gas ontstaan dat grotendeels bestaat uit neutronen (neutrongas). Een ster die tijdens deze neutrongas-fase stabiel wordt heet derhalve een neutronenster. Het verschil met het Fermi-gas van fase 1 vertaalt zich in twee simpele substituties: $Z \rightarrow A$ en $m_e \rightarrow M_n \approx M_p$. Verder is alles hetzelfde. De a -parameter uit vergelijking (221) zal dan een extra factor $(m_e/M_p)(A/Z)^{5/3} = \mathcal{O}(10^{-3})$ krijgen. Deze intrinsieke factor 1000 reductie voor de karakteristieke stralen van neutronensterren wordt inderdaad waargenomen ($R \sim 10$ km). De ultra-relativistische behandeling geeft wederom aanleiding tot een bovengrens op de massa van de neutronenster. Deze bovengrens moet echter wel met een korreltje zout worden genomen. Bij massadichtheden van de orde van de nucleaire massadichtheid 2.8×10^{17} kg/m³ verwachten we immers dat ook de dynamica van de sterke kernkrachten een relevante rol gaat spelen.

2.6 Systemen bestaande uit niet-interagerende deeltjes

Als tweede toepassing van ensembles in thermisch evenwicht gaan we nu proberen de statistische eigenschappen af te leiden van systemen bestaande uit grote aantallen niet-interagerende deeltjes. We nemen hierbij aan dat het 1-deeltjes energiespectrum discreet is, zoals geldt voor systemen die opgesloten zitten in een afgesloten ruimte of binnen een potentiaalput (“trap”). Drie fundamenteel verschillende scenario’s zijn nu te beschouwen.

- (A) De deeltjes zijn onderscheidbaar, bijvoorbeeld aan de hand van de positie. Dit zal aanleiding geven tot de zogenaamde Maxwell–Boltzmann statistiek.
- (B) De deeltjes zijn identieke bosonen. Dit zal aanleiding geven tot de zogenaamde Bose–Einstein statistiek.
- (C) De deeltjes zijn identieke fermionen. Dit zal aanleiding geven tot de zogenaamde Fermi–Dirac statistiek.

Bij de afleiding van de statistische distributies voor scenario’s (B) en (C) zullen we gebruik gaan maken van het grootkanoniek-ensembleconcept uit § 2.4.4. De Maxwell–Boltzmann distributie wordt vervolgens hieruit verkregen door een bepaalde (klassieke) limiet te nemen. Omdat de deeltjes niet-interagerend zijn gaan we werken met een bezettingsgetal-representatie op basis van een complete set 1-deeltjes observabelen waarvan de 1-deeltjes Hamilton-operator deel uitmaakt. De totale Hamilton-operator en totale teloperator van het veeldeeltjessysteem hebben in deze representatie een simpele additieve vorm:

$$\hat{N} = \sum_j \hat{n}_j \quad \text{en} \quad \hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N}) = \sum_j E_j \hat{n}_j, \quad (223)$$

met $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq \dots$ het op volgorde gezette volledig gespecificeerde 1-deeltjes energiespectrum. De statistische eigenschappen van het ensemble kunnen nu worden vastgelegd

door middel van de gemiddelde bezettingsgetallen $\bar{n}_k = [\hat{n}_k]$, immers

$$\bar{N} = \sum_j \bar{n}_j \quad \text{en} \quad \bar{E}_{\text{tot}} = \sum_j E_j \bar{n}_j . \quad (224)$$

Voor de grootkanonieke dichtheidsoperator $\hat{\rho} = \exp(-\beta\hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N}) - \alpha\hat{N})/\mathcal{Z}(\alpha, T)$ geldt dan

$$\hat{\rho}\hat{a}_k^\dagger = \exp(-\beta E_k - \alpha)\hat{a}_k^\dagger\hat{\rho} . \quad (225)$$

Bewijs: beschouw de operator $\hat{O}(\lambda) \equiv \exp(\lambda\hat{A})\hat{a}_k^\dagger\exp(-\lambda\hat{A})$, met de observabele in de exponent gegeven door $\hat{A} \equiv -\beta\hat{H}_{\text{tot}}(\hat{N}) - \alpha\hat{N} \stackrel{(223)}{=} -\sum_j (\beta E_j + \alpha)\hat{n}_j$. Met behulp van $[\hat{A}, \hat{a}_k^\dagger] \stackrel{(16)}{=} -(\beta E_k + \alpha)\hat{a}_k^\dagger$ kan dan voor willekeurige reële λ worden afgeleid dat

$$\frac{d}{d\lambda}\hat{O}(\lambda) = \exp(\lambda\hat{A})[\hat{A}, \hat{a}_k^\dagger]\exp(-\lambda\hat{A}) = -(\beta E_k + \alpha)\hat{O}(\lambda)$$

$$\Rightarrow \hat{O}(\lambda) = \exp(-\lambda[\beta E_k + \alpha])\hat{O}(0) : \quad \exp(\lambda\hat{A})\hat{a}_k^\dagger\exp(-\lambda\hat{A}) = \exp(-\lambda[\beta E_k + \alpha])\hat{a}_k^\dagger .$$

De bovenstaande operatoridentiteit wordt nu verkregen door in deze vergelijking $\lambda = 1$ te zetten en het resultaat van rechts te vermenigvuldigen met $\hat{\rho} = \exp(\hat{A})/\mathcal{Z}(\alpha, T)$.

De gezochte statistische distributie voor identieke deeltjes wordt hiermee

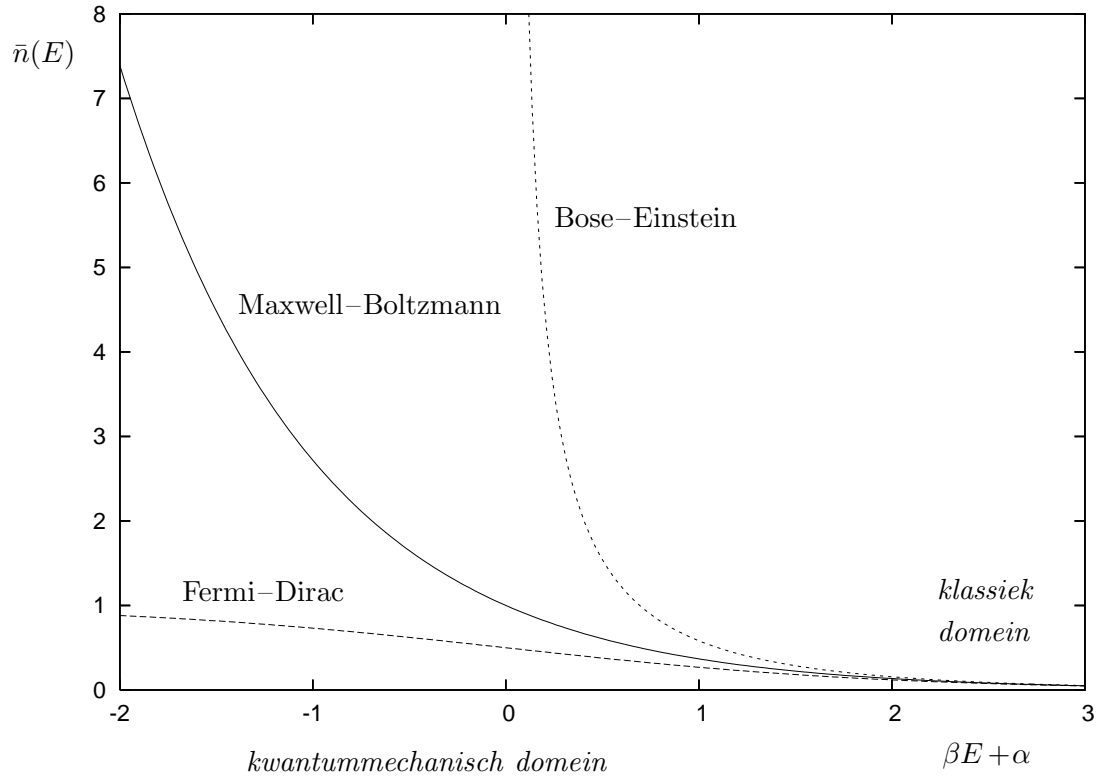
$$\begin{aligned} \bar{n}_k &\stackrel{(17),(137)}{=} \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k) \stackrel{(225)}{=} \exp(-\beta E_k - \alpha)\text{Tr}(\hat{a}_k^\dagger\hat{\rho}\hat{a}_k) = \exp(-\beta E_k - \alpha)\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{a}_k\hat{a}_k^\dagger) \\ &\stackrel{(26),(27)}{=} \exp(-\beta E_k - \alpha)\text{Tr}(\hat{\rho}[\hat{1} \pm \hat{n}_k]) \stackrel{(139)}{=} (1 \pm \bar{n}_k)\exp(-\beta E_k - \alpha) \\ \Rightarrow \bar{n}_k &= \frac{1}{\exp(\beta E_k + \alpha) \mp 1} , \end{aligned} \quad (226)$$

waarbij het minteken (plusteken) voor bosonen (fermionen) geldt. In de limiet $\alpha \rightarrow \infty$ doet de identiteit van de deeltjes er niet toe en gaan de kwantummechanische distributies over in de welbekende klassieke Maxwell–Boltzmann distributie $\bar{n}_k = \exp(-\beta E_k - \alpha)$. In deze limiet domineren 1-deeltjes kwantummechanische effecten de statistiek in verband met de onderdrukkingsfactor $\exp(-\alpha N)$ in de grootkanonieke dichtheidsmatrix.

Dit is kort samen te vatten in de volgende distributies voor het gemiddelde bezettingsgetal behorende bij een volledig gespecificeerd 1-deeltjes energieniveau met energie E :

$$\boxed{\bar{n}(E) = \frac{1}{\exp(\beta E + \alpha) + \gamma} , \quad \text{met} \quad \gamma^{\text{MB}} = 0 , \quad \gamma^{\text{BE}} = -1 \quad \text{en} \quad \gamma^{\text{FD}} = 1} . \quad (227)$$

Let wel: de temperatuur- en vluchtigheidsparameters β en α zijn niet onafhankelijk van elkaar in verband met de condities (181) voor de ensemblegemiddelden \bar{E}_{tot} en \bar{N} .



De volgende eigenschappen van deze distributies zijn onmiddellijk af te lezen uit het voorgaande plaatje.

- We zien dat de drie distributies elkaar benaderen voor grote waarden van $\beta E + \alpha$. Dit is bijvoorbeeld van toepassing in de hoge-energielimit of voor grote waarden van α . In zulke situaties doet de identiteit van de deeltjes er niet toe en gaat de kwantummechanische statistiek effectief over in de klassieke Maxwell-Boltzmann statistiek voor $\gamma = 0$.
- Zoals verwacht geldt dat $\bar{n}(E) \in [0, 1]$ voor de Fermi-Dirac distributie.
- Voor de Bose-Einstein distributie moet gelden dat $\beta E + \alpha > 0$ om te garanderen dat $\bar{n}(E) \geq 0$. Dus α is van onderen begrensd volgens $\alpha > -\beta E_{\text{grond}}$, met E_{grond} de 1-deeltjes grondtoestandsenergie.

De Fermi-energie: in de lage-temperatuurlimiet $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) gaat de Fermi-Dirac distributie over in een distributie

$$\bar{n}(E) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \begin{cases} 1 & \text{als } E < E_F \\ 0 & \text{als } E > E_F \end{cases},$$

zodat alle toestanden bezet zijn tot aan een maximale energie $E_F = -\lim_{\beta \rightarrow \infty} \alpha/\beta$. Voor een Fermi-gas moet deze maximale energie dus samenvallen met de definitie voor de Fermi-energie die is geïntroduceerd in § 2.5.

Uitvriezen van bosonische vrijheidsgraden: het feit dat $\beta E + \alpha \geq \beta E_{\text{grond}} + \alpha > 0$ voor de Bose–Einstein distributie heeft als rechtstreeks gevolg dat

$$\frac{\bar{n}(E)}{\bar{n}(E_{\text{grond}})} = \frac{\exp(\beta E_{\text{grond}} + \alpha) - 1}{\exp(\beta E + \alpha) - 1} \leq \exp(-\beta[E - E_{\text{grond}}]) .$$

Als er nu een eindig energiegat ΔE zit tussen de 1-deeltjes grondtoestand en de eerste aangeslagen toestand, dan zullen thermische excitaties zwaar onderdrukt zijn voor temperaturen $k_B T \ll \Delta E$. Zo'n situatie treedt bijvoorbeeld op bij een harmonische oscillator met karakteristieke frequentie ω voor temperaturen $k_B T \ll \hbar\omega$ (zie opgave 15 van het werkcollege). We spreken dan van het effectief uitvriezen van de desbetreffende bosonische vrijheidsgraad, aangezien de aangeslagen toestanden met één of meer bosonische energiekwanta $\hbar\omega$ nagenoeg niet bezet zijn. Het effectief uitvriezen van zo'n vrijheidsgraad gaat gepaard met een afname van de thermische respons (zoals warmtegeleiding) van het systeem. Bij complexe systemen zoals moleculaire gassen of kristalroosters kan dit fenomeen stapsgewijs optreden, waarbij voor afnemende temperatuur meer en meer vibratievrijheidsgraden uitvriezen.

Bose–Einstein condensatie: als $\beta E + \alpha \downarrow 0$ in de Bose–Einstein distributie, dan divergeert het bijbehorende gemiddelde bezettingsgetal. Deze scherpe toename van de bezettingsgraad is uniek voor de bosonische distributie en zal aanleiding geven tot het fysische fenomeen van Bose–Einstein condensatie. Het feit dat bosonen een verhoogde kans hebben om in dezelfde toestand te zitten kan er namelijk toe leiden dat een merkbare fractie van de deeltjes in de grondtoestand terecht komt bij eindige temperaturen. Of dit fenomeen ook daadwerkelijk kan optreden hangt af van het beschouwde systeem.

2.7 Ideale gassen in drie dimensies

Een belangrijk voorbeeld van niet-interagerende veeldeeltjessystemen in thermisch evenwicht zijn de ideale gassen. Deze bestaan uit niet-interagerende deeltjes met massa m en spin s die opgesloten zitten in een macroscopisch grote afgesloten ruimte met constant volume V . We nemen hier aan dat zich in de afgesloten ruimte een groot, nagenoeg constant aantal N vrije identieke deeltjes bevinden. Het 1-deeltjes energiespectrum dat hoort bij dit soort afgesloten systemen is afgeleid in §2.5. Vanwege het macroscopische volume en het grote aantal deeltjes kunnen we in de meeste situaties⁸ gebruik maken van de continuümlimiet (189) voor de 1-deeltjes toestandsdichtheid $D(E_{\text{kin}})$:

$$D(E_{\text{kin}}) = \begin{cases} \frac{2s+1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} V E_{\text{kin}}^{1/2} & \text{als } E_{\text{kin}} \geq 0 \\ 0 & \text{als } E_{\text{kin}} < 0 \end{cases} . \quad (228)$$

⁸Dit geldt niet voor ideale gassen bestaande uit identieke bosonen bij zeer lage temperaturen (zie de bespreking van Bose–Einstein condensatie in §2.7.2).

Het gemiddelde aantal gasdeeltjes met kinetische energie in het interval $[E_{\text{kin}}, E_{\text{kin}} + dE_{\text{kin}}]$ wordt dan gegeven door $n(E_{\text{kin}}, T) dE_{\text{kin}}$, met

$$n(E_{\text{kin}}, T) = \bar{n}(E_{\text{kin}}) D(E_{\text{kin}}) \stackrel{(227)}{=} \frac{D(E_{\text{kin}})}{\exp(\beta E_{\text{kin}} + \alpha) + \gamma}. \quad (229)$$

De grootte α wordt nu vastgelegd door de constante deeltjesdichtheid $\rho_N = N/V$:

$$\begin{aligned} \rho_N &= \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} dE_{\text{kin}} n(E_{\text{kin}}, T) \stackrel{(228),(229)}{=} \frac{2s+1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} dE_{\text{kin}} \frac{E_{\text{kin}}^{1/2}}{\exp(\beta E_{\text{kin}} + \alpha) + \gamma} \\ &\stackrel{x=\beta E_{\text{kin}}, (166)}{=} \frac{2s+1}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_{\text{B}}T}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{1/2}}{\exp(x + \alpha) + \gamma}, \end{aligned} \quad (230)$$

waarbij de integraal monotoon dalend is als functie van α . Deze laatste observatie zal een belangrijke rol blijken te spelen bij het fenomeen van Bose–Einstein condensatie in § 2.7.2. Gebruik makende van de zogenaamde thermische de Broglie-golflengte

$$\boxed{\lambda_T \equiv \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_{\text{B}}T}} = \text{karakteristieke thermische QM lengteschaal}} \quad (231)$$

kan vergelijking (230) worden herschreven tot

$$\boxed{\rho_N \lambda_T^3 / (2s+1) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{1/2}}{\exp(x + \alpha) + \gamma}}, \quad (232)$$

hetgeen een rechtstreeks verband legt tussen α en de temperatuur. De grootte van de rechterkant van deze vergelijking zal gaan bepalen of we met een inherent kwantummechanisch systeem of met een effectief klassiek systeem te maken hebben.

Kwantummechanisch geformuleerd is er sprake van een klassiek gas als de gemiddelde afstand tussen de deeltjes $\rho_N^{-1/3} \gg \lambda_T$, zodat het aantal deeltjes in het karakteristieke thermische volume λ_T^3 zeer klein is en de individuele golfpakketjes van de deeltjes effectief niet overlappen. Als $\rho_N^{-1/3} = \mathcal{O}(\lambda_T)$, dan bevindt het gas zich in het kwantummechanische domein.

Op dezelfde manier vinden we voor de gemiddelde totale energiedichtheid $U = \bar{E}_{\text{tot}}/V$ van het ideale gas dat

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} dE_{\text{kin}} E_{\text{kin}} n(E_{\text{kin}}, T) \stackrel{(228),(229)}{=} \frac{2s+1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} dE_{\text{kin}} \frac{E_{\text{kin}}^{3/2}}{\exp(\beta E_{\text{kin}} + \alpha) + \gamma} \\ &\stackrel{x=\beta E_{\text{kin}}, (166)}{=} \frac{2s+1}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_{\text{B}}T}{\hbar^2}\right)^{3/2} k_{\text{B}}T \int_0^{\infty} dx \frac{x^{3/2}}{\exp(x + \alpha) + \gamma}, \end{aligned}$$

hetgeen met behulp van vergelijking (230) kan worden herschreven tot

$$U = \rho_N k_B T \left(\int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{\exp(x + \alpha) + \gamma} \right) / \left(\int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{\exp(x + \alpha) + \gamma} \right). \quad (233)$$

Hieruit volgt dan bijvoorbeeld de warmtecapaciteit per eenheid van volume

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N}. \quad (234)$$

2.7.1 Klassieke gassen

Als $\alpha \gg 1$, dan geldt dat $\exp(x + \alpha) \gg \gamma$ en vallen de drie verschillende soorten distributies met elkaar samen. We spreken dan van klassieke gassen. De bijbehorende conditie (232) voor α vereenvoudigt tot

$$\rho_N \lambda_T^3 / (2s+1) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^{1/2} \exp(-x - \alpha) = \exp(-\alpha) \quad (235)$$

met behulp van de integraaluitdrukking $\int_0^\infty dx x^{1/2} \exp(-x) = \Gamma(3/2) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$. Als $\alpha \gg 1$, dan wordt de rechterkant van deze vergelijking inderdaad klein en kunnen we met recht spreken van een klassieke situatie. Deze situatie treedt op als de deeltjesdichtheid voldoende klein is en/of de temperatuur voldoende groot. Dit geldt bijvoorbeeld voor gassen bij kamertemperatuur en kamerdruk, waarvoor de kwantummechanische effecten ten gevolge van de identiteit van de deeltjes inderdaad onbelangrijk zijn.⁹ Zoals we op basis van de klassieke kinetische gastheorie al hadden verwacht laten klassieke gassen zich uitstekend beschrijven door de Maxwell–Boltzmann statistiek. Voor zulke klassieke gassen kan voor de gemiddelde totale energiedichtheid uit vergelijking (233) worden afgeleid dat

$$U \approx \frac{3}{2} \rho_N k_B T, \quad (236)$$

gebruik makende van de integraaluitdrukking $\int_0^\infty dx x^{3/2} \exp(-x) = \Gamma(5/2) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$. Hieruit volgt dan de typische warmtecapaciteit per eenheid van volume voor een klassiek gas:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{3}{2} \frac{N k_B}{V}, \quad (237)$$

geheel in overeenstemming met het principe van equipartitie van energie.

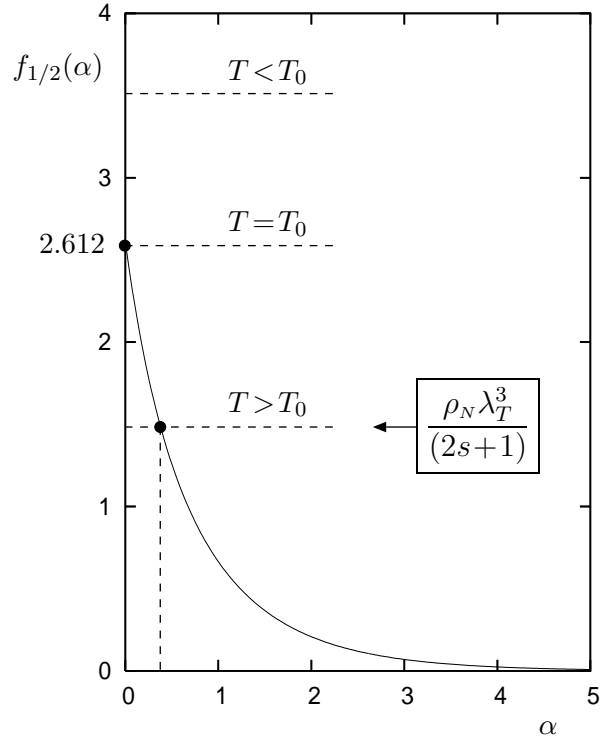
⁹De Fermi-gassen zoals beschreven in §2.5 vallen niet in deze categorie in verband met de zeer hoge deeltjesdichtheid. In het klassieke tijdperk zag men daarom ook geen aanleiding om zulke systemen als gassen te interpreteren.

2.7.2 Bose-gassen en Bose–Einstein condensatie (1925)

Voor ideale gassen bestaande uit identieke bosonen weten we dat er moet worden voldaan aan de eis $\alpha > -\beta E_{\text{grond}} = -\beta E_{\nu=\sqrt{3}} \approx 0$ om te garanderen dat $\beta E_{\text{kin}} + \alpha > 0$ en dus $n(E_{\text{kin}}, T) \geq 0$. Vergelijking (232) impliceert nu dat

$$\rho_N \lambda_T^3 / (2s+1) = f_{1/2}(\alpha) , \quad f_{1/2}(\alpha) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{1/2}}{\exp(x + \alpha) - 1} \quad (238)$$

waarbij het Bose-gas expliciet in het kwantummechanische domein zit als geldt dat $f_{1/2}(\alpha) = \mathcal{O}(1)$. De integraal $f_{1/2}(\alpha)$ is monotoon dalend (zie plaatje) en neemt dus de maximale waarde aan als α minimaal is. In verband met de voorwaarde dat $\alpha \geq 0$ treedt dit maximum op voor $\alpha = 0$ met bijbehorende eindige waarde $f_{1/2}(0) = 2.612$. Er gebeurt nu iets speciaals als de temperatuur wordt verlaagd tot een kritieke temperatuur T_0 waarvoor geldt dat vergelijking (238) als oplossing (d.w.z. het snijpunt met één van de horizontale stippellijnen in het plaatje) nou precies de minimale waarde van α en dus de maximale waarde van $f_{1/2}(\alpha)$ heeft:



$$\rho_N \lambda_{T_0}^3 / (2s+1) = f_{1/2}(0) \xrightarrow{(231), f_{1/2}(0)=2.612} T_0 = \frac{2\pi \hbar^2}{mk_B} \left(\frac{\rho_N}{2.612 (2s+1)} \right)^{2/3} . \quad (239)$$

Voor $T < T_0$ is er ineens geen oplossing meer te vinden van vergelijking (238) en moeten we concluderen dat er ergens iets mis is gegaan!

Om het lage-temperatuurgedrag van Bose-gassen goed te kunnen beschrijven moet er in feite zorgvuldig worden omgegaan met de laagst-energetische 1-deeltjes toestanden. Immers, vergeleken bij onderscheidbare deeltjes hebben identieke bosonen een versterkte neiging om in de grondtoestand te gaan zitten. In de continuümlimiet (189) geldt $D(0) = 0$, terwijl er in feite $2s+1$ verschillende 1-deeltjes toestanden zijn met de laagste energie $E_{\text{grond}} = E_{\nu=\sqrt{3}} \approx 0$. Derhalve moet de 1-deeltjes toestandsdichtheid $D(E_{\text{kin}})$ in eerste benadering worden vervangen door

$$D(E_{\text{kin}}) \rightarrow \bar{D}(E_{\text{kin}}) = D(E_{\text{kin}}) + (2s+1)\delta(E_{\text{kin}}) , \quad (240)$$

zodat geldt

$$\boxed{\rho_N = \frac{N_0}{V} + \lambda_T^{-3} (2s+1) f_{1/2}(\alpha) \quad , \quad N_0 = (2s+1) \bar{n}(0) \stackrel{(227)}{=} \frac{2s+1}{\exp(\alpha) - 1}} \quad (241)$$

waarbij N_0 het gemiddelde aantal bosonen in de grondtoestand weergeeft. Dit aantal is verwaarloosbaar ten opzichte van N , tenzij $\alpha = \mathcal{O}(1/N) \approx 0$. De deeltjesdichtheid in de grondtoestand begint derhalve een belangrijke rol te spelen als de temperatuur wordt verlaagd tot de kritieke temperatuur T_0 waarvoor $\alpha \approx 0$. Door te delen door ρ_N kan vergelijking (241) in termen van deze kritieke temperatuur worden herschreven tot

$$\boxed{\frac{N_0}{N} = 1 - \frac{(2s+1) f_{1/2}(\alpha)}{\rho_N \lambda_T^3} = 1 - \frac{f_{1/2}(\alpha)}{f_{1/2}(0)} \frac{\lambda_{T_0}^3}{\lambda_T^3} = 1 - \frac{f_{1/2}(\alpha)}{f_{1/2}(0)} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}} \quad (242)$$

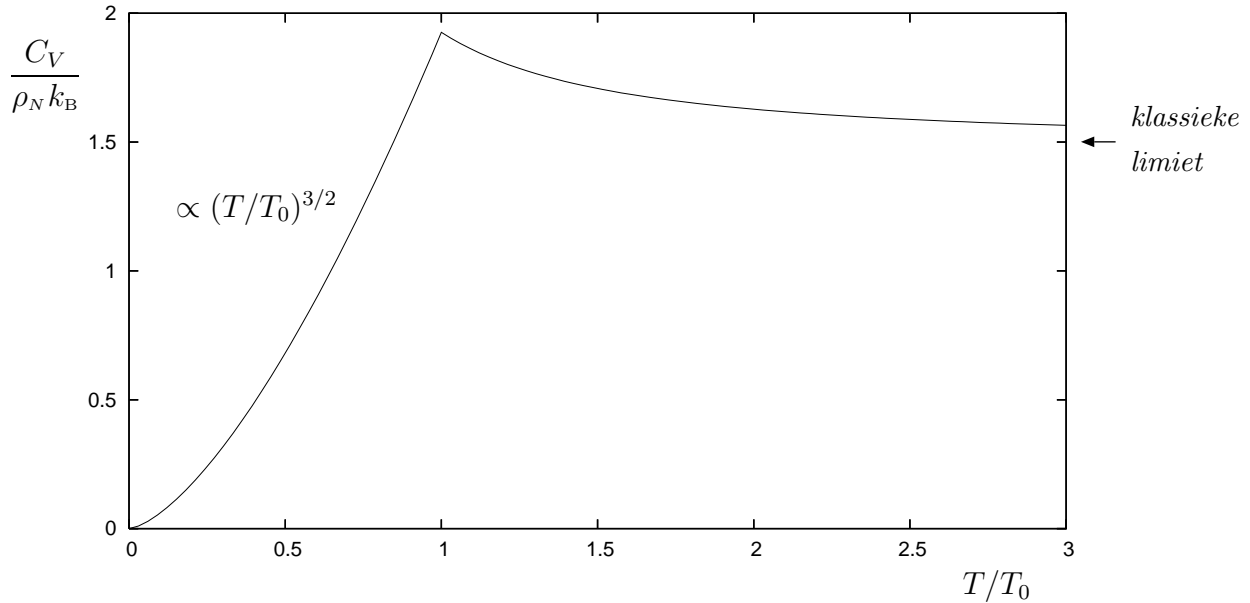
De laatste term aan de rechterkant geeft de fractie bosonen buiten de grondtoestand aan.

$\boxed{T < T_0}$: beneden de kritieke temperatuur moet een merkbaar deel van de bosonen in de grondtoestand zitten, omdat α niet kleiner dan 0 kan worden en er dus maximaal een fractie $(T/T_0)^{3/2} < 1$ van de bosonen buiten de grondtoestand kan zitten. We zeggen in dat geval dat de grondtoestand macroscopisch bezet is. Om een fractie $N_0/N = \mathcal{O}(1)$ van alle bosonen in de grondtoestand te krijgen moet op grond van vergelijking (241) gelden dat $\alpha = \mathcal{O}(1/N) \approx 0$. Derhalve geldt in zeer goede benadering dat de fractie bosonen in de grondtoestand wordt gegeven door

$$\frac{N_0}{N} \approx 1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}. \quad (243)$$

Dit fenomeen heet Bose–Einstein condensatie (BEC) en is feitelijk het gevolg van de neiging van identieke bosonen om in dezelfde toestand te zitten. Deze condensatie vindt plaats in de impulsruimte en moet dus niet worden verward met de gangbare betekenis van het woord condensatie als een overgang van een gas naar een vloeistof. Meer en meer condensatie treedt op naarmate de temperatuur lager of de dichtheid hoger wordt.¹⁰ Dit laatste volgt uit het feit dat volgens vergelijking (239) geldt dat $T_0 \propto \rho_N^{2/3}$. De bosonen in de grondtoestand vormen een gedegenereerd Bose-gas, hetgeen geen druk uitoefent en ook geen bijdrage levert tot de warmtecapaciteit. Bij lage temperaturen draagt alleen de fractie bosonen buiten het condensaat bij tot de druk en de warmtecapaciteit van het Bose-gas, hetgeen aanleiding geeft tot een extra factor $(T/T_0)^{3/2}$ in de temperatuurafhankelijkheid van deze grootheden (zie plaatje). Meer detail hierover wordt in het college Statistische

¹⁰Let wel: dit is niet eenvoudig te realiseren. Bij hoge dichtheden kunnen interacties tussen de bosonen de symmetrisatie-effecten namelijk relatief snel overstemmen en de condensatie volledig verstoren. Daarom moet de dichtheid toch meestal laag worden gehouden, zodat T_0 zeer dicht bij het absolute nulpunt van temperatuur kan komen te liggen (microkelvins of minder).



Mechanica gegeven. In §2.7.4 zal kort worden besproken waarom het realiseren van gasvormige Bose–Einstein condensaten in het laboratorium zodanig lastig bleek dat de eerste condensaten pas 70 jaar na de oorspronkelijke voorspelling konden worden geproduceerd.

$T > T_0$: in dat geval moet α merkbaar van 0 verschillen om te voorkomen dat de verhouding N_0/N in vergelijking (242) negatief wordt. Automatisch zit dan slechts een verwaarloosbare fractie van de bosonen in de grondtoestand.

De bezetting van de eerste aangeslagen toestand voor $T < T_0$: om hierover iets zinvols te kunnen zeggen bekijken we het discrete 1-deeltjes energiespectrum (184) voor een deeltje in een kubusvormige doos. Voor het energieverval tussen de grondtoestand met $\nu = \sqrt{3}$ en de eerste aangeslagen toestand met $\nu = \sqrt{6}$ geldt het volgende:

$$\beta(E_{\text{ex}} - E_{\text{grond}}) = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2k_B T} \stackrel{V=L^3}{=} N^{-2/3} \frac{T_0}{T} \frac{3\hbar^2\rho_N^{2/3}}{8mk_B T_0} \stackrel{(231)}{=} N^{-2/3} \frac{T_0}{T} \frac{3\pi}{4} (\rho_N \lambda_{T_0}^3)^{2/3}$$

$$\stackrel{(239)}{=} N^{-2/3} \frac{T_0}{T} \frac{3\pi}{4} (2.612(2s+1))^{2/3} = \mathcal{O}(N^{-2/3} T_0/T).$$

De maximale gemiddelde bezetting van het eerste aangeslagen energieniveau wordt bereikt voor de minimale waarde van α , namelijk $\alpha \downarrow -\beta E_{\text{grond}}$:

$$\bar{n}(E_{\text{ex}}) \leq \frac{1}{\exp(\beta[E_{\text{ex}} - E_{\text{grond}}]) - 1} = \frac{1}{\exp(\mathcal{O}[N^{-2/3} T_0/T]) - 1} \leq \mathcal{O}(N^{2/3}) \ll N.$$

Dus uitsluitend de 1-deeltjes grondtoestand kan in een 3-dimensionaal Bose-gas macroscopisch worden bezet. Het vlakbij gelegen eerste aangeslagen energieniveau kan zeer veel deeltjes bevatten, maar komt toch niet tot een macroscopische bezetting.

De fase-overgang bij $T = T_0$: zoals op pagina 92 is uitgelegd wordt het kwantummechanische domein van een ideaal gas bereikt als $\rho_N \lambda_T^3 = \mathcal{O}(1)$. In dat geval zullen de golfpakketjes van de afzonderlijke deeltjes overlappen, zodat de kwantummechanische onderscheidbaarheid van identieke deeltjes relevant wordt. Dit is inderdaad het geval in de buurt van de kritieke temperatuur T_0 . Het bijzondere aan T_0 is dat het gas bij die temperatuur een abrupte overgang (faseovergang) doormaakt.

Voor een willekeurige temperatuur $T < T_0$ bestaat een ideaal Bose-gas uit een vast, verzadigd aantal deeltjes in aangeslagen toestanden. De verdeling van deze deeltjes heeft een kanonieke vorm: het wordt beschreven door een Bose-Einstein distributie met $\alpha = 0$. De resterende deeltjes zitten in de grondtoestand, die daardoor macroscopisch bezet wordt. De aanwezigheid van dit condensaat brengt in rekening dat er sprake is van een deeltjesbehoudswet.

Bewijs: voor $T < T_0$ verdwijnt α en worden de aangeslagen toestanden maximaal bezet overeenkomstig een kanonieke verdeling. Het aantal deeltjes buiten de grondtoestand wordt op basis van vergelijking (243) gegeven door $N(T/T_0)^{3/2}$. Wanneer nu bij gelijkblijvende temperatuur het aantal deeltjes met een factor f wordt opgehoogd, dan geldt

$$N \rightarrow fN \quad \xrightarrow{(239)} \quad T_0 \rightarrow f^{2/3} T_0 \quad \text{en} \quad N(T/T_0)^{3/2} \rightarrow N(T/T_0)^{3/2},$$

zodat het aantal deeltjes buiten de grondtoestand inderdaad constant blijft. Dit hadden we trouwens ook direct uit vergelijking (239) kunnen aflezen, aangezien

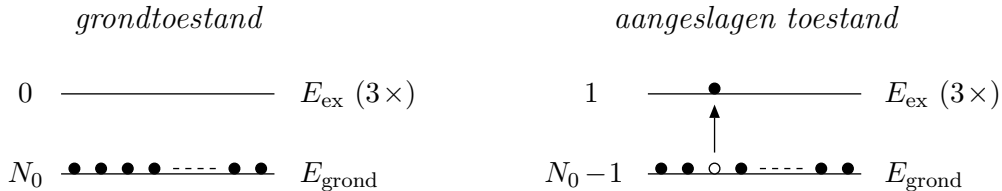
$$N(T/T_0)^{3/2} \xrightarrow{(231),(239)} 2.612 (2s+1) V / \lambda_T^3$$

inderdaad onafhankelijk is van de deeltjesdichtheid en uitsluitend afhangt van het aantal keren dat het karakteristieke thermische volume λ_T^3 in het systeemvolume V past.

Het feit dat we in het voorgaande deeltjes hebben toegevoegd is uitsluitend terug te vinden in de bezetting van de grondtoestand! Je zou kunnen zeggen dat dit condensaat “geen volume in beslag neemt”, omdat het geen druk uitoefent, en derhalve vrijelijk aangepast kan worden om de juiste totale deeltjesdichtheid te geven. Vandaar dat de Bose-Einstein distributie een $\mathcal{O}(N)$ statistische spreiding zal hebben in de bezetting van de grondtoestand, zoals in opgave 20 van het werkcollege is afgeleid. In opgave 7 van het werkcollege is verder uitgewerkt dat de aanwezigheid van het condensaat wordt gekenmerkt door lange-afstandscorrelaties (“long-range order”), in verband met de bijbehorende macroscopische de Broglie-golflengte. Het condensaat gedraagt zich als een soort materiegolf die bij benadering kwantummechanisch te beschrijven is aan de hand van een complexe functie (ordeparameter) $\psi_0 = \sqrt{N_0} \exp(i\phi_0)$.

Kwantummechanische ononderscheidbaarheid en Bose–Einstein condensatie:

de reden waarom er geen condensaatvorming kan optreden als de deeltjes onderscheidbaar zijn volgt uit het aantal mogelijkheden om deeltjes vanuit de grondtoestand aan te slaan. Stel er zitten N_0 spin-0 deeltjes in de grondtoestand. Dan zijn er $3N_0$ mogelijke eerste aangeslagen toestanden voor onderscheidbare deeltjes en slechts 3 voor ononderscheidbare deeltjes.



Voor grote N_0 wordt het entropisch gunstiger voor onderscheidbare deeltjes om te worden aangeslagen in verband met de entropiewinst $k_B \ln(3N_0)$. Voor ononderscheidbare deeltjes is deze entropiewinst beduidend kleiner en onafhankelijk van N_0 , namelijk $k_B \ln(3)$, zodat er geen entropische belemmering is voor een groot aantal deeltjes in de grondtoestand.

Bose–Einstein condensatie versus $D(E_{\text{kin}})$ voor lage energieën: het voorgaande ononderscheidbaarheidsargument is nog geen garantie voor de vorming van een condensaat. Als de continue toestandsdichtheid voor laag-energetische 1-deeltjes toestanden niet klein is, dan zijn er alsnog vele mogelijkheden om een deeltje met een minimum aan energietoename aan te slaan. Dit leidt er dan toe dat het toch niet tot een macroscopische bezetting van de grondtoestand komt. In bovenstaande afleiding voor het 3-dimensionale Bose-gas was het voor het optreden van Bose–Einstein condensatie cruciaal dat de monotoon dalende integraal $f_{1/2}(\alpha)$ eindig bleef toen α de minimale waarde bereikte. In opgave 21 van het werkcollege zal worden nagegaan hoe de mogelijkheid van een Bose–Einstein condensaat afhangt van de dimensionaliteit van het systeem en van de relatie tussen energie en impuls van de deeltjes. De samengevatte conclusie van deze opgave is

Bose–Einstein condensatie is inderdaad niet mogelijk als $D(E_{\text{kin}})$ niet verdwijnt voor E_{grond} : in dat geval is $\int_{-\infty}^{\infty} dE_{\text{kin}} D(E_{\text{kin}}) / [\exp(\beta E_{\text{kin}} + \alpha) - 1]$ niet eindig voor $\alpha \downarrow -\beta E_{\text{grond}}$ en hoeft de continue toestandsdichtheid $D(E_{\text{kin}})$ ook niet gecorrigeerd te worden.

De rol van de deeltjesbehoudswet: als er geen deeltjesbehoudswet geldt, dan is er geen reden voor het vormen van een condensaat. Een voorbeeld hiervan is een fotongas dat in thermisch evenwicht is met een atomair warmtebad (zie § 4.3.2). Ten gevolge van de absorptie door de atomen komen de fotonen namelijk niet als deeltjes in het atomaire warmtebad terecht en dragen ze uitsluitend bij tot de thermodynamische energiebalans. De entropie van het warmtebad is in dat geval dan ook onafhankelijk van het aantal fotonen. Een kanoniek ensemble van systemen met een vast aantal deeltjes kan echter

wel aanleiding geven tot Bose–Einstein condensatie, zoals bijvoorbeeld het geval is voor de laag-energetische fotonen in de “curved-mirror microresonator” van opgave 15. In dat geval fungeert het vaste deeltjesaantal als randvoorwaarde op de bezettingsgetallen van de 1-deeltjes energieniveaus, hetgeen voor $T < T_0$ nagenoeg dezelfde werking heeft als het vasthouden van het ensemblegemiddelde \bar{N} in het geval van een grootkanoniek ensemble.

2.7.3 Fermi-gassen bij $T \neq 0$ (geen tentamenstof)

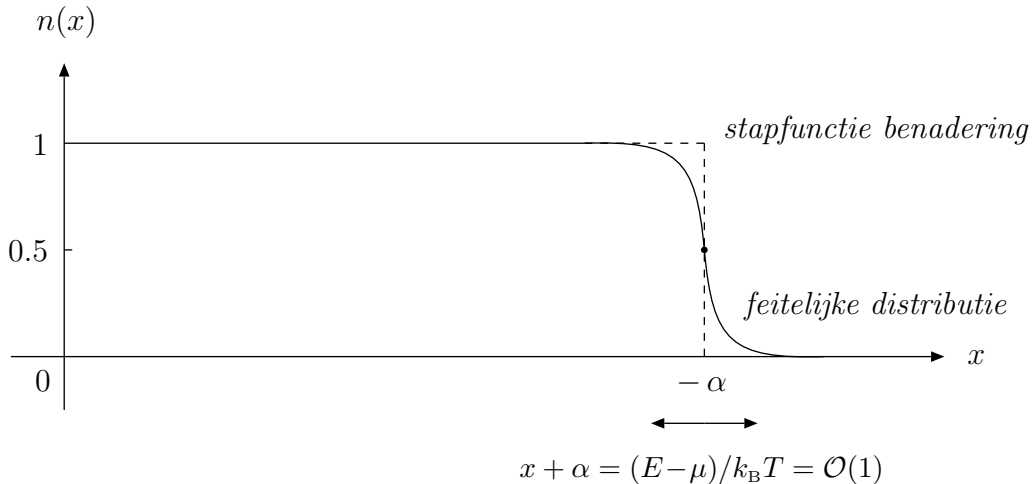
Voor ideale gassen bestaande uit identieke fermionen is er geen sprake van een condensaat, aangezien slechts $2s + 1$ fermionen in de grondtoestand kunnen zitten op grond van het Pauli-uitsluitingsprincipe. We hoeven dan ook geen correctie uit te voeren op de continue toestandsdichtheid $D(E_{\text{kin}})$. Nu geldt simpelweg dat

$$\rho_N \lambda_T^3 / (2s + 1) = g_{1/2}(\alpha) \quad , \quad g_{1/2}(\alpha) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{\exp(x + \alpha) + 1} . \quad (244)$$

Het lage-temperatuurdomein (gedegeneerde Fermi-gassen): voor Fermi-gassen spreken we van lage temperaturen als $\rho_N \lambda_T^3$ groot is, hetgeen inhoudt dat α sterk negatief moet zijn om aan vergelijking (244) te kunnen voldoen. In dat geval geldt de volgende integraalbenadering voor een functie $G(x)$ die langzamer dan exponentieel groeit voor grote x :

$$\int_0^\infty dx \frac{G(x)}{\exp(x + \alpha) + 1} \approx \left(1 + \mathcal{O}[\alpha^{-2}]\right) \int_0^{-\alpha} dx G(x) , \quad (245)$$

mits de integraal aan de rechterkant bestaat. Deze benadering volgt uit het feit dat de functie $n(x) \equiv [\exp(x + \alpha) + 1]^{-1}$ zich voor grote $-\alpha$ effectief als een stapfunctie gedraagt, met een afwijking die symmetrisch is rond $x = -\alpha$ (zie plaatje). Deze afwijking is alleen significant voor een beperkt x -waardenbereik: $x + \alpha = (E - \mu)/k_B T = \mathcal{O}(1)$, hetgeen overeenkomt met kinetische energieën die slechts $\mathcal{O}(k_B T)$ van de Fermi-energie verschillen.



Voor een gedegeneerd Fermi-gas geldt op grond van vergelijking (244) dus bij benadering het volgende verband tussen α , ρ_N en T :

$$\begin{aligned} \rho_N \lambda_T^3 / (2s+1) &\approx \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (-\alpha)^{3/2} \left(1 + \mathcal{O}[\alpha^{-2}]\right) \\ \xrightarrow{(231)} -\alpha &\approx \frac{\hbar^2}{2mk_B T} \left(\frac{6\pi^2 \rho_N}{2s+1}\right)^{2/3} \xrightarrow{(198)} \frac{E_F}{k_B T} \xrightarrow{(201)} \frac{T_F}{T}. \end{aligned} \quad (246)$$

Deze relatie geldt dus tot op $\mathcal{O}(\alpha^{-2}) = \mathcal{O}(T^2/T_F^2)$. We herkennen in E_F en T_F onmiddellijk de Fermi-energie en Fermi-temperatuur zoals die voor Fermi-gassen bij $T = 0$ zijn afgeleid in vergelijkingen (198) en (201). In overeenstemming met de voorbeelden die in § 2.5 zijn behandeld zien we dat het domein van gedegeneerde Fermi-gassen overeenkomt met $-\alpha \approx T_F/T \gg 1$, hetgeen te bereiken is door de temperatuur te verlagen of de dichtheid en daarmee T_F te verhogen. Aan de thermische respons van een gedegeneerd Fermi-gas zal slechts een $\mathcal{O}(T/T_F)$ fractie van de deeltjes deelnemen. Dit is af te lezen uit vergelijking (233) als gebruik wordt gemaakt van de integraalbenadering (245):

$$\begin{aligned} U &\approx \rho_N k_B T \frac{\frac{2}{5}(-\alpha)^{5/2}}{\frac{2}{3}(-\alpha)^{3/2}} \left(1 + \mathcal{O}[\alpha^{-2}]\right) \xrightarrow{(246)} \frac{3}{5} \rho_N k_B T_F \left(1 + \mathcal{O}[T^2/T_F^2]\right) \\ \Rightarrow C_V &= \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,N} = \mathcal{O}(\rho_N k_B T/T_F). \end{aligned} \quad (247)$$

Meer detail zal wederom in het college Statistische Mechanica worden gegeven. In tegenstelling tot de Bose-gassen dragen in het geval van een gedegeneerd Fermi-gas nagenoeg alle deeltjes bij tot de kinetische energie en de druk van het gas, ongeacht de temperatuur.

Chemische potentiaal: in de statistische mechanica wordt α over het algemeen herschreven in termen van de zogenaamde chemische potentiaal

$$\boxed{\mu \equiv -\frac{\alpha}{\beta} \xrightarrow{(166)} -\alpha k_B T}. \quad (248)$$

Voor een gedegeneerd Fermi-gas geldt dan dat $\mu \approx E_F$, zodat

$$\bar{n}(E) \xrightarrow{(227)} \frac{1}{\exp(\beta[E - \mu]) + 1} \approx \frac{1}{\exp(\beta[E - E_F]) + 1}. \quad (249)$$

Voor een volledig gedegeneerd Fermi-gas bij $T = 0$ zijn dan alle toestanden bezet tot aan deze Fermi-energie:

$$\bar{n}(E) = \begin{cases} 1 & \text{als } E < E_F \\ 0 & \text{als } E > E_F \end{cases},$$

in overeenstemming met de definitie in § 2.5.

Voorbeeld: Pauli-paramagnetisme van een gedegeneerd elektrongas.

Beschouw een ideaal elektrongas met een constant volume V en een constant aantal elektronen N . Neem aan dat voor de temperatuur geldt dat $T \ll T_F$, zodat de chemische potentiaal μ van het gas voldoet aan $\beta\mu = \mu/k_B T \gg 1$. Plaats dit systeem in een zeer zwak constant homogeen magneteveld in de z -richting, $\vec{\mathcal{B}} = \mathcal{B}\vec{e}_z$. In de spinruimte geeft dit aanleiding tot een extra interactie

$$\hat{H}_B^{\text{spin}} = -\hat{\mathcal{M}}_S \cdot \vec{\mathcal{B}} = -\mathcal{B} \hat{\mathcal{M}}_S \cdot \vec{e}_z = \frac{2\mu_B \mathcal{B}}{\hbar} \hat{S}_z \quad (0 < \mu_B \mathcal{B} \ll k_B T \ll \mu),$$

in termen van het Bohr-magneton μ_B . Zoals is uitgelegd op pagina 74 zorgt de door het magneteveld geïnduceerde spininteractie hier voor een opsplitsing van de kinetische 1-deeltjes energieniveaus, zodat de spinontarding wordt opgeheven. Het gemiddeld aantal elektronen met spin parallel (\bar{N}_+) en antiparallel (\bar{N}_-) aan het magneteveld wordt dan gegeven door

$$\bar{N}_\pm = \int_{-\infty}^{\infty} dE_\pm \frac{D_\pm(E_\pm)}{\exp(\beta[E_\pm - \mu]) + 1} \stackrel{(196)}{=} \int_{\pm\mu_B \mathcal{B}}^{\infty} dE_\pm \frac{\frac{1}{2} D(E_\pm \mp \mu_B \mathcal{B})}{\exp(\beta[E_\pm - \mu]) + 1},$$

met E_\pm de 1-elektron energie voor toestanden met spincomponent $\pm \hbar/2$ langs de z -as en $D(E_{\text{kin}})$ de kinetische 1-deeltjes toestandsdichtheid (228) voor $m = m_e$ en $s = 1/2$. Gebruik makende van de integraaltransformatie

$$E_\pm = E_{\text{kin}} \pm \mu_B \mathcal{B}$$

kan dit worden vereenvoudigd tot

$$\bar{N}_\pm = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} dE_{\text{kin}} \frac{E_{\text{kin}}^{1/2}}{\exp(\beta[E_{\text{kin}} - \mu \pm \mu_B \mathcal{B}]) + 1}, \quad (250)$$

waarbij E_{kin} de kinetische 1-elektron energie is. Hiermee kunnen de volgende additieve formules worden afgeleid voor de (constante) deeltjesdichtheid en de magnetisatiedichtheid, d.w.z. het gemiddeld magnetisch moment per volume-eenheid in de richting van het magneteveld:

$$\rho_N = \frac{N}{V} = \frac{\bar{N}_+ + \bar{N}_-}{V},$$

$$\bar{M}_S \equiv \frac{1}{V\mathcal{B}} [\hat{\mathcal{M}}_{S_{\text{tot}}}^{(1)} \cdot \vec{\mathcal{B}}] = -\frac{2\mu_B}{\hbar V} [\hat{S}_{\text{tot}}^{(1)} \cdot \vec{e}_z] \stackrel{(53)}{=} -\frac{\mu_B}{V} (\bar{N}_+ - \bar{N}_-). \quad (251)$$

Met behulp van de integraalbenadering (245) is dit voor $\mu_B \mathcal{B} \ll \mu$ te schrijven als

$$\rho_N \approx \frac{1}{6\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left([\mu - \mu_B \mathcal{B}]^{3/2} + [\mu + \mu_B \mathcal{B}]^{3/2} \right) \approx \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e \mu}{\hbar^2} \right)^{3/2},$$

$$\bar{M}_S \approx \frac{\mu_B}{6\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left([\mu + \mu_B \mathcal{B}]^{3/2} - [\mu - \mu_B \mathcal{B}]^{3/2} \right) \approx \frac{1}{6\pi^2} \left(\frac{2m_e \mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left(\frac{3\mu_B^2 \mathcal{B}}{\mu} \right).$$

In laagste-orde benadering geldt dus dat $\mu \approx E_F$ en

$$\overline{M}_s \approx \mu_B^2 \frac{3\rho_N}{2E_F} \mathcal{B} \xrightarrow{E_F = k_B T_F} \chi_s(T) \equiv \left(\frac{d\overline{M}_s}{d\mathcal{B}} \right)_{\mathcal{B}=0} = \mu_B^2 \frac{3\rho_N}{2k_B T_F}. \quad (252)$$

De paramagnetische susceptibiliteit $\chi_s(T)$ van het beschouwde elektrongas is dus constant voor $T \ll T_F$. Dit lage-temperatuurfenomeen wordt Pauli-paramagnetisme genoemd. Het brengt tot uitdrukking dat een gedegeneerd Fermi-gas niet voldoet aan de klassieke wet van Curie $\chi_s(T) \propto T^{-1}$ voor zwakke magneetvelden. Dit wordt veroorzaakt door de effectieve kwantummechanische interactie ten gevolge van de fermionische antisymmetrisatieprocedure. In de klassieke hoge-temperatuurlimiet wordt het uitlijnen van de magnetische momenten door het magneetveld tegengegaan door thermische wanorde. Dit leidt tot een magnetisatie-dichtheid die afhangt van de verhouding tussen de magnetische interactie-energie $\mu_B \mathcal{B}$ en de karakteristieke thermische energie $k_B T$, resulterend in een $1/T$ temperatuurafhankelijkheid van de paramagnetische susceptibiliteit. Bij lage temperaturen neemt slechts een $\mathcal{O}(T/T_F)$ fractie van de elektronen deel aan thermische excitaties, zodat de $1/T$ temperatuurafhankelijkheid plaatsmaakt voor een temperatuurafhankelijke factor $1/T_F$. Het uitsluitingsprincipe gaat het uitlijnen van de magnetische momenten dus efficiënter tegen dan thermische wanorde, aangezien een gedegeneerd Fermi-gas een karakteristieke temperatuur T_F heeft die vele malen groter is dan de feitelijke omgevings-temperatuur T .

2.7.4 Experimentele realisatie van Bose–Einstein condensaten

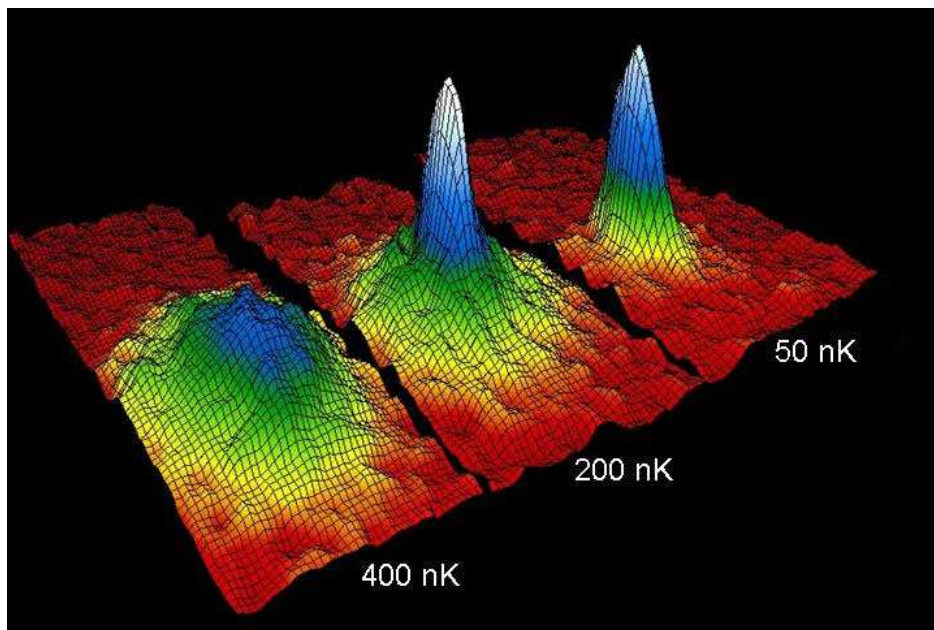
Superfluïde helium: ^4He -atomen bestaan uit twee protonen, twee neutronen en twee elektronen, zodat de bijbehorende totale spin geheeltallig is. De ^4He -atomen zijn dus op te vatten als bosonen. Ze voldoen aan de Bose–Einstein statistiek en kunnen derhalve aanleiding geven tot de vorming van een Bose–Einstein condensaat bij lage temperaturen. Zoals in § 1.6.4–1.6.6 is beargumenteerd speelt dit condensaat een belangrijke rol bij het verschijnsel van superfluiditeit in vloeibaar ^4He bij temperaturen beneden 2.2 K. Het zeldzame ^3He -isotoop bestaat uit twee protonen, één neutron en twee elektronen, zodat de bijbehorende totale spin halftallig is. De ^3He -atomen zijn dus op te vatten als fermionen. Ze voldoen aan de Fermi–Dirac statistiek en kunnen derhalve geen aanleiding geven tot eenzelfde type condensaat als ^4He -atomen. Paren van ^3He -atomen kunnen echter weer wel aanleiding geven tot bosonische effecten. Ten gevolge van “pairing” effecten treedt er ook superfluiditeit op in ^3He , maar dan wel pas bij temperaturen beneden 2 mK. Een voorbeeld van het fenomeen “pairing” zal in § 2.8 worden behandeld in de context van supergeleiding.

Ultrakoude verdunde gassen: het bestaan van superfluiditeit werd lange tijd als indicatie gezien dat Bose–Einstein condensatie zoals beschreven in § 2.7.2 in het lab te realiseren zou moeten zijn. Echter, meer dan dat kon men niet zeggen, aangezien het bij

superfluiditeit om een vloeistof ging en niet om een ideaal of zwak-interagerend gas. Het realiseren van een Bose–Einstein condensaat in een nagenoeg ideaal gas heeft ongeveer 70 jaar op zich laten wachten. Het probleem zat in het koelen van zo'n gas zonder dat daarbij een vloeistof of vaste stof zou ontstaan en zonder dat er daarbij molecuulvorming zou optreden. Om dit te realiseren moesten verdunde, neutrale gassen worden gebruikt, die geen contact hadden met wanden om vastvriezen te voorkomen. Dit introduceerde twee nieuwe uitdagingen:

- om een Bose–Einstein condensaat te realiseren in een gas met lage dichtheid zijn zeer lage temperaturen nodig, immers $T_0 \propto \rho_N^{2/3}$;
- het gas moet gekoeld worden zonder fysiek contact met de buitenwereld.

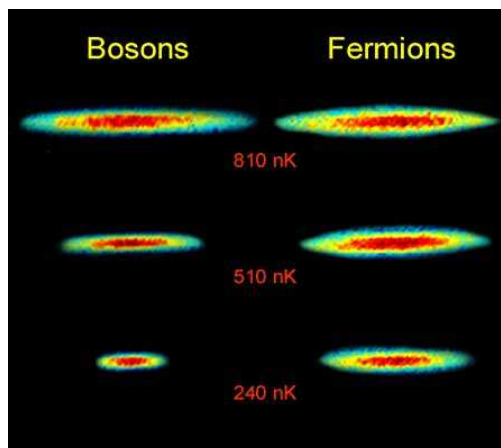
Met behulp van twee geavanceerde koeltechnieken, te weten laserkoeling en “evaporative cooling” (zie § 5.3 van het college Kwantummechanica 2 voor een beschrijving), realiseerden Eric Cornell en Carl Wieman in 1995 uiteindelijk het eerste gasvormige Bose–Einstein condensaat bestaande uit een duizendtal rubidium-87 atomen bij een temperatuur van 170 nK. In datzelfde jaar lukte dit ook in ultrakoude verdunde gassen van lithium-7 atomen (Randy Hulet) en natrium-23 atomen (Wolfgang Ketterle), waarbij in het laatste geval het aantal condensaatatomen al bijna verduizendvoudigd was. In 2001 ontvingen Cornell, Wieman en Ketterle voor deze prestatie de Nobelprijs.



Cornell & Wieman, JILA, 1995: overgang van een “normaal” gas naar een condensaat. Snelheidsverdeling van de gasdeeltjes voor $T > T_0$, $T < T_0$ en $T \ll T_0$.

Toepassing: isotoopeffecten voor lithium.

In dit experiment werden ultrakoude gasen gebruikt bestaande uit fermionische ${}^6\text{Li}$ -atomen en bosonische ${}^7\text{Li}$ -atomen. Bij zeer lage temperaturen verwachten we dat een magnetisch opgesloten ${}^6\text{Li}$ -gas een grotere ruimtelijke uitgebreidheid zal hebben dan een ${}^7\text{Li}$ -gas, aangezien de gemiddelde kinetische energie in het eerste geval groter is. Zoals uit nevenstaand plaatje is af te lezen werd dit inderdaad experimenteel waargenomen.

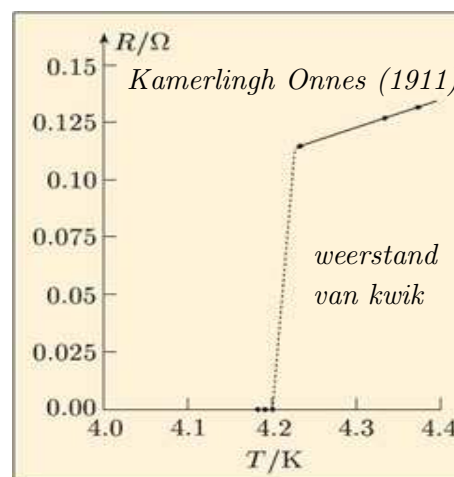


R.G. Hulet et al., Rice University, 2005

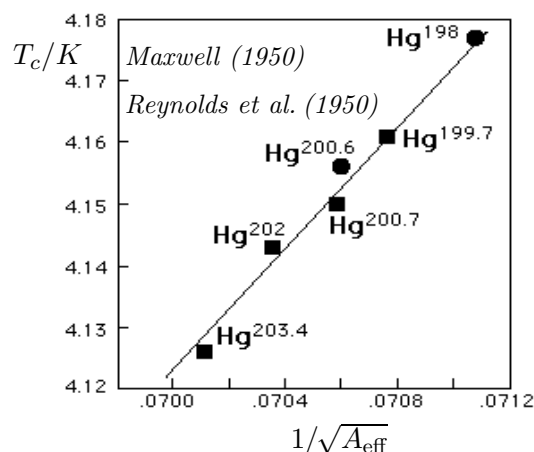
2.8 Lage-temperatuur supergeleiding (geen tentamenstof)

Supergeleiding: als toepassing van de verschillende concepten die in de eerste twee hoofdstukken zijn behandeld bekijken we nu het kwantummechanische lage-temperatuurverschijnsel van supergeleiding.

We spreken van een supergeleider als de weerstand van een geleider abrupt verdwijnt beneden een bepaalde kritische temperatuur T_c (zie plaatje). Een deel van de ladingsdragende geleidingselectronen zit dan in een collectieve superfluïde toestand, zodat ze zich wrijvingsloos door het ionenrooster van de geleider kunnen voortbewegen. De lage snelheid van zo'n superfluïde stroming wordt gecompenseerd door het massale karakter van het superfluïde collectief, zodat desondanks toch een substantiële stroom kan worden genereerd.



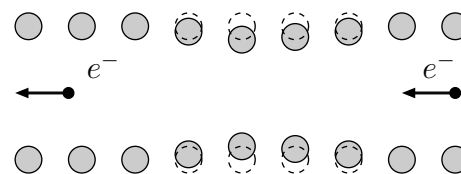
Het rooster speelt een rol: door verschillende isotopen voor de roosterionen te gebruiken werd experimenteel aangetoond dat naast de elektronenconfiguratie ook het rooster zelf een rol speelt bij het tot stand komen van supergeleiding. Er werd namelijk gevonden dat de kritische temperatuur T_c voor lage-temperatuur supergeleiding in dat geval afhangt van de massa A_{eff} van het isotoop in atomaire massa-eenheden.



BCS theorie en Cooper-paren: het fysische plaatje achter de voorgaande observaties werd in 1957 geformuleerd in de zogenaamde BCS (Bardeen–Cooper–Schrieffer) theorie.

De BCS theorie zegt dat een geleidingselektron dat zich door het rooster voortbeweegt excitaties (golven) veroorzaakt in het rooster (fononemissie). De roosterionen zijn immers positief geladen en worden dus door het negatief geladen elektron aangetrokken, waardoor het rooster een lichte vervorming ondergaat.

De tijdschaal waarop deze vervorming in de tijd evolueert is zeer langzaam (adiabatisch) vergeleken bij de bewegingen van de veel lichtere elektronen. Alvorens het rooster nu terugveert kan een ander elektron worden aangetrokken door de ontstane fluctuatie in de ladingsdichtheid. Dit elektron kan vervolgens de gekwantiseerde roostertrilling absorberen (fononabsorptie). Ten gevolge van deze lange-afstandsinteractie via het rooster kan nu een netto attractieve interactie ontstaan tussen paren van elektronen die elkaar normaalgesproken zouden afstoten. Zo'n attractief elektronpaar wordt een Cooper-paar genoemd. Het is de “vloeistof” van deze Cooper-paren dat zich bij voldoende lage temperaturen wrijvingsloos door het rooster kan voortbewegen (in analogie met het “two-fluid model” voor superfluïde ^4He).



Het Cooper-paar concept

Normale geleiders versus supergeleiders: aan de hand van dit model kunnen we onmiddellijk één van de fundamentele verschillen tussen normale geleiders en supergeleiders begrijpen. Des te starder het ionenrooster namelijk is

- des te beter is een normale geleider, aangezien de vrije weglengte voor de geleidings-elektronen dan groter is;
- des te slechter is een supergeleider, aangezien er in verband met de verminderde interactie met het rooster minder Cooper-paarvorming zal plaatsvinden.

2.8.1 Welke elektronen vormen Cooper-paren?

Om deze vraag te beantwoorden beschouwen we net als in §1.7.1 een systeem bestaande uit een zeer groot, constant aantal N elektronen met massa m . De elektronen zitten opgesloten in een grote kubus met ribben L en periodieke randvoorwaarden, zodat er sprake is van een discreet impulsspectrum

$$\{\vec{p} = \hbar\vec{k} : k_{x,y,z} = 0, \pm 2\pi/L, \pm 4\pi/L, \dots\} . \quad (253)$$

Verder wordt aangenomen dat de temperatuur zodanig laag is dat het systeem praktisch gezien in de grondtoestand zit. In afwezigheid van een onderlinge interactie tussen de

elektronen kan de totale Hamilton-operator van het identieke niet-interagerende veeldeeltjessysteem in de impulsrepresentatie worden geschreven als

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, m_s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}, m_s}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, m_s}, \quad (254)$$

met energie-eigenwaarden

$$E = \sum_{\vec{k}, m_s} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} n_{\vec{k}, m_s}. \quad (255)$$

Hierbij geeft het additionele kwantumgetal $m_s = \pm \frac{1}{2}$ aan dat het elektron een spincomponent $m_s \hbar$ langs de kwantisatie-as heeft. Voor de grondtoestand van het niet-interagerende N -deeltjessysteem geldt nu dat $n_{\vec{k}, m_s} = 1$ als $|\vec{k}| \leq k_F$ en $n_{\vec{k}, m_s} = 0$ als $|\vec{k}| > k_F$. De volledig gespecificeerde 1-deeltjes energieniveaus zijn dus van onder af aan bezet met één elektron tot aan de Fermi-energie $E_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m)$, waarvoor geldt dat

$$N = \sum_{\vec{k}, m_s} n_{\vec{k}, m_s} = \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} \sum_{m_s = \pm 1/2}. \quad (256)$$

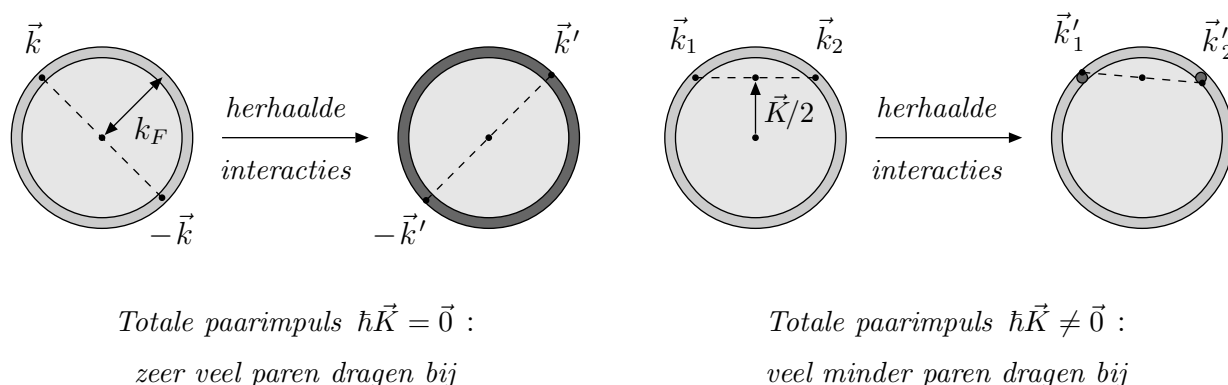
In opgave 9 van het werkcollege is aangetoond hoe de aanwezigheid van deze Fermi-zee van bezette toestanden aanleiding geeft tot de zogenaamde Cooper-instabiliteit. Dit houdt in dat twee elektronen die zich boven een Fermi-zee van bezette toestanden bevinden een “gebonden” paar met eindige bindingsenergie kunnen vormen als hun onderlinge interactie maar attractief is. In tegenstelling tot een 1-deeltjes gebonden toestand in een potentiaalput treedt dit veeldeeltjesbindingseffect op ongeacht de sterkte van de interactie en is het niet met een storingsreeks te beschrijven. Dit soort paarvorming gaat vervolgens door totdat het toevoegen van nog een paar niet meer leidt tot een lagere totale energie.

Vraag: *Welke attractieve elektronparen spelen een rol bij lage-temperatuur supergeleiders?*

- Ten eerste kunnen geen roostertrillingen met willekeurig hoge frequentie worden geëxciteerd. De maximale fononenergie wordt aangegeven met $\hbar \omega_D$ (zie de colleges Statistische Mechanica en Inleiding Vaste-stoffysica), waarbij ω_D de zogenaamde Debye-frequentie van het rooster is. Dit heeft tot gevolg dat effectief alleen elektronen met energie in de smalle energieband $[E_F - \hbar \omega_D, E_F + \hbar \omega_D]$ door middel van de interactie met het rooster aan elkaar gekoppeld kunnen worden. Het gaat hierbij slechts om een kleine relatieve fractie van $\mathcal{O}(10^{-4})$ van alle elektronen, hetgeen in absolute zin toch een gigantisch aantal van $\mathcal{O}(10^{19})$ elektronen representeert. De bijbehorende localisatie in de impulsruimte verklaart ook waarom de Cooper-paren een relatief grote ruimtelijke uitgebreidheid hebben, zodat het beter is te spreken van een “gecorrleerd paar” dan van een “gebonden toestand”.
- Op grond van behoud van netto roosterimpuls zal bij de interactie tussen het elektronpaar en het rooster de totale impuls van het elektronpaar behouden blijven. Zoals

uit het onderstaande plaatje is af te lezen, neemt het aantal geschikte paren drastisch af als de totale impuls van het elektronpaar in absolute waarde toeneemt. Het aantal Cooper-paren dat bijdraagt tot de attractieve interactie-energie is verreweg het grootst als de elektronen tegengestelde impuls hebben.

- In de lage-temperatuur supergeleiders bevinden de twee gepaarde elektronen zich verder in een ruimtelijk symmetrische spin-singlet toestand, zodat ze een tegengestelde spincomponent langs de kwantisatie-as hebben.



2.8.2 Het energiegat en superfluiditeit

De voorgaande observaties met betrekking tot de Cooper-paren brengt ons tot de volgende effectieve veeldeeltjes Hamilton-operator (de zogenaamde “pairing Hamiltonian”) voor de beschrijving van lage-temperatuur supergeleiders:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} (\hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} + \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}) + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}'\uparrow}. \quad (257)$$

Hier is $V_{\vec{k}\vec{k}'} = \langle \vec{k}\uparrow, -\vec{k}\downarrow | \hat{V}_{\text{paar}} | \vec{k}'\uparrow, -\vec{k}'\downarrow \rangle = V_{\vec{k}'\vec{k}}^*$ het matrixelement van de paarinteractie in de impulsrepresentatie. Met de pijltjes \uparrow en \downarrow wordt aangegeven dat $m_s = +\frac{1}{2}$ dan wel $-\frac{1}{2}$. In elke interactieterm wordt eerst één paar deeltjes in de 1-deeltjes toestanden $|\vec{k}'\uparrow\rangle$ en $|\vec{k}'\downarrow\rangle$ geannihileerd en daarna wordt er één paar deeltjes in de 1-deeltjes toestanden $|\vec{k}\uparrow\rangle$ en $|\vec{k}\downarrow\rangle$ gecreëerd. Voor een maximale paarinteractie komen derhalve alleen veeldeeltjestoestanden in aanmerking die een superpositie zijn van volledig bezette en volledig lege paren. Gebroken paren, bestaande uit precies één van beide deeltjes uit een paar, dragen namelijk niet bij tot de totale interactie-energie.

Ansatz voor de grondtoestandsfunctie: binnen de BCS theorie werd op basis hiervan geponeerd dat de grondtoestand van het systeem van de vorm

$$|\Psi_{BCS}\rangle \equiv \prod_{\vec{k}} (\cos \theta_{\vec{k}} - e^{2i\phi} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \sin \theta_{\vec{k}}) |\Psi^{(0)}\rangle \quad (258)$$

is, met $|\Psi^{(0)}\rangle$ het elektronvacuüm. De afzonderlijke factoren $\cos\theta_{\vec{k}} - e^{2i\phi}\hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger\hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \sin\theta_{\vec{k}}$ zijn hier vrijelijk met elkaar te verwisselen aangezien alle creatie-operatoren onderling anticommuteren.

- Deze zogenaamde BCS grondtoestandsfunctie herkennen we als een quasi-deeltjes vacuümtoestand van het type (125) met $u_1 = \cos\theta_{\vec{k}}$, $v_1 = \sin\theta_{\vec{k}}$, $\hat{a}_1 = e^{-i\phi}\hat{a}_{\vec{k}\uparrow}$ en $\hat{a}_2 = e^{-i\phi}\hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}$. Deze toestand beschrijft geen systeem met een vast aantal deeltjes, maar de relatieve statistische spreiding rond de verwachtingswaarde \bar{N} van \hat{N} is extreem klein in verband met de grootte van \bar{N} (zie opgave 20 van het werkcollege). Als zodanig is $|\Psi_{BCS}\rangle$ toch een uitstekende benadering voor de echte grondtoestand, mits de energieverwachtingswaarde wordt geminimaliseerd bij gelijkblijvend gemiddeld aantal deeltjes. Voor zo'n grootkanonieke aanpak kan wederom de Lagrange-multiplier methode worden gebruikt. Dit komt neer op het zoeken naar het spectrum van de operator $\hat{H}_{BCS} - \mu(\hat{N} - \bar{N})$, waarbij de Lagrange-multiplier μ de randvoorwaarde van een vast gemiddeld aantal deeltjes \bar{N} implementeert.
- Wat ook opvalt aan de BCS grondtoestandsfunctie is dat elk gecreëerd Cooper-paar overeenkomt met een vaste fasefactor $e^{2i\phi}$. Dit geeft aanleiding tot veeldeeltjestoestanden met gerelateerde fasen, hetgeen sprekend lijkt op de bosonische coherente toestanden die in § 1.6.2 zijn beschreven. Inderdaad zijn de Cooper-paren bosonisch, maar de bouwstenen zijn fermionisch en zitten zodanig ver uit elkaar dat een Cooper-paar niet echt als een composiet deeltje kan worden beschouwd. Elke paartoestand kan feitelijk maar één keer worden gecreëerd, in tegenstelling tot de bosonen in § 1.6.2, en de BCS grondtoestandsfunctie is dan ook geen eigentoestand van de Cooper-paar annihilatie-operator.

Het laag-energetische excitatiespectrum: de historische aanpak om de laagst-energetische energieniveaus van dit systeem af te schatten bestond uit het toepassen van de variatiemethode, waarbij de BCS grondtoestandsfunctie (258) en hieruit afgeleide aangeslagen toestanden als variationele testfuncties werden ingezet. Zoals de vorm van de BCS grondtoestandsfunctie (258) al doet vermoeden is er ook een quasi-deeltjes formulering voor de laagst-energetische veeldeeltjestoestanden mogelijk. Voor de geïnteresseerde lezer zijn details van deze methode in § 2.8.3 te vinden. Er wordt dan het volgende gevonden voor het laag-energetische excitatiespectrum:

$$\epsilon_{\vec{k}\uparrow} = \epsilon_{-\vec{k}\downarrow} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} - \mu\right)^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} \equiv \epsilon_{\vec{k}}, \quad \text{met} \quad \Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2\epsilon_{\vec{k}'}}. \quad (259)$$

- We zien dat het excitatiespectrum een energiegat (“energy gap”) $|\Delta_{\vec{k}}|$ heeft ten opzichte van de grondtoestandsenergie. Verder blijkt het creëren van een excitatie

(quasi-deeltje) equivalent te zijn met het breken van een Cooper-paar, hetgeen gepaard gaat met een eindige hoeveelheid energie omdat bij het breken van één van de Cooper-paren de interacties met de andere paartoestanden wegvallen.

- Zoals in § 1.6.3 is aangetoond hebben we hier te maken met één van de situaties waarbij er superfluïde stroming kan optreden. De aanwezigheid van het energiegat geeft aanleiding tot een superfluïde collectief van Cooper-paren en staat daarmee aan de basis van het fenomeen van lage-temperatuur supergeleiding. Dit collectief is alleen te exciteren door Cooper-paren te breken, hetgeen dus een eindige hoeveelheid energie vereist.
- Zoals verder uit vergelijking (259) is af te lezen moet het energiegat aan een bepaalde vergelijking voldoen die bekend staat onder de naam “BCS gap equation”. Wil er een energiegat zijn, dan is de aanwezigheid van paren met attractieve interacties (d.w.z. $V_{\vec{k}\vec{k}'} < 0$) een vereiste. Een gas bestaande uit zwak-repulsieve fermionen geeft dan ook geen aanleiding tot een energiegat, een BCS-achtige grondtoestand of lage-temperatuur supergeleiding.

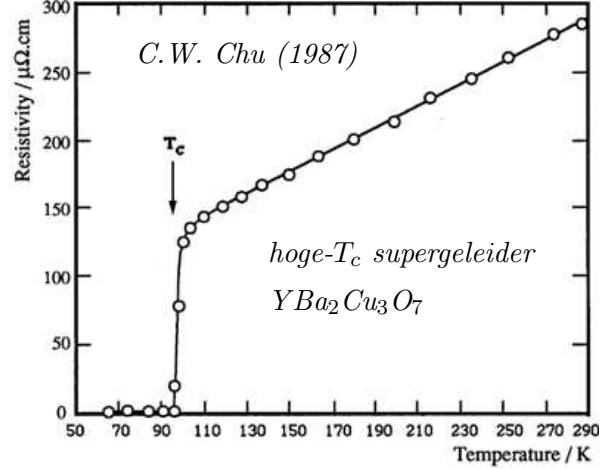
Zwakke-koppelinglimiet: in de BCS theorie wordt aangenomen dat de attractieve paar-interactie uitsluitend effectief is binnen de Cooper-paar band $[E_F - \hbar\omega_D, E_F + \hbar\omega_D]$, met $\hbar\omega_D \ll E_F \approx \mu$, en dat binnen het relevante bereik de paarinteractie $V_{\vec{k}\vec{k}'}$ in feite benaderd mag worden door de constante waarde $-\lambda < 0$. Hierdoor wordt het energiegat onafhankelijk van \vec{k} . Zoals in het werkcollege zal worden afgeleid volgt dan uit de “BCS gap equation” in de continuümlimiet dat

$$\boxed{|\Delta| \approx \frac{\hbar\omega_D}{\sinh(2/\lambda D(E_F))}}. \quad (260)$$

- We zien nu expliciet dat het energiegat niet analytisch is voor $\lambda = 0$. Vandaar ook de aanduiding Cooper-instabiliteit voor het paarvormingsfenomeen.
- Verder geldt dat de meeste lage-temperatuur supergeleiders een zodanig zwakke interactie hebben dat $\lambda D(E_F)/2 < 0.3$, zodat $|\Delta| \ll \hbar\omega_D$. Uit de berekening in § 2.8.3 volgt verder dat de paarvorming voornamelijk optreedt in een energie-interval met breedte $\mathcal{O}(|\Delta|)$, hetgeen dus veel kleiner is dan de breedte $\hbar\omega_D$ van de Cooper-paar band, zodat details met betrekking tot ω_D niet belangrijk zijn en het inderdaad redelijk is om $V_{\vec{k}\vec{k}'}$ constant te nemen! Dit wordt de zwakke-koppelinglimiet genoemd.
- De complexe grootte $\Delta \equiv |\Delta| e^{2i\phi}$ beschrijft feitelijk het condensaat en wordt ook wel de ordeparameter voor supergeleiding genoemd. De sterkte van het Cooper-paar condensaat wordt daarbij bepaald door $|\Delta|$ en de fasecorrelatie door $e^{2i\phi}$.

- Tevens zal er een verband blijken te bestaan tussen de kritische temperatuur waarvoor lage-temperatuur supergeleiding verdwijnt en het energiegat bij $T = 0$, namelijk $k_B T_c \approx |\Delta(T=0)|/1.764$ (zie werkcollege).

Hoge-temperatuur supergeleiders: in 1986 werd er een nieuwe klasse van supergeleiders gevonden door Georg Bednorz en Alex Müller, de zogenaamde hoge-temperatuur supergeleiders. Dit zijn keramische materialen (metaaloxiden) met kritische temperaturen in het bereik 30–140 K, zodat een supergeleider bij kamertemperatuur langzaam in zicht komt. De theorie achter deze nieuwe klasse van supergeleiders is echter nog niet bekend. Uit



experimentele waarnemingen blijkt namelijk dat we op zoek moeten gaan naar fundamenteel andere mechanismen die aanleiding kunnen geven tot sterkere interacties.

2.8.3 Excitatie spectrum en quasi-deeltjes

Zoals vergelijking (258) al deed vermoeden is er een quasi-deeltjes formulering voor de laagst-energetische veeldeeltjestoestanden van de “pairing Hamiltonian” (257) mogelijk. Op grond van de redenering op pagina 106 weten we dat de echte grondtoestand $|\Psi_G\rangle$ van het systeem in goede benadering bestaat uit een superpositie van volledig bezette en volledig lege paren. Deze grondtoestand ontstaat door de energie te minimaliseren in aanwezigheid van een collectief van $\mathcal{O}(10^{19})$ onderling interagerende Cooper-paren die totale impuls $\vec{0}$ hebben. Net als bij het superfluiditeitsvoorbeeld zal het toevoegen dan wel verwijderen van één zo’n Cooper-paar een verwaarloosbare invloed hebben op de geoptimaliseerde bezettingscoëfficiënten van de andere paren, zoals de coëfficiënten $\cos \theta_{\vec{k}}$ en $\sin \theta_{\vec{k}}$ in vergelijking (258). Derhalve kunnen voor de laagst-energetische veeldeeltjestoestanden de paarcreatie/annihilatie-operatoren $\hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger$ en $\hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}$ worden ontwikkeld rond de grondtoestandsverwachtingswaarden

$$\langle \Psi_G | \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} | \Psi_G \rangle = \langle \Psi_G | \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger | \Psi_G \rangle^* \equiv b_{\vec{k}}, \quad (261)$$

zodat

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}'\uparrow} &= ([\hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - b_{\vec{k}}^*] + b_{\vec{k}}^*) ([\hat{a}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}'\uparrow} - b_{\vec{k}'}] + b_{\vec{k}'}) \\ &\approx -b_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}'} + b_{\vec{k}'} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + b_{\vec{k}}^* \hat{a}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}'\uparrow}. \end{aligned} \quad (262)$$

Dit wordt de “mean field approximation” genoemd. Zo’n benadering behoudt het totale aantal deeltjes niet, in overeenstemming met de ansatz (258) voor de grondtoestand. Dit

betekent dat het volstaat om op zoek te gaan naar de laagst-energetische eigentoestanden van de operator

$$\hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} \approx \sum_{\vec{k}} \left[\xi_{\vec{k}} (\hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} + \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}) + \Delta_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\vec{k}}^* \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} - \Delta_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^* \right], \quad (263)$$

met

$$\xi_{\vec{k}} \equiv \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \mu \quad \text{en} \quad \Delta_{\vec{k}} \equiv e^{2i\phi_{\vec{k}}} |\Delta_{\vec{k}}| \equiv \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'}. \quad (264)$$

Met behulp van een geschikte set Bogolyubov-transformaties is dit om te schrijven tot

$$\hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} \approx \sum_{\vec{k}} \left[\xi_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}} - \Delta_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^* + \epsilon_{\vec{k}} (\hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} + \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}) \right], \quad (265)$$

met bijbehorend quasi-deeltjes excitatiespectrum

$$\boxed{\epsilon_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \mu\right)^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2}}. \quad (266)$$

Voor elk paar impulsen \vec{k} en $-\vec{k}$ dient daartoe een fermionische Bogolyubov-transformatie te worden gebruikt van het type

$$\hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \equiv e^{-i\phi_{\vec{k}}} \cos(\theta_{\vec{k}}) \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} + e^{i\phi_{\vec{k}}} \sin(\theta_{\vec{k}}) \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger, \quad \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \equiv e^{-i\phi_{\vec{k}}} \cos(\theta_{\vec{k}}) \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} - e^{i\phi_{\vec{k}}} \sin(\theta_{\vec{k}}) \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger$$

gebaseerd op de volgende operatoren en energieparameters in vergelijkingen (102) en (128):

$$\hat{a}_1 \rightarrow e^{-i\phi_{\vec{k}}} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}, \quad \hat{a}_2 \rightarrow e^{-i\phi_{\vec{k}}} \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}, \quad E \rightarrow \xi_{\vec{k}} \quad \text{en} \quad \Delta \rightarrow |\Delta_{\vec{k}}|.$$

We zien dat het quasi-deeltjes excitatiespectrum een energiegat (“energy gap”) $|\Delta_{\vec{k}}|$ heeft ten opzichte van het quasi-deeltjesvacuüm, waarbij het creëren van een quasi-deeltje equivalent is met het breken van het bijbehorende Cooper-paar. Immers, in geval van een bezet paar wordt bij het creëren van een bijbehorend quasi-deeltje één van de twee deeltjes verwijderd en in geval van een leeg paar wordt één van de deeltjes uit het paar toegevoegd. Het energiegat moet wel nog aan een voorwaarde voldoen. De geschikte Bogolyubov-transformatie moet namelijk volgens de afleiding onder vergelijking (128) voldoen aan

$$-2e^{-2i\phi_{\vec{k}}} b_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} = \sin(2\theta_{\vec{k}}) \epsilon_{\vec{k}} = |\Delta_{\vec{k}}| \quad \text{en} \quad \cos(2\theta_{\vec{k}}) \epsilon_{\vec{k}} = \xi_{\vec{k}}, \quad (267)$$

waarbij is gebruikt dat voor de grondtoestand (d.w.z. het quasi-deeltjesvacuüm) geldt dat

$$\begin{aligned} \langle \Psi_G | \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow} | \Psi_G \rangle &= e^{2i\phi_{\vec{k}}} \langle \Psi_G | (\cos(\theta_{\vec{k}}) \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} + \sin(\theta_{\vec{k}}) \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger) (\cos(\theta_{\vec{k}}) \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} - \sin(\theta_{\vec{k}}) \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) | \Psi_G \rangle \\ &= -\sin(\theta_{\vec{k}}) \cos(\theta_{\vec{k}}) e^{2i\phi_{\vec{k}}} \langle \Psi_G | \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger | \Psi_G \rangle = -\frac{1}{2} e^{2i\phi_{\vec{k}}} \sin(2\theta_{\vec{k}}) \stackrel{(261)}{=} b_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (268)$$

Gecombineerd met de definitie (264) voor het energiegat leidt dit tot de zogenaamde “BCS gap equation”

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2\epsilon_{\vec{k}'}} . \quad (269)$$

Wil er een energiegat zijn, dan is de aanwezigheid van paren met attractieve interacties (d.w.z. $V_{\vec{k}\vec{k}'} < 0$) een vereiste. Een gas bestaande uit zwak-repulsieve fermionen geeft dan ook geen aanleiding tot een energiegat of een BCS-achtige grondtoestand.

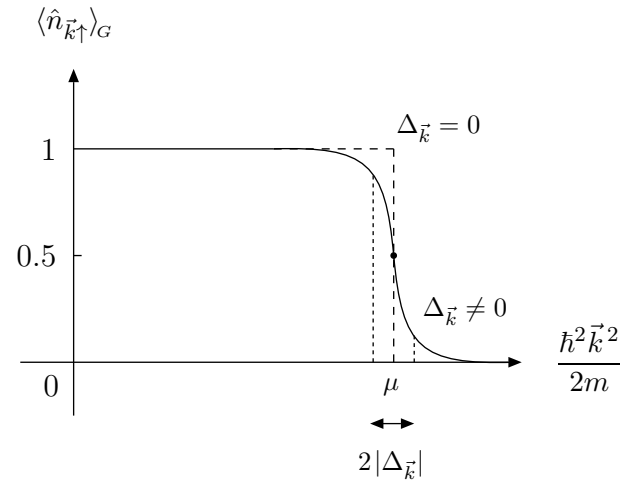
In termen van de oorspronkelijke elektronen is de samenstelling van de grondtoestand te specificeren aan de hand van de gemiddelde bezettingsgetallen

$$\langle \Psi_G | \hat{n}_{\vec{k}\uparrow} | \Psi_G \rangle = \langle \Psi_G | \hat{n}_{-\vec{k}\downarrow} | \Psi_G \rangle \stackrel{\text{opg. 10}}{=} \sin^2 \theta_{\vec{k}} \stackrel{(267)}{=} \frac{1}{2} (1 - \xi_{\vec{k}} / \epsilon_{\vec{k}}) , \quad (270)$$

die voldoen aan de randvoorwaarde

$$\sum_{\vec{k}} \left(\langle \Psi_G | \hat{n}_{\vec{k}\uparrow} | \Psi_G \rangle + \langle \Psi_G | \hat{n}_{-\vec{k}\downarrow} | \Psi_G \rangle \right) = \sum_{\vec{k}} (1 - \xi_{\vec{k}} / \epsilon_{\vec{k}}) = \bar{N} . \quad (271)$$

De Fermi-zee voor niet-interagerende geleidingselektronen wordt uitgesmeerd ten gevolge van de Cooper-paar interacties. Toestanden met $\xi_{\vec{k}} = \mathcal{O}(|\Delta_{\vec{k}}|)$, vlakbij de rand van de Fermi-zee, reorganiseren zichzelf in een collectief van gepaarde toestanden. Grotere waarden voor de 1-deeltjes kinetische energie worden daarbij gecompenseerd door de extra Cooper-paar bindingsenergie.



In de BCS theorie wordt aangenomen dat de attractieve paarinteractie uitsluitend effectief is binnen de Cooper-paar band $[E_F - \hbar\omega_D, E_F + \hbar\omega_D]$, met $\hbar\omega_D \ll E_F \approx \mu$, en dat binnen het relevante bereik de paarinteractie $V_{\vec{k}\vec{k}'}$ in feite benaderd mag worden door de constante waarde $-\lambda < 0$. Hierdoor wordt het energiegat onafhankelijk van \vec{k} . Als het constante energiegat nu wordt geschreven als $\Delta \equiv |\Delta| e^{2i\phi}$, dan is de quasi-deeltjes vacuümtoestand identiek aan de BCS grondtoestandsfunctie:

$$|\Psi_G\rangle \stackrel{(125)}{=} \prod_{\vec{k}} (\cos \theta_{\vec{k}} - e^{2i\phi} \hat{a}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \sin \theta_{\vec{k}}) |\Psi^{(0)}\rangle \stackrel{(258)}{=} |\Psi_{BCS}\rangle . \quad (272)$$

3 Relativistische 1-deeltjes kwantummechanica

In dit hoofdstuk gaan we proberen of de niet-relativistische kwantummechanica in een relativistische vorm te gieten is. Dit wil zeggen dat we op zoek zullen gaan naar het relativistische analogon van de Schrödinger-vergelijking.

Overeenkomstig materiaal is te vinden in Schwabl (Hst. 5–7 en Hst. 10, 11), Merzbacher (Hst. 24) en Bransden & Joachain (Hst. 15).

De gezochte vergelijking moet precies dezelfde vorm hebben in alle inertiaalsystemen (relativiteitsprincipe) en moet oplossingen hebben die voldoen aan de kwantummechanische postulaten. Als startpunt voor de constructie van de relativistische golfvergelijking gebruiken we weer het verband tussen vlakke golven van het type $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t)$ en deeltjes met energie $E = \hbar\omega$ en impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (de Broglie hypothese). De niet-relativistische QM volgde uit een verfijning van de Hamilton–Jacobi vergelijking, waarbij deeltjes–golf dualiteit modelmatig werd weergegeven door de deeltjes te beschrijven aan de hand van superposities van vlakke golven. De correcte energie en impuls van de deeltjes zijn dan uit de vlakke golven te distilleren met behulp van de plaatsrepresentatie-operatoren

$$E = \hbar\omega \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad , \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad , \quad \vec{r} \rightarrow \hat{\vec{r}} = \vec{r} \quad .$$

Toegepast op de klassieke uitdrukking $E = \mathcal{H}_{\text{cl}}(\vec{r}, \vec{p}) = \vec{p}^2/(2m) + V(\vec{r})$ voor de energie van een deeltje met massa m in een potentiaalveld wordt zo de Schrödinger-vergelijking

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \mathcal{H}_{\text{cl}}(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

gevonden. In deze vergelijking worden \vec{r} en t echter niet op gelijke voet behandeld, zodat niet aan het relativiteitsprincipe is voldaan. We gaan nu proberen bovenstaand idee in een relativistisch jasje te steken voor een tijd–ruimte met vlakke metriek. Daarbij hanteren we het volgende strijdplan om een relativistische QM voor vrije deeltjes te construeren.

- (1) Deeltjes–golf dualiteit: construeer een golfvergelijking die de juiste relativistische relatie tussen energie en impuls bevat in operatorvorm. Dit betekent dat een oplossing van de golfvergelijking automatisch ook aan de Klein–Gordon vergelijking zal moeten voldoen, waardoor het te ontbinden is in vlakke golven (zie § 3.1)!
- (2) Relativiteitsprincipe en spin: zorg dat de golfvergelijking voldoet aan het relativiteitsprincipe. Door vervolgens specifiek naar ruimtelijke rotaties te kijken kan de spin worden bepaald van het type deeltje dat hoort bij de golfvergelijking!
- (3) QM: leid uit de golfvergelijking een continuïteitsvergelijking af en verifieer of dit een waarschijnlijkheidsinterpretatie toelaat die voldoet aan het superpositieprincipe.
- (4) Bekijk de niet-relativistische limiet en vergelijk met experimentele waarnemingen.

3.1 Eerste poging: de Klein–Gordon vergelijking (1926)

Werk eerst appendix D door, waar de conventies en definities met betrekking tot de speciale relativiteit op een rijtje zijn gezet. De klassieke energie van een vrij relativistisch deeltje met rustmassa m wordt gegeven door

$$\boxed{E = \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2}}. \quad (273)$$

Als eerste Ansatz voor een relativistische golfvergelijking in de plaatsrepresentatie zouden we uitgaande van deze klassieke uitdrukking simpelweg de substituties $E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ en $\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$ kunnen uitvoeren in analogie met de niet-relativistische QM:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \sqrt{m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2} \psi(x) \quad (x = \text{plaats 4-vector}). \quad (274)$$

De wortel-operator moet dan gedefinieerd worden door middel van een machtreeks (zie het college Kwantummechanica 2), hetgeen aanleiding geeft tot een differentiaaloperator van oneindige orde. Dit maakt het zeer moeilijk om iets zinnigs met deze kwantummechanische golfvergelijking te doen. Verder worden \vec{r} en t asymmetrisch behandeld, zodat het onduidelijk is hoe hieruit een inertiaalsysteem-invariante uitdrukking zou moeten volgen.

De golfvergelijking: als eerste serieuze poging is het derhalve verstandig om de gekwadeerde uitdrukking $E^2 = m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2$ als startpunt te gebruiken. Dit geeft na substitutie wel aanleiding tot een golfvergelijking waarin \vec{r} en t op gelijke voet worden behandeld: de zogenaamde Klein–Gordon vergelijking

$$\boxed{-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x) = (m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2) \psi(x)}, \quad (275)$$

hetgeen een tweede-orde differentiaalvergelijking in de tijd is. Dit houdt in dat, in tegenstelling tot het niet-relativistische geval, twee randvoorwaarden nodig zijn om de tijdsevolutie van de golffunctie vast te leggen. Let wel: door de energie–impuls relatie te kwadrateren hebben we hier een tekenambigüiteit voor de energie geïntroduceerd. We zullen zien dat dit gevolgen zal hebben voor de interpretatie van de golffunctie.

Implementatie van het relativiteitsprincipe: om de vorm van de Klein–Gordon vergelijking onafhankelijk van het inertiaalsysteem te krijgen, introduceren we eerst een manifest covariante schrijfwijze in termen van co- en contravariante vectoren:

$$\left(\hbar^2 c^2 \partial_\mu \partial^\mu + m^2 c^4 \right) \psi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0}, \quad (276)$$

in termen van de d'Alembertiaan

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu \stackrel{(D.11)}{=} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2. \quad (277)$$

1) Algemene aanpak: aangezien we hier vaker gebruik van zullen gaan maken, bekijken we eerst de algemene procedure om het relativiteitsprincipe te implementeren. Hierbij gaan we uit van de mogelijkheid dat de golffunctie $\psi(x)$ uit meerdere componenten (intrinsieke vrijheidsgraden) bestaat:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \vdots \\ \psi_N(x) \end{pmatrix}. \quad (278)$$

De transformatiecarakteristiek van deze golffunctie onder Poincaré-transformaties wordt als volgt gedefinieerd:

$$\boxed{\psi'(x') \equiv M(\Lambda)\psi(x)}, \quad (279)$$

waarbij de matrix $M(\Lambda)$ aangeeft hoe de Poincaré-transformaties werken op de ruimte van intrinsieke vrijheidsgraden. Zoals eerder aangegeven moet deze transformatiecarakteristiek volgen uit de eis van vormbehoud van de golfvergelijking:

als $\mathcal{D}\psi(x) = 0$ voor de lineaire differentiaaloperator \mathcal{D} en golffunctie $\psi(x)$ in inertiaalsysteem S , dan moet daaruit automatisch volgen dat ook $\mathcal{D}'\psi'(x') = 0$ voor de getransformeerde differentiaaloperator \mathcal{D}' en golffunctie $\psi'(x')$ in inertiaalsysteem S' .

De lineaire differentiaaloperator \mathcal{D} is invariant onder constante translaties, aangezien er geldt dat $\partial/\partial x^\mu = \partial/\partial(x^\mu + a^\mu)$ voor een constante 4-vector a^μ . Derhalve is $M(\Lambda)$ onafhankelijk van zowel a als de coördinaten x en x' . Verder is $M(\Lambda)$ een lineaire operator (matrix) in de ruimte van intrinsieke vrijheidsgraden, aangezien het superpositieprincipe moet gelden in zowel S als S' . De matrices $M(\Lambda)$ moeten verder de eigenschappen (groepsstructuur) weerspiegelen van de Lorentz-transformaties:

$$M(\Lambda_1\Lambda_2) = M(\Lambda_1)M(\Lambda_2) \quad \text{en} \quad M(\Lambda_1^{-1}) = M^{-1}(\Lambda_1) \quad (280)$$

voor willekeurige Lorentz-transformaties Λ_1 en Λ_2 . In afwezigheid van een Lorentz-transformatie gebeurt er dan netjes niets in de ruimte van intrinsieke vrijheidsgraden. Dit legt de normering van de matrices $M(\Lambda)$ zodanig vast dat ze een (projectieve) matrixrepresentatie van de Lorentz-groep vormen.

2) Relativiteitsprincipe en spin voor de Klein–Gordon vergelijking: vervolgens kijken we specifiek naar de Klein–Gordon vergelijking. We weten dat de d'Alembertiaan en lichtsnelheid scalaire grootheden zijn die niet veranderen bij een overgang van inertiaalsysteem. Derhalve verandert ook de Klein–Gordon operator niet bij overgang van inertiaalsysteem:

$$\mathcal{D}'_{\text{KG}} = \left(\square' + \frac{m^2 c'^2}{\hbar^2} \right) = \left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) = \mathcal{D}_{\text{KG}}.$$

Tevens werkt deze differentiaaloperator op elke component van $\psi(x)$ afzonderlijk zonder daarbij de componenten te mengen, hetgeen inhoudt dat elke component afzonderlijk aan de Klein–Gordon vergelijking moet voldoen. De transformatiematrix $M(\Lambda)$ is in de Klein–Gordon theorie dus proportioneel met de eenheidsmatrix en om aan het relativiteitsprincipe te voldoen volstaat het verder te eisen dat $\psi(x)$ een scalair veld is¹¹, d.w.z. $\psi'(x') = \psi(x) = \psi(\Lambda^{-1}[x' - a])$. De Poincaré-transformaties hebben derhalve alleen werking op de x -ruimte en laten de ruimte van intrinsieke vrijheidsgraden van $\psi(x)$ ongemoeid. De deeltjes die door $\psi(x)$ worden beschreven moeten dan spin-0 deeltjes zijn, omdat een rotatie in de plaatsruimte alleen effect heeft op het argument van de golf functie en niet op intrinsieke vrijheidsgraden. De generator van infinitesimale rotaties is hier dan ook uitsluitend de baanimpulsmomentoperator (zie het college Kwantummechanica 2).

De niet-relativistische limiet: alvorens de waarschijnlijkheidsinterpretatie van de golf functie onder de loep te nemen bekijken we eerst even of deze relativistische theorie overgaat in de niet-relativistische QM bij lage snelheden. Bij lage snelheden is de niet-relativistische kinetische energie van het deeltje veel kleiner dan de energie ten gevolge van de rustmassa van het deeltje: $E = E_{\text{NR}} + mc^2 \approx mc^2$. Om uit de oplossing $\psi(x)$ van de Klein–Gordon vergelijking een niet-relativistische golf functie te extraheren moet derhalve eerst de rustmassaterm uit de tijdsevolutie worden verwijderd:

$$\psi(x) \equiv \psi_{\text{NR}}(x) \exp(-imc^2t/\hbar).$$

Na vermenigvuldiging met $\exp(imc^2t/\hbar)$ leidt de Klein–Gordon vergelijking (275) dan tot

$$\begin{aligned} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\hbar mc^2 \frac{\partial}{\partial t} + m^2 c^4\right) \psi_{\text{NR}}(x) &= \left(m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2\right) \psi_{\text{NR}}(x) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{NR}}(x) - \frac{\hbar^2}{2mc^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi_{\text{NR}}(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi_{\text{NR}}(x). \end{aligned}$$

De golf functie $\psi_{\text{NR}}(x)$ oscilleert (in de tijd) ten gevolge van de niet-relativistische kinetische energie $E_{\text{NR}} = E - mc^2 \ll mc^2$, zodat

$$\left| \frac{\hbar^2}{2mc^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi_{\text{NR}}(x) \right| \ll \left| \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{NR}}(x) \right|.$$

De Klein–Gordon vergelijking voor $\psi(x)$ neemt dus in de niet-relativistische limiet de vorm aan van een Schrödinger-vergelijking voor $\psi_{\text{NR}}(x)$.

Problemen met de Klein–Gordon vergelijking: tenslotte bekijken we de fysische interpretatie van de oplossingen van de Klein–Gordon vergelijking. Voor de oplossingen van de Klein–Gordon vergelijking gaan we proberen in analogie met het niet-relativistische geval een continuïteitsvergelijking van de vorm $\partial\rho/\partial t + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ af te leiden. Deze continuïteitsvergelijking willen we gaan interpreteren als een manifestatie van behoud van

¹¹Een tweede mogelijke oplossing is dat $\psi(x)$ een pseudoscalair veld is, d.w.z. $\psi'(x') = \det(\Lambda)\psi(x)$.

waarschijnlijkheid, waarbij ρ de rol van kwantummechanische waarschijnlijkheidsdichtheid zou moeten gaan spelen en \vec{j} de rol van kwantumflux. Voor de oplossingen van de Klein–Gordon vergelijking geldt op triviale wijze dat

$$0 \stackrel{(276)}{=} \psi^*(x) \square \psi(x) - \psi(x) \square \psi^*(x) \stackrel{(277)}{=} \partial_\mu [\psi^*(x) \partial^\mu \psi(x) - \psi(x) \partial^\mu \psi^*(x)]$$

$$\stackrel{(D.11)}{\implies} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(x) = 0, \quad (281)$$

met

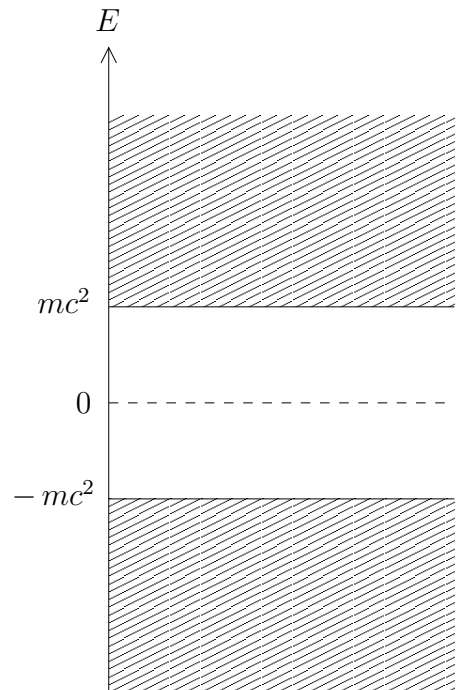
$$\rho(x) \equiv \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^*(x) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) - \psi(x) \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x) \right],$$

$$\vec{j}(x) \equiv \frac{-i\hbar}{2m} \left[\psi^*(x) \vec{\nabla} \psi(x) - \psi(x) \vec{\nabla} \psi^*(x) \right]. \quad (282)$$

Hierbij is de voorfactor van $\rho(x)$ zodanig gekozen dat in de niet-relativistische limiet geldt $\rho(x) \approx |\psi_{\text{NR}}(x)|^2$. We zouden nu $\rho(x)$ als relativistische waarschijnlijkheidsdichtheid willen interpreteren. Hiertoe bekijken we de vlakke-golf oplossingen van de Klein–Gordon vergelijking (276):

$$\psi_p(x) = \exp(-ip \cdot x / \hbar), \quad \text{met} \quad p \cdot p = p^2 = m^2 c^2 \quad \Rightarrow \quad p^0 = \frac{E}{c} = \pm \sqrt{m^2 c^2 + \vec{p}^2}. \quad (283)$$

Aan de hand van deze vlakke-golf oplossingen zien we dat $\rho(x)$ niet positief definit is als $p^0 < 0$ (zie werkcollege). Derhalve is $\rho(x)$ ongeschikt als waarschijnlijkheidsdichtheid. Het ligt dan voor de hand om simpelweg alle negatieve-energie oplossingen als niet fysisch uit de theorie te verwijderen. Deze vlieger gaat echter niet op aangezien op die manier ook het superpositieprincipe overboord gaat (zie werkcollege). De negatieve-energie oplossingen geven, naast het probleem met de waarschijnlijkheidsinterpretatie van de golf functie, ook aanleiding tot een vrije-deeltjes energiespectrum dat van onderen onbegrensd is (zie plaatje). Dit zou inhouden dat er een oneindige energie aan het systeem zou kunnen worden onttrokken als een externe storing een transitie tussen positieve-energietoestanden en negatieve-energietoestanden mogelijk zou maken.



Nu zijn er twee strategieën. Enerzijds zouden we kunnen proberen de toestanden met negatieve energie op een andere manier te interpreteren. Hierop komen we in hoofdstuk 5 terug, wanneer we een verband leggen met de kwantumtheorie voor het elektromagnetisch veld die in hoofdstuk 4 zal worden behandeld. Anderzijds is er de, op het oog, logische strategie om een andere relativistische golfvergelijking te construeren zonder daarbij uit te gaan van het kwadraat van de energie–impuls relatie. Immers, de tekenambigüiteit voor de energie was nou juist het gevolg van het kwadrateren. Deze laatste (historische) aanpak gaan we in § 3.2 uitwerken. In dat geval zal een relativistische golfvergelijking van een volstrekt ander type worden gevonden, die wel een levensvatbare waarschijnlijkheidsinterpretatie toelaat.

Statische, radieel symmetrische oplossingen van de Klein–Gordon vergelijking: ter afsluiting kijken we kort naar de mogelijke fysische inzetbaarheid van de Klein–Gordon vergelijking. Hiertoe beschouwen we tijdsonafhankelijke (statische) oplossingen $\phi(r)$ met radiële symmetrie. In dat geval gaat de Klein–Gordon vergelijking over in

$$\left(\nabla^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right)\phi(r) = \frac{1}{r} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right)(r\phi(r)) = 0.$$

Deze vergelijking heeft exponentiële oplossingen, waarvan de fysisch interessante tak bestaat uit afvallende e-machten van de vorm

$$\phi_{\text{Yu}}(r) = C \frac{\exp(-r/a)}{r}, \quad \text{met} \quad a \equiv \frac{\hbar}{mc} > 0. \quad (284)$$

Zulke oplossingen worden gebruikt bij de beschrijving van interacties die door massieve intermediaire bosonen worden overgedragen, zoals de zwakke wisselwerkingen (overgedragen door W en Z bosonen) en de interacties tussen nucleonen (overgedragen door pionen). In dat geval staat $\phi_{\text{Yu}}(r)$ voor een attractieve interactiepotentiaal van het Yukawa-type, waarbij de constante lengte $a = \hbar/mc$ een maat is voor de effectieve dracht van de potentiaal. Als de massa m afwezig was geweest, dan hadden we te maken gehad met de welbekende Laplace-vergelijking

$$\nabla^2 \phi(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\phi(r)) = 0,$$

met als oplossingen

$$\phi(r) = \frac{A}{r} + B.$$

Voor $B=0$ is zo'n oplossing te gebruiken bij de beschrijving van interacties met oneindige dracht die worden overgedragen door massaloze intermediaire bosonen, zoals de elektromagnetische Coulomb-interacties (overgedragen door fotonen) en de sterke kernkrachten (overgedragen door gluonen).

3.2 Tweede poging: de Dirac-vergelijking (1928)

Op basis van de voorgaande opmerkingen gebruiken we de niet-relativistische uitdrukking

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \hat{H} \psi(x) \quad (285)$$

als startpunt, met \hat{H} onafhankelijk van $\partial/\partial t$. Op die manier is de problematische differentiaaloperator $-\hbar^2 \partial^2/\partial t^2$ afwezig. Het verschil met de niet-relativistische Schrödinger-vergelijking zit hem nu in het feit dat de tijd- en ruimte-coördinaten op dezelfde voet te behandelen zijn, zodat \hat{H} nu lineair zal moeten zijn in $\vec{\nabla}$. Intrinsieke vrijheidsgraden worden vervolgens in rekening gebracht door de golf functie als een kolomvector met N componenten te schrijven:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \vdots \\ \psi_N(x) \end{pmatrix}. \quad (286)$$

Voor een vrij deeltje zal \hat{H} niet afhangen van t en \vec{r} , zodat in dat geval de simpelste vorm voor de Hamilton-operator wordt gegeven door

$$\hat{H} = c \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta mc^2 = c \sum_{j=1}^3 \alpha^j \hat{p}^j + \beta mc^2. \quad (287)$$

De operatoren $\vec{\alpha}$ en β zijn onafhankelijk van t , \vec{r} , \hat{E} , $\hat{\vec{p}}$ en werken als $N \times N$ matrices op de N componenten van $\psi(x)$, aangezien \hat{H} een lineaire operator is om zo het superpositieprincipe te garanderen. Op deze manier wordt de zogenaamde Dirac-vergelijking voor een vrij deeltje met rustmassa m verkregen:

$$\boxed{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - \beta mc^2 \right) \psi(x) = 0}. \quad (288)$$

Verborgen in deze Dirac-vergelijking moet nu de juiste relativistische relatie tussen energie en impuls opgesloten zitten. Met andere woorden, de matrices $\vec{\alpha}$ en β moeten nu zodanig worden gekozen dat elke component van een oplossing van de Dirac-vergelijking automatisch ook een oplossing is van de Klein-Gordon vergelijking.

Dit geeft aanleiding tot de volgende set matrixrelaties:

$$\boxed{\beta^2 = I \quad , \quad \{\alpha^j, \alpha^k\} = 2\delta^{jk} I \quad \text{en} \quad \{\alpha^j, \beta\} = 0 \quad (j, k = 1, 2, 3)}, \quad (289)$$

waarbij uit de anticommutatierelatie $\{\alpha^j, \beta\} = 0$ onmiddellijk volgt dat $\vec{\alpha}$ en β ook daadwerkelijk matrices moeten zijn. Het symbool I wordt gebruikt om een eenheidsmatrix

met een willekeurige rang aan te duiden. Om welke eenheidsmatrix het precies gaat moet dan uit de context worden afgeleid.

$$\begin{aligned} \text{Bewijs: } 0 &\stackrel{(288)}{=} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2 \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - \beta mc^2 \right) \psi(x) \\ &= \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\hbar^2 c^2}{2} \sum_{j,k=1}^3 \{ \alpha^j, \alpha^k \} \nabla^j \nabla^k + i\hbar mc^3 \sum_{j=1}^3 \{ \alpha^j, \beta \} \nabla^j - \beta^2 m^2 c^4 \right) \psi(x). \end{aligned}$$

Dit gaat over in de Klein–Gordon vergelijking (275) als aan bovenstaande matrixrelaties is voldaan. Om behoud van waarschijnlijkheid te garanderen eisen we verder dat $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$, hetgeen zich vertaalt in de eis dat de matrices $\vec{\alpha}$ en β hermitisch moeten zijn:

$$\boxed{\alpha^j = (\alpha^j)^\dagger \quad \text{en} \quad \beta = \beta^\dagger}. \quad (290)$$

Gewapend met deze set condities gaan we vervolgens op zoek naar expliciete oplossingen voor $\vec{\alpha}$ en β met de laagst mogelijke rang N .

1. De matrices $\vec{\alpha}$ en β hebben eigenwaarden ± 1 .

Bewijs: de eigenwaarden van $\vec{\alpha}$ en β zijn reëel omdat het hermitische matrices zijn. Verder geldt op grond van de matrixrelaties (289) dat $\beta^2 = (\alpha^j)^2 = I$, zodat het kwadraat van de eigenwaarden 1 moet zijn.

2. De matrices $\vec{\alpha}$ en β zijn spoorloos.

Bewijs: met behulp van de matrixrelaties in vergelijking (289) geldt bijvoorbeeld dat $\text{Tr}(\alpha^j) = \text{Tr}(\beta^2 \alpha^j) \stackrel{\text{cyclisch}}{=} \text{Tr}(\beta \alpha^j \beta) \stackrel{\{ \alpha^j, \beta \} = 0}{=} -\text{Tr}(\alpha^j \beta^2) = -\text{Tr}(\alpha^j) = 0$.

3. Omdat het spoor gelijk is aan de som van de eigenwaarden, zijn de resultaten van stappen 1 en 2 te combineren in de eis dat de matrices $\vec{\alpha}$ en β evenveel eigenwaarden $+1$ als -1 hebben. De rang N moet dus even zijn.

4. Op grond van stappen 1 t/m 3 is de laagst mogelijke waarde voor de rang gegeven door $N = 2$. In dat geval hebben we te maken met 2×2 matrices, opgespannen door de eenheidsmatrix I en de drie Pauli-spinmatrices $\vec{\sigma}$. We zoeken echter vier verschillende matrices $\vec{\alpha}$ en β die met elkaar anticommuteert. Dit is niet mogelijk voor een representatie van de Dirac-vergelijking met $N = 2$, aangezien de eenheidsmatrix commuteert met alle 2×2 matrices.

De conclusie is dat de representatie van de Dirac-vergelijking met de laagst mogelijke rang wordt gegeven door het geval $N = 4$. De bijbehorende golf functies hebben dan vier intrinsieke vrijheidsgraden en worden Dirac-spinoren genoemd:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \vdots \\ \psi_4(x) \end{pmatrix}. \quad (291)$$

Er bestaan in feite oneindig veel verschillende, fysisch equivalente representaties voor de matrices $\vec{\alpha}$ en β . Matrixrelaties zijn immers invariant onder een willekeurige unitaire transformatie. In het vervolg van dit hoofdstuk wordt er gewerkt met de zogenaamde

$$\boxed{\text{Dirac-representatie : } \beta = \begin{pmatrix} I & \emptyset \\ \emptyset & -I \end{pmatrix}, \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \emptyset & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & \emptyset \end{pmatrix}}, \quad (292)$$

waarbij de 4×4 matrices onderverdeeld zijn in 2×2 subblokken. Deze matrices voldoen inderdaad aan de matrixrelaties (289) en (290). Dit zal in het werkcollege worden bewezen met behulp van de eigenschappen van de Pauli-spinmatrices $\sigma^1 = \sigma_x$, $\sigma^2 = \sigma_y$ en $\sigma^3 = \sigma_z$. In deze notatie gaat de commutatoralgebra voor de Pauli-spinmatrices over in

$$[\sigma^j, \sigma^k] = 2i \sum_{l=1}^3 \epsilon^{jkl} \sigma^l, \quad (293)$$

in termen van de volledig antisymmetrische coëfficiënt

$$\epsilon^{jkl} = \begin{cases} +1 & \text{als } (j, k, l) \text{ een even permutatie van } (1, 2, 3) \text{ is} \\ -1 & \text{als } (j, k, l) \text{ een oneven permutatie van } (1, 2, 3) \text{ is} \\ 0 & \text{anders} \end{cases}. \quad (294)$$

3.2.1 De waarschijnlijkheidsinterpretatie bij de Dirac-vergelijking

Voor de waarschijnlijkheidsinterpretatie van de oplossingen van de Dirac-vergelijking hoeven we niet moeilijk te doen, aangezien deze vergelijking lineair is in zowel de ruimtelijke gradiënt als de afgeleide naar de tijd. Definieer de hermitisch geconjugeerde rijvector

$$\psi^\dagger(x) \equiv (\psi_1^*(x), \dots, \psi_4^*(x)). \quad (295)$$

Dan geldt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\psi^\dagger(x)\psi(x)] &= \psi^\dagger(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} + \frac{\partial \psi^\dagger(x)}{\partial t} \psi(x) \stackrel{(288)}{=} -c \psi^\dagger(x) (\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \frac{imc}{\hbar} \beta) \psi(x) \\ &\quad - c (\vec{\nabla} \psi^\dagger(x)) \cdot \vec{\alpha} \psi(x) + \frac{imc^2}{\hbar} \psi^\dagger(x) \beta \psi(x) \stackrel{(290)}{=} -\vec{\nabla} \cdot [\psi^\dagger(x) c \vec{\alpha} \psi(x)], \end{aligned}$$

waaruit de volgende continuïteitsvergelijking kan worden afgeleid:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(x) = 0, \quad (296)$$

met

$$\rho(x) \equiv \psi^\dagger(x)\psi(x) = \sum_{i=1}^4 |\psi_i(x)|^2 \quad \text{en} \quad \vec{j}(x) \equiv \psi^\dagger(x) c \vec{\alpha} \psi(x). \quad (297)$$

Dit ziet er veelbelovend uit, aangezien $\rho(x)$ positief definit is en dus weldegelijk een interpretatie als waarschijnlijkheidsdichtheid toelaat. De vector \vec{j} gaat dan de rol spelen van kwantumflux, zodat de matrix $c\vec{\alpha}$ te interpreteren is als een soort snelheidsoperator in de Dirac-spinruimte. Voor een levensvatbare waarschijnlijkheidsinterpretatie is het hier dus essentieel dat de matrices $\vec{\alpha}$ en β (en daarmee ook \hat{H}) hermitisch zijn.

3.2.2 Covariante formulering van de Dirac-vergelijking

Er is nog één ingrediënt nodig om de Dirac-vergelijking te kunnen gebruiken als relativistische golfvergelijking. We moeten ervoor zorgen dat $\psi(x)$ zodanig transformeert onder Poincaré-transformaties dat de Dirac-vergelijking dezelfde vorm heeft in alle inertiaalsystemen. In de eerste voorbereidende stap moeten we de Dirac-vergelijking in een vorm gieten die de overgang naar een ander inertiaalsysteem vergemakkelijkt. Hiertoe combineren we de vier matrices $\beta, \vec{\alpha}$ in een soortement 4-vector

$$\gamma^\mu : \quad \gamma^0 \equiv \beta \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} \gamma^1 \\ \gamma^2 \\ \gamma^3 \end{pmatrix} \equiv \vec{\gamma} \equiv \beta \vec{\alpha} \quad (298)$$

$$\Rightarrow \quad \text{Dirac-representatie : } \gamma^0 = \begin{pmatrix} I & \emptyset \\ \emptyset & -I \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} \emptyset & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & \emptyset \end{pmatrix}.$$

Dit zijn de zogenaamde γ -matrices van Dirac. Deze notatie is een beetje misleidend omdat het ten onrechte de indruk wekt dat γ^μ een contravariante vectorgrootheid is. Daarvoor is echter eerst een geschikte contractie in de spinruimte nodig die ook de Dirac-spinoren in de vectorgrootheid betreft. De γ -matrices hebben de volgende eigenschappen die in het werkcollege zullen worden afgeleid:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} I \quad (\text{Clifford-algebra}), \quad (\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 = \begin{cases} \gamma^0 & \text{als } \mu = 0 \\ -\gamma^j & \text{als } \mu = j \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \text{Tr}(\gamma^\mu) = 0, \quad (\gamma^0)^2 = I, \quad (\gamma^j)^2 = -I \quad (j = 1, 2, 3). \quad (299)$$

De Dirac-vergelijking kan nu in de volgende covariante vorm worden omgeschreven:

$$\frac{\beta}{c} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - \beta mc^2 \right) \psi(x) = 0 \xrightarrow{(289), (D.11)} (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi(x) = 0. \quad (300)$$

Uitdrukkingen van het type $\gamma^\mu a_\mu$ worden verder met behulp van de “slash” notatie van Feynman weergegeven als

$$\not{a} \equiv \gamma^\mu a_\mu = \gamma_\mu a^\mu = \gamma^0 a^0 - \vec{\gamma} \cdot \vec{a} \xrightarrow{\text{opg. 24}} \not{a}^2 = a^2 I. \quad (301)$$

De Dirac-vergelijking krijgt in deze notatie de uiteindelijk compacte vorm

$$\boxed{(i\hbar\partial - mc)\psi(x) = 0} . \quad (302)$$

In opgave 24 van het werkcollege zal tenslotte worden aangetoond dat de Klein–Gordon operator $(\square + m^2c^2/\hbar^2)$ eenvoudig uit de Dirac-operator $(i\hbar\partial - mc)$ kan worden afgeleid.

Basis van 4×4 matrices: als laatste voorbereiding voeren we een expliciete basis van 4×4 matrices in:

$$I, \gamma^\mu, \sigma^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu], \gamma^\mu\gamma^5, \gamma^5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3, \quad (303)$$

die in de Dirac-representatie de volgende vorm heeft (voor $j, k = 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned} I &= \begin{pmatrix} I & \emptyset \\ \emptyset & I \end{pmatrix}, \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} I & \emptyset \\ \emptyset & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} \emptyset & \sigma^j \\ -\sigma^j & \emptyset \end{pmatrix}, \\ \sigma^{jk} &= \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}[\sigma^j, \sigma^k] & \emptyset \\ \emptyset & -\frac{i}{2}[\sigma^j, \sigma^k] \end{pmatrix} = \sum_{l=1}^3 \epsilon^{jkl} \begin{pmatrix} \sigma^l & \emptyset \\ \emptyset & \sigma^l \end{pmatrix}, \quad \sigma^{0j} = \begin{pmatrix} \emptyset & i\sigma^j \\ i\sigma^j & \emptyset \end{pmatrix}, \\ \gamma^5 &= \begin{pmatrix} \emptyset & I \\ I & \emptyset \end{pmatrix}, \quad \gamma^0\gamma^5 = \begin{pmatrix} \emptyset & I \\ -I & \emptyset \end{pmatrix}, \quad \gamma^j\gamma^5 = \begin{pmatrix} \sigma^j & \emptyset \\ \emptyset & -\sigma^j \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (304)$$

Dat deze matrices een basis vormen van 4×4 matrices is een triviaal gevolg van het feit dat elk 2×2 subblok als basis de matrices I en $\vec{\sigma}$ heeft. Merk verder op dat de vijf groepen matrices in (303) een opeend aantal γ -matrices bevatten, lopend van nul tot vier.

3.2.3 Dirac-spinoren en Poincaré-transformaties

De transformatiekaracteristiek van de Dirac-spinoren onder Poincaré-transformaties wordt als volgt gedefinieerd [zie vergelijking (279)]:

$$\boxed{\psi'(x') \equiv S(\Lambda)\psi(x)}, \quad (305)$$

waarbij $S(\Lambda)$ aangeeft hoe de Poincaré-transformaties werken op de ruimte van intrinsieke vrijheidsgraden (spinruimte). Zoals eerder aangegeven moet deze transformatiekaracteristiek volgen uit de eis van vormbehoud van de Dirac-vergelijking: als $(i\hbar\partial - mc)\psi(x) = 0$ in inertiaalsysteem S , dan moet daaruit automatisch volgen dat ook $(i\hbar\partial' - mc)\psi'(x') = 0$ in inertiaalsysteem S' . De Dirac-operator $(i\hbar\partial - mc)$ is invariant onder constante translaties, immers $\partial/\partial x^\mu = \partial/\partial(x^\mu + a^\mu)$ voor een constante 4-vector a^μ . Derhalve is $S(\Lambda)$ onafhankelijk van de coördinaten x en x' . Verder is $S(\Lambda)$ een lineaire operator (matrix) in de spinruimte, aangezien het superpositieprincipe moet gelden in zowel S als S' .

Wil uit de Dirac-vergelijking $(i\hbar\partial - mc)\psi(x) = 0$ automatisch volgen dat

$$(i\hbar\partial' - mc)\psi'(x') \stackrel{(305),(D.11)}{=} \left(i\hbar\gamma^\mu\partial_\nu(\Lambda^{-1})^\nu_\mu - mc \right) S(\Lambda)\psi(x)$$

$$\stackrel{\text{Dirac-verg.}}{=} i\hbar\left(\gamma^\mu(\Lambda^{-1})^\nu_\mu S(\Lambda) - S(\Lambda)\gamma^\nu \right) \partial_\nu\psi(x) = 0,$$

dan zal moeten gelden dat $S(\Lambda)$ voldoet aan de vergelijking

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu(\Lambda^{-1})^\nu_\mu S(\Lambda) = \gamma^\nu \stackrel{*\Lambda^\rho_\nu}{\implies} \boxed{S^{-1}(\Lambda)\gamma^\rho S(\Lambda) = \Lambda^\rho_\nu\gamma^\nu}. \quad (306)$$

We gaan nu proberen bij iedere Λ een matrix $S(\Lambda)$ te vinden zodanig dat

$$S(\Lambda_1\Lambda_2) = S(\Lambda_1)S(\Lambda_2) \quad \text{en} \quad S(\Lambda_1^{-1}) = S^{-1}(\Lambda_1) \quad (307)$$

voor willekeurige Lorentz-transformaties Λ_1 en Λ_2 , zodat er in afwezigheid van een Lorentz-transformatie ook niets in de spinorruimte gebeurt. Dit legt de normering van de matrices $S(\Lambda)$ zodanig vast dat ze een projectieve matrixrepresentatie van de Lorentz-groep vormen.

(I) Rotaties en boosts: we beginnen met de eigenlijke orthochrone Lorentz-transformaties. Omdat deze Lorentz-transformaties (en bijbehorende spinortransformaties) continu met de eenheidstransformatie te verbinden zijn, hoeft vergelijking (306) dus slechts te worden opgelost voor infinitesimale Lorentz-transformaties:

$$\Lambda^{\mu\nu} = g^{\mu\nu} + \delta\omega^{\mu\nu}, \quad \delta\omega^{\mu\nu} = -\delta\omega^{\nu\mu} \in \mathbb{R} \text{ infinitesimaal}. \quad (308)$$

Het feit dat de tensor $\delta\omega^{\mu\nu}$ antisymmetrisch is volgt rechtstreeks uit de uitdrukking voor de inverse infinitesimale Lorentz-transformatie

$$(\Lambda^{-1})^{\mu\nu} \stackrel{(308)}{=} g^{\mu\nu} - \delta\omega^{\mu\nu} \stackrel{(D.8)}{=} \Lambda^{\nu\mu} \stackrel{(308)}{=} g^{\mu\nu} + \delta\omega^{\nu\mu}.$$

Schrijf vervolgens ook de bijbehorende transformatiematrix $S(\Lambda)$ in infinitesimale vorm:

$$S(\Lambda) \approx I + s(\delta\omega) \quad \Rightarrow \quad S^{-1}(\Lambda) \approx I - s(\delta\omega) \stackrel{S^{-1}(\Lambda)=S(\Lambda^{-1})}{=} I + s(-\delta\omega). \quad (309)$$

Dan kan onmiddellijk uit vergelijking (306) worden afgeleid dat

$$(I - s(\delta\omega))\gamma^\rho(I + s(\delta\omega)) \approx \gamma^\rho + \delta\omega^\rho_\nu\gamma^\nu \stackrel{\text{eerste orde}}{\implies} \forall_\rho [\gamma^\rho, s(\delta\omega)] = \delta\omega^\rho_\nu\gamma^\nu. \quad (310)$$

De transformatiematrix $S(\Lambda)$ kan nu worden ontbonden ten opzichte van de basis (303) van 4×4 matrices. In opgave 25 van het werkcollege zal worden afgeleid dat aan alle eisen is voldaan als $s(\delta\omega) = -\frac{i}{4}\delta\omega_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}$. Voor een infinitesimale Lorentz-transformatie wordt de bijbehorende spinortransformatie dus gegeven door

$$S(\Lambda) \approx I - \frac{i}{4}\delta\omega_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}, \quad \delta\omega_{\mu\nu} = -\delta\omega_{\nu\mu} \in \mathbb{R} \text{ infinitesimaal} \quad (311)$$

\Rightarrow de matrices $\sigma^{\mu\nu}$ genereren de Lorentz-transformaties in de Dirac-spinorruimte.

Voor een eindige Lorentz-transformatie van dit type geldt dan

$$S(\Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{4} \frac{\omega_{\mu\nu}}{N} \sigma^{\mu\nu} \right)^N = \exp\left(-\frac{i}{4} \omega_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu}\right),$$

waarbij de eindige reële coëfficiënten $\omega_{\mu\nu}$ door de Lorentz-transformatie worden vastgelegd.

De spin-operator en intrinsieke spin: onder ruimtelijke rotaties over een hoek α rond een as georiënteerd langs de eenheidsrichting \vec{e}_n transformeren de Dirac-spinoren als volgt (zie werkcollege):

$$\psi'(x') = \exp(-i\alpha \vec{e}_n \cdot \hat{S}/\hbar) \psi(x) \quad , \quad \hat{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & \emptyset \\ \emptyset & \vec{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (312)$$

De hermitische operator \hat{S} is te interpreteren als Dirac-spinoperator, aangezien het de rotaties genereert in de ruimte opgespannen door de vier intrinsieke vrijheidsgraden van de Dirac-spinoren. Omdat deze spinoperator voldoet aan

$$\forall_{\psi} \hat{S}^2 \psi(x) = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} \vec{\sigma}^2 & \emptyset \\ \emptyset & \vec{\sigma}^2 \end{pmatrix} \psi(x) \stackrel{(B.4)}{=} \frac{3}{4} \hbar^2 \psi(x), \quad (313)$$

moeten we concluderen dat de Dirac-vergelijking een relativistische golfvergelijking is voor spin-1/2 deeltjes. Waarom het aantal vrijheidsgraden verdubbeld lijkt te zijn ten opzichte van het niet-relativistische geval, waar de spinruimte 2-dimensionaal is, zal pas in hoofdstuk 5 duidelijk worden.

Lorentz-boosts, zonder bewijs (geen tentamenstof): beschouw de situatie dat het inertiaalsysteem S' met eenparige snelheid v beweegt in de \vec{e}_n -richting ten opzichte van het inertiaalsysteem S . Deze Lorentz-boost geeft aanleiding tot de transformatie

$$S(\Lambda) = \cosh(\eta/2) I - \sinh(\eta/2) \begin{pmatrix} \emptyset & \vec{\sigma} \cdot \vec{e}_n \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{e}_n & \emptyset \end{pmatrix} \quad , \quad \eta \equiv \frac{1}{2} \ln\left(\frac{1+v/c}{1-v/c}\right) \quad (314)$$

in de spinruimte. Deze transformatie is niet unitair, aangezien $S^\dagger(\Lambda) = S(\Lambda) \neq S^{-1}(\Lambda)$. Dit houdt in dat de normering van de golf functie in een gegeven ruimte-tijd punt niet behouden is. Deze verandering van de normering is noodzakelijk om de Lorentz-contractie ten gevolge van de boost te compenseren (zie § 3.2.4).

(II) Ruimtelijke inversie en tijdomkeer: de transformatie karakteristiek voor de discrete homogene Lorentz-transformaties kunnen rechtstreeks uit vergelijking (306) worden afgeleid door $S(\Lambda)$ wederom te ontbinden ten opzichte van de basis (303). Voor de pariteitstransformatie kan zo worden afgeleid dat (zie extra oefenopgave)

$$\psi'(x') = S(\Lambda_P) \psi(x) \quad , \quad S(\Lambda_P) = \exp(i\varphi_P) \gamma^0 \quad (\varphi_P \in \mathbb{R}). \quad (315)$$

Evenzo kan voor de tijdomkeertransformatie worden afgeleid dat

$$\psi'(x') = S(\Lambda_T) \psi^*(x) \quad , \quad S(\Lambda_T) = \exp(i\varphi_T) \sigma^{13} \quad (\varphi_T \in \mathbb{R}). \quad (316)$$

(III) **Tijd/ruimte translaties:** tenslotte bekijken we constante tijd- en ruimtetranslaties van de oorsprong, d.w.z. $x'^{\mu} = x^{\mu} + a^{\mu}$ met a^{μ} een constante 4-vector. Aangezien de Dirac-operator $(i\hbar\hat{\not{D}} - mc)$ invariant is onder translaties, is er geen bijbehorende transformatie in de spinorruimte nodig.

3.2.4 Oplossingen van de Dirac-vergelijking

De Dirac-vergelijking voor een vrij deeltje bevat een tijdsafhankelijke Hamilton-operator die niet afhangt van \vec{x} , d.w.z. $[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = 0$. Derhalve zijn er oplossingen te vinden die simultane eigenfuncties zijn van \hat{H} en $\hat{\vec{p}}$:

$$\psi_p(x) = u(\vec{p}) \exp(-ip \cdot x/\hbar), \quad (317)$$

waarbij de eigenwaarden E van $\hat{E} = i\hbar\partial/\partial t$ en \vec{p} van $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ verwerkt zijn in de contravariante impulsvector p^{μ} zodanig dat $p^0 = E/c$. Deze stationaire vlakke-golf oplossingen van de Dirac-vergelijking moeten voldoen aan

$$(i\hbar\hat{\not{D}} - mc)\psi_p(x) = 0 \xrightarrow{(317)} (\not{p} - mc)u(\vec{p}) = 0. \quad (318)$$

Oplossingen in het ruststelsel: we beginnen met het bepalen van de oplossingen in het zogenaamde ruststelsel, waarvoor geldt dat $\vec{p} = \vec{0}$. Dan moet $u(\vec{0})$ dus voldoen aan de eigenwaardenvergelijking $(E\gamma^0 - mc^2)u(\vec{0}) = 0$, waarbij de matrix $\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & \emptyset \\ \emptyset & -I \end{pmatrix}$ eigenwaarden ± 1 heeft. De gezochte vlakke-golf oplossingen zijn dan

$$\begin{aligned} E = E_+ = mc^2 & \quad : \text{eigenvectoren} \quad u^{(1)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(2)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ E = E_- = -mc^2 & \quad : \text{eigenvectoren} \quad u^{(3)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(4)}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (319)$$

Negatieve energieën en de Dirac-zee: we zien dat er ook hier sprake is van negatieve-energietoestanden, hetgeen in dit geval is veroorzaakt doordat \hat{H} lineair is in $\hat{\vec{p}}$ in plaats van kwadratisch. De Dirac-spinoren lijken tegelijkertijd twee soorten spin-1/2 deeltjes te beschrijven, één soort met positieve energie en één met negatieve energie. Wederom is dus het vrije-deeltjes energiespectrum aan de onderkant onbegrensd. Echter, omdat we hier met fermionen te maken hebben kunnen geïnduceerde transitie van positieve naar negatieve-energietoestanden voorkomen worden. Dirac nam hiertoe aan dat in de vacuümtoestand van het universum alle 1-fermion negatieve-energietoestanden bezet zijn. Het vacuüm bestaat zo uit een oneindige zee van deeltjes met negatieve energie (Dirac-zee)

en geen enkel deeltje met positieve energie. Het Pauli-uitsluitingsprincipe verbiedt dan de ongewenste overgangen naar deze bezette negatieve-energietoestanden. We zullen in § 3.2.6 nog een keer terugkomen op de implicaties van deze aanname. Tevens zal er dan kritisch worden ingegaan op mogelijke problemen die verbonden zijn met het bestaan van zo'n Dirac-zee.

Oplossingen met eindige impuls: voor de volledigheid bekijken we kort hoe de vlakke-golf oplossingen veranderen voor eindige impulsen. Deze oplossingen kunnen worden verkregen door $u(\vec{0})$ naar het juiste inertiaalsysteem over te voeren door middel van een geschikte Lorentz-boost $S(\Lambda)$. Het is echter eenvoudiger om gebruik te maken van het feit dat een oplossing van de Dirac-vergelijking automatisch een oplossing is van de Klein-Gordon vergelijking, zodat een vlakke-golf oplossing moet voldoen aan de conditie $p^2 = m^2 c^2$. De bijbehorende eigenvectoren worden dan simpelweg verkregen uit de oplossingen (319) in het rustsysteem:

$$u^{(r)}(\vec{p}) = N(\not{p} + mc)u^{(r)}(\vec{0}) \quad , \quad E = \begin{cases} E_+ = \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} & \text{voor } r = 1, 2 \\ E_- = -\sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} & \text{voor } r = 3, 4 \end{cases} \quad ,$$

aangezien $(\not{p} - mc)u^{(r)}(\vec{p}) = N(p^2 - m^2 c^2)u^{(r)}(\vec{0}) = 0$ voor $p^2 = m^2 c^2$.

Bij het bepalen van de normeringsfactor N moeten we rekening houden met het feit dat de normering van ψ verandert onder Lorentz-boosts. Dit is een simpel gevolg van behoud van waarschijnlijkheid: de waarschijnlijkheid om het systeem in een ruimtelijk volume-elementje $d\vec{x}$ rond \vec{x} te vinden in het rustsysteem S moet gelijk zijn aan de waarschijnlijkheid om het systeem in het getransformeerde volume-elementje $d\vec{x}'$ rond \vec{x}' te vinden in het gebooste inertiaalsysteem S' . Oftewel, er moet gelden dat $|\psi(x)|^2 d\vec{x} = |\psi'(x')|^2 d\vec{x}'$, met $d\vec{x}' = (mc^2/E_+)d\vec{x} = d\vec{x} \sqrt{1 - \vec{v}^2/c^2}$ ten gevolge van de Lorentz-contractie in de boostrichting. Derhalve moet $|\psi(x)|^2$ transformeren als de tijdcomponent van een contra-variant vectorveld, zoals te verwachten was op grond van het feit dat $|\psi(x)|^2 = j^0(x)/c$. Dit vertaalt zich in de normeringsconditie

$$u^{(r)}(\vec{p})^\dagger u^{(s)}(\vec{p}) \equiv \frac{E_+}{mc^2} \delta_{rs} \quad \Rightarrow \quad |N| = \frac{1}{\sqrt{2m(E_+ + mc^2)}} \quad . \quad (320)$$

Voorbeeld: beschouw $\vec{p} = p\vec{e}_z$. Dan geldt $\not{p} + mc = p^0 \gamma^0 - p\gamma^3 + mcI$, zodat

$$u^{(1)}(p\vec{e}_z) = \frac{N}{c} \begin{pmatrix} E_+ + mc^2 \\ 0 \\ cp \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad u^{(2)}(p\vec{e}_z) = \frac{N}{c} \begin{pmatrix} 0 \\ E_+ + mc^2 \\ 0 \\ -cp \end{pmatrix} \quad ,$$

$$u^{(3)}(p\vec{e}_z) = \frac{N}{c} \begin{pmatrix} -cp \\ 0 \\ E_+ + mc^2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(4)}(p\vec{e}_z) = \frac{N}{c} \begin{pmatrix} 0 \\ cp \\ 0 \\ E_+ + mc^2 \end{pmatrix}.$$

Opmerking: de tweevoudige ontaarding van de energie-eigenwaarden voor gegeven impulseigenwaarde \vec{p} kan worden opgeheven door ook nog een geschikt spinkwantumgetal te specificeren. Zo'n geschikt spinkwantumgetal wordt gegeven door de spin in de bewegingsrichting (heliciteit), met bijbehorende operator $\hat{S}(\vec{p}) = \vec{\hat{S}} \cdot \vec{e}_p$ (zie werkcollege). In bovenstaand voorbeeld heeft $u^{(r)}(p\vec{e}_z)$ heliceit $\hbar/2$ als $r = 1, 3$ en $-\hbar/2$ als $r = 2, 4$. Dat \hat{H} , \hat{p} en $\hat{S}(\vec{p})$ commensurabele operatoren zijn volgt uit de volgende symmetrie-overweging die geldt voor willekeurige relativistische vrije-deeltjestheorieën. Ten eerste is een vrije-deeltjestheorie translatie-invariant omdat de lege ruimte volledig isotroop is. Dit houdt in dat \hat{H} en \hat{p} commuteren. Hetzelfde verhaal geldt in principe voor rotatiesymmetrie. Echter, \hat{p} introduceert een expliciete richting zodat uitsluitend rotatiesymmetrie rond deze richting overblijft en alleen \hat{H} , \hat{p} en $\hat{p} \cdot \vec{\hat{J}} = \hat{p} \cdot \vec{\hat{S}}$ onderling commuteren.

3.2.5 Het succesverhaal van de Dirac-theorie

Nu wordt het tijd om de implicaties van de Dirac-theorie wat preciezer onder de loep te nemen. We beginnen met de successen. Hiertoe nemen we aan dat we te maken hebben met spin-1/2 deeltjes met lading q en rustmassa m . Vervolgens beschouwen we de interactie met klassieke elektromagnetische velden, beschreven door een reële vectorpotentiaal $\vec{A}(x)$ en een reële scalaire potentiaal $\phi(x)$. Deze interactie wordt op de gebruikelijke manier verkregen door middel van minimale substitutie:

$$\hat{E} \rightarrow \hat{E} - q\phi(\hat{x}) \quad \text{en} \quad \hat{p} \rightarrow \hat{p} - q\vec{A}(\hat{x}). \quad (321)$$

Met behulp van de elektromagnetische 4-vectorpotentiaal

$$A^\mu(x) : \quad A^0(x) \equiv \phi(x)/c \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} A^1(x) \\ A^2(x) \\ A^3(x) \end{pmatrix} \equiv \vec{A}(x) \quad (322)$$

kan de minimale substitutie in een covariante vorm worden geschreven:

$$\hat{p}^\mu \rightarrow \hat{p}^\mu - qA^\mu(\hat{x}) \quad \xrightarrow{\text{plaatsrepr.}} \quad i\hbar\partial^\mu \rightarrow i\hbar\partial^\mu - qA^\mu(x). \quad (323)$$

Zo vinden we de Dirac-vergelijking voor spin-1/2 deeltjes met lading q en rustmassa m onder invloed van een klassiek elektromagnetisch veld:

$$(i\hbar\hat{\not{D}} - mc - q\hat{A}(x))\psi(x) = 0. \quad (324)$$

Om te zien wat er veranderd is ten opzichte van de niet-relativistische QM worden er nu drie speciale gevallen beschouwd, waarvan de eerste volledig zal worden uitgewerkt.

(I) Niet-relativistische limiet: intrinsiek magnetisch dipoolmoment.

Als eerste voorbeeld beschouwen we de interactie met statische elektromagnetische velden, zoals constante magneetvelden of de Coulomb-potentiaal ten gevolge van de kern van een 1-elektron atoom. Zo'n statisch elektromagnetisch veld wordt klassiek beschreven door een tijdsonafhankelijke vectorpotentiaal $\vec{A}(\vec{x})$ en een tijdsonafhankelijke scalaire potentiaal $\phi(\vec{x})$. De bijbehorende Hamilton-operator

$$\hat{H} \stackrel{\text{plaatsrepr.}}{=} c\vec{\alpha} \cdot [-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{r})] + q\phi(\vec{r}) + \beta mc^2 \quad (325)$$

hangt niet van $t \equiv x^0/c$ af, maar wel van $\vec{r} \equiv \vec{x}$. Derhalve heeft het zin om op zoek te gaan naar stationaire oplossingen van het type

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \exp(-iEt/\hbar) \quad , \quad \hat{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = E\psi(\vec{r}, t) . \quad (326)$$

Selecteer nu een oplossing met positieve energie, schrijf $E = E_{\text{NR}} + mc^2$ om de rustmassa-term af te splitsen, en ontbindt de Dirac-spinor in termen van twee 2-dimensionale spinoren ψ_U en ψ_D :

$$\psi(\vec{r}) \equiv \begin{pmatrix} \psi_U(\vec{r}) \\ \psi_D(\vec{r}) \end{pmatrix} . \quad (327)$$

Uit de eigenwaardenvergelijking $\hat{H}\psi(\vec{r}, t) = E\psi(\vec{r}, t)$ volgt dan in de Dirac-representatie [zie vergelijking (292)]

$$\begin{aligned} (E_{\text{NR}} + mc^2)\psi_U &= (q\phi + mc^2)\psi_U + c\vec{\sigma} \cdot (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_D , \\ (E_{\text{NR}} + mc^2)\psi_D &= c\vec{\sigma} \cdot (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_U + (q\phi - mc^2)\psi_D . \end{aligned} \quad (328)$$

In de eerste vergelijking vallen de mc^2 termen weg, terwijl dat niet het geval is in de tweede vergelijking. Op grond hiervan zien we dat

$$\psi_D = \frac{c\vec{\sigma} \cdot (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_U}{E_{\text{NR}} + 2mc^2 - q\phi} \stackrel{\text{NR limiet}}{\longrightarrow} \psi_D \approx \vec{\sigma} \cdot \left(\frac{-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}}{2mc} \right) \psi_U , \quad (329)$$

aangezien voor de positieve-energie oplossing in de niet-relativistische limiet geldt dat de totale en potentiële niet-relativistische energieën voldoen aan $|E_{\text{NR}}|, |q\phi| \ll mc^2$. Dit betekent dat de 2-dimensionale (kleine) component ψ_D onderdrukt is met een factor van $\mathcal{O}(p/mc) = \mathcal{O}(v/c)$ ten opzichte van de andere 2-dimensionale (grote) component ψ_U . Invullen van de limiet (329) in de eerste vergelijking van (328) geeft

$$\begin{aligned} E_{\text{NR}}\psi_U &= q\phi\psi_U + \frac{1}{2m} \left[\vec{\sigma} \cdot (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}) \right]^2 \psi_U \\ &= \left(q\phi + \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})^2 + \frac{i}{2m} \vec{\sigma} \cdot \left[(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}) \times (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}) \right] \right) \psi_U , \end{aligned}$$

hetgeen resulteert in de zogenaamde Pauli-vergelijking voor de 2-dimensionale spinor ψ_U :

$$E_{\text{NR}} \psi_U = \left[q\phi + \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})^2 - \frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{B}} \right] \psi_U. \quad (330)$$

Hierbij is gebruik gemaakt van de operatoridentiteit (B.6), alsmede de puur kwantummechanische uitdrukking

$$(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}) \times (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}) = i\hbar q (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = i\hbar q \vec{\mathcal{B}}.$$

De eerste twee termen aan de rechterkant van de Pauli-vergelijking herkennen we als de interactie tussen een geladen spin-0 deeltje en een klassiek elektromagnetisch veld. De laatste term is één van de grote successen van de Dirac-theorie. De Dirac-theorie voorspelt de experimenteel waargenomen interactie tussen een magneetveld $\vec{\mathcal{B}}$ en het door de spin geïnduceerde intrinsiek magnetisch dipoolmoment $\hat{\mathcal{M}}_S$:

$$\boxed{\hat{H}_B^{\text{spin}} = -\hat{\mathcal{M}}_S \cdot \vec{\mathcal{B}} = -\frac{q\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{B}} \equiv \frac{|e|\hbar}{4m} g \vec{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{B}}}. \quad (331)$$

Gevolg: een elementair deeltje met lading $q = -|e|$ dat door de Dirac-theorie wordt beschreven (zoals een elektron of muon) heeft automatisch een laagste-orde g-factor van 2. Dit is in overeenstemming met het experiment en was onbegrepen in de niet-relativistische theorie! Let wel: voor niet-elementaire deeltjes (zoals antiprotonen), die zelf weer uit kleinere deeltjes bestaan, hoeft niet op laagste orde te gelden dat $g = 2$.

(II) Relativistische correcties: fijnstructuur voor centrale potentialen.

Beschouw nu een elektrostatische centrale potentiaal, waarvoor geldt dat $\vec{A}(\vec{r}) = \vec{0}$ en $q\phi(\vec{r}) = V(r)$. Als dan bovenstaande niet-relativistische benadering één stap verder wordt doorgevoerd, dan verkrijgen we de eerste-orde relativistische correcties op de Pauli-vergelijking. Dit resulteert in een drietal relativistische correcties op de niet-relativistische Hamilton-operator (zonder bewijs):

$$\Delta \hat{H}_{\text{FS}} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \mathcal{V}_2(\hat{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \mathcal{V}_3(\hat{r}) \hat{L} \cdot \vec{\sigma},$$

met $\mathcal{V}_2(\vec{r}) \equiv \vec{\nabla}^2 V(r)$ en $\mathcal{V}_3(r) \equiv \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$, (332)

hetgeen precies overeenkomt met de drie storingscorrecties die o.a. verantwoordelijk zijn voor de fijnstructuur van 1-elektron atomen (zie het college Kwantummechanica 1). De eerste term is een relativistische correctie op de kinetische energie. De tweede term is een relativistische correctie op de potentiële energie (Darwin-term genaamd). De laatste term is de zogenaamde spin-baan koppeling, die de interactie beschrijft tussen het intrinsiek magnetisch dipoolmoment van het spin-1/2 deeltje (t.g.v. de spin) en het magneetveld geïnduceerd door het baanimpulsmoment van het deeltje.

(III) Discrete energieniveaus van het relativistisch 1-elektron atoom.

Beschouw weer de Hamilton-operator voor een elektrostatische centrale potentiaal

$$\hat{H} = c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta mc^2 + V(\hat{r}) . \quad (333)$$

In het niet-relativistische geval vormden de operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z , \hat{S}^2 , \hat{S}_z en $\hat{\mathcal{P}}$ een complete set commensurabele observabelen. Echter, \hat{L} en \hat{S} commuteren nu niet meer afzonderlijk met de Hamilton-operator door de aanwezigheid van relativistische spininteracties in de Dirac-vergelijking (zoals de spin–baan koppeling). De totale-impulsmomentoperator $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ commuteert daarentegen wel met de Hamilton-operator, aangezien $V(r)$ de rotatiesymmetrie van de lege ruimte respecteert. De energieniveaus van het relativistisch 1-elektron atoom zullen dus gespecificeerd gaan worden in termen van de kwantumgetallen j behorende bij \hat{J}^2 , hetgeen typisch is voor de relativistische QM. Het baanimpulsmomentkwantumgetal ℓ is namelijk geen goed kwantumgetal meer, maar het totale-impulsmomentkwantumgetal j wel. In afwezigheid van een voorkeursrichting zullen de energieniveaus onafhankelijk zijn van het magnetische kwantumgetal m_j behorende bij \hat{J}_z . Verder merken we op dat de niet-relativistische pariteitsoperator $\hat{\mathcal{P}}$ niet met de Hamilton-operator commuteert, aangezien \hat{H} lineair is in $\hat{\vec{p}}$ en $\{\hat{\mathcal{P}}, \hat{\vec{p}}\} = 0$. De relativistische pariteitsoperator $\beta\hat{\mathcal{P}}$ commuteert wel met de Hamilton-operator omdat ook $\{\beta, \vec{\alpha}\} = 0$, waarbij β de werking aangeeft van de pariteitstransformatie op de spinorruimte [zie $S(\Lambda_P)$ in vergelijking (315)].

Voor een 1-elektron atoom met $V(r) = -Z\alpha\hbar c/r$ bevat het energiespectrum twee continue takken voor $|E| \geq m_e c^2$ en een set van discrete positieve energieniveaus behorende bij gebonden toestanden (zie § 15.5 van Bransden & Joachain voor nadere details):

$$E_{nj} = m_e c^2 \left\{ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - j - 1/2 + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}\right)^2} \right\}^{-1/2},$$

met $n = 1, 2, \dots$ en $j = 1/2, 3/2, \dots, n - 1/2$. (334)

Deze energieniveaus zijn $(2j + 1)$ -voudig ontaard ten gevolge van het magnetisch kwantumgetal $m_j = -j, \dots, j$. Verder is elk niveau nog eens tweevoudig ontaard ten gevolge van de pariteit $(-1)^\ell$ met $\ell = j \pm 1/2$, met uitzondering van het geval $j = n - 1/2$ waarvoor alleen $\ell = j - 1/2 = n - 1$ is toegestaan. Experimenteel wordt deze zogenaamde fijnstructuur met hoge precisie bevestigd. In de niet-relativistische limiet kan er ontwikkeld worden in machten van $v/c = \mathcal{O}(Z\alpha/n)$:

$$E_{nj} - m_e c^2 \approx -\frac{1}{2} m_e c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right], \quad (335)$$

hetgeen overeenkomt met het resultaat dat in het college Kwantummechanica 1 is afgeleid.

3.2.6 Problemen met de 1-deeltjes Dirac-theorie

De Dirac-vergelijking geeft als relativistische kwantummechanische golfvergelijking aanleiding tot een aantal moeilijk te interpreteren aspecten. Zoals we hebben gezien is er het probleem met de negatieve-energietoestanden en de daarbij behorende van onderen onbegrensde energiespectra. Overgangen van positieve- naar negatieve-energietoestanden kunnen worden voorkomen door aan te nemen dat alle negatieve-energietoestanden bezet zijn. Als 1-deeltjestheorie is dit enigszins onbevredigend, omdat het feitelijke aantal relevante deeltjes oneindig is en dus eigenlijk ook interacties tussen deze deeltjes zouden moeten worden meegenomen. Verder is een oneindige negatieve vacuümenergie misschien kwantummechanisch gezien geen probleem, maar het heeft wel kosmologische implicaties.

Vraag: *Wanneer verwachten we invloeden te zien ten gevolge van de aanwezigheid van de Dirac-zee en kunnen we feitelijk niet meer spreken van een 1-deeltjestheorie?*

Om een deeltje vanuit de Dirac-zee aan te slaan is ten minste $2mc^2$ aan energie nodig. Daarbij ontstaat er een gat in de zee en wordt het bijbehorende negatieve-energie deeltje gepromoveerd tot een positieve-energie deeltje. Deze paarcreatie van een deeltje en een gat is het relativistische analogon van de elektron-gat excitatie in gatentheorie (zie § 1.7.1).

De kwantummechanische grens op een 1-deeltjestheorie: beschouw een deeltje met positieve energie dat gelocaliseerd is binnen een afstand L . Op grond van de onzekerheidsrelatie van Heisenberg is de kwantummechanische onzekerheid Δp in de impuls van het deeltje dan ten minste $\mathcal{O}(\hbar/L)$. De onzekerheid in de relativistische energie van het deeltje is dan ruwweg $c\Delta p = \mathcal{O}(\hbar c/L)$. Als deze onzekerheid de $2mc^2$ barrière benadert, dan kan er paarcreatie optreden en kan de aanwezigheid van de Dirac-zee zich manifesteren. Kortom, als het deeltje is gelocaliseerd binnen een afstand $L = \mathcal{O}(\hbar/mc)$, hetgeen de Compton-golflengte van het deeltje wordt genoemd, dan hebben we feitelijk niet meer met een 1-deeltjestheorie te maken.

De QM kent dus twee karakteristieke lengteschalen voor een deeltje met massa m en impuls p : op lengteschalen van $\mathcal{O}(\hbar/p)$ manifesteert het kwantummechanische golfkarakter van het deeltje zich en op nog kleinere lengteschalen van $\mathcal{O}(\hbar/mc)$ moet het concept van een individueel puntdeeltje worden losgelaten.

In dit laatste geval is het niet meer zinvol om over het begrip behoud van waarschijnlijkheid te praten. Per slot van rekening kunnen er deeltjes bijgemaakt worden. Er zal dus een andere invulling moeten worden gegeven aan de behoudswet die ten grondslag ligt aan de continuïteitsvergelijking (296). Let wel: in de niet-relativistische limiet spelen veeldeeltjeseffecten nog geen prominente rol. Immers, voor niet-relativistische impulsen $|\vec{p}| \ll mc$ geldt ook dat $|\Delta\vec{p}| \ll mc$ en is de onzekerheid in de plaatscoördinaat derhalve in ieder geval $|\Delta\vec{r}| \gg \mathcal{O}(\hbar/mc)$, hetgeen veel groter is dan de Compton-golflengte.

4 Kwantisatie van het elektromagnetisch veld

Er is nu dus een tamelijk verwarrende situatie ontstaan waarbij we niet weten hoe we de successen en tekortkomingen van de relativistische 1-deeltjes QM moeten duiden. Om hierover iets zinnigs te kunnen zeggen richten we onze aandacht nu op een theorie waarvoor we de correcte relativistische golfvergelijking al kennen, namelijk elektromagnetisme.

In dit hoofdstuk zal het elektromagnetisch veld worden gekwantiseerd door de gebruikelijke kanonieke kwantisatiecondities toe te passen op de klassieke elektromagnetische Hamiltoniaan. Uiteindelijk zullen we zien dat de kwantisatie van het elektromagnetisch veld een zeer natuurlijke toepassing is van tweede kwantisatie, zoals beschreven in §1.5. De vrije elektromagnetische theorie is in feite een veeldeeltjestheorie voor massaloze spin-1 kwanta, fotonen genaamd.

Aanverwant materiaal is te vinden in Schwabl (Hst. 14) en Merzbacher (Hst. 23).

4.1 Klassieke elektromagnetische velden: covariante formulering

We gaan uit van de Maxwell-vergelijkingen voor een elektromagnetisch veld in het vacuüm met ladingsdichtheid $\rho_c(\vec{r}, t)$ en stroomdichtheid $\vec{j}_c(\vec{r}, t)$:

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, t) = 0 \quad , \quad \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, t)} \quad , \quad (336)$$

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho_c(\vec{r}, t)} \quad , \quad (337)$$

$$\boxed{\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) + \mu_0 \vec{j}_c(\vec{r}, t)} \quad . \quad (338)$$

Hier zijn $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$ en $\vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, t)$ de reële elektrische en magnetische velden. Verder zijn ϵ_0 en μ_0 de permittiviteit en permeabiliteit van het vacuüm, die via de relatie

$$\epsilon_0 \mu_0 = 1/c^2 \quad (339)$$

verbonden zijn met de lichtsnelheid c in het vacuüm.

Voer vervolgens de reële scalaire potentiaal $\phi'(\vec{r}, t)$ en de reële vectorpotentiaal $\vec{A}'(\vec{r}, t)$ in, zodanig dat geldt

$$\boxed{\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \phi'(\vec{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}'(\vec{r}, t) \quad , \quad \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}'(\vec{r}, t)} \quad . \quad (340)$$

Op die manier is automatisch aan de eerste twee Maxwell-vergelijkingen (336) voldaan, aangezien op algemene gronden geldt dat $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}'(\vec{r}, t)) = 0$ en $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \phi'(\vec{r}, t)) = \vec{0}$. De Maxwell-vergelijking (337) kan nu worden omgeschreven tot

$$\begin{aligned} \frac{1}{\epsilon_0} \rho_c(\vec{r}, t) &= -\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}'(\vec{r}, t)) - \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \phi'(\vec{r}, t)) \\ &= \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right) \phi'(\vec{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}'(\vec{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \phi'(\vec{r}, t) \right). \end{aligned}$$

Gebruik makende van de identiteit

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}'(\vec{r}, t)) \stackrel{\text{algemeen}}{=} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}'(\vec{r}, t)) - \vec{\nabla}^2 \vec{A}'(\vec{r}, t)$$

gaat Maxwell-vergelijking (338) tenslotte over in

$$\begin{aligned} \mu_0 \vec{j}_c(\vec{r}, t) &= \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}'(\vec{r}, t)) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{A}'(\vec{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \phi'(\vec{r}, t) \\ &= \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right) \vec{A}'(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}'(\vec{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \phi'(\vec{r}, t) \right). \end{aligned}$$

Vervolgens definiëren we de elektromagnetische 4-vectorpotentialiaal

$$A'^{\mu}(x) : \quad A'^0(x) \equiv \phi'(\vec{r}, t)/c \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} A'^1(x) \\ A'^2(x) \\ A'^3(x) \end{pmatrix} \equiv \vec{A}'(\vec{r}, t) \quad (341)$$

en de elektromagnetische 4-stroom

$$j_c^{\mu}(x) : \quad j_c^0(x) \equiv c \rho_c(\vec{r}, t) \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} j_c^1(x) \\ j_c^2(x) \\ j_c^3(x) \end{pmatrix} \equiv \vec{j}_c(\vec{r}, t). \quad (342)$$

Met behulp van de relatie $1/\epsilon_0 = \mu_0 c^2$ zijn de Maxwell-vergelijkingen dan in de volgende compacte covariante vorm te gieten:

$$\square A'^{\mu}(x) - \partial^{\mu} (\partial_{\nu} A'^{\nu}(x)) = \mu_0 j_c^{\mu}(x). \quad (343)$$

Als nu ∂_{μ} op deze golfvergelijking wordt losgelaten, dan volgt onmiddellijk dat de elektromagnetische 4-stroom aan de continuïteitsvergelijking $\partial_{\mu} j_c^{\mu}(x) = 0$ moet voldoen. Dit brengt tot uitdrukking dat de totale elektrische lading behouden moet zijn, in tegenstelling tot de kwantummechanische waarschijnlijkheidsinterpretatie die we er in het vorige hoofdstuk aan zouden hebben opgehangen. In het werkcollege zal verder met behulp van het relativiteitsprincipe worden bewezen dat $A'^{\mu}(x)$ transformeert als een contravariant vectorveld en dat het (als kwantummechanische golf functie gezien) spin-1 deeltjes beschrijft.

Voor de kwantummechanische interpretatie van $A'^{\mu}(x)$ beperken we de beschouwing tot een vrij elektromagnetisch veld zonder lading of stroom. In dat geval reduceert de golfvergelijking tot

$$\square A'^{\mu}(x) - \partial^{\mu}(\partial_{\nu}A'^{\nu}(x)) = 0. \quad (344)$$

Merk op dat de potentialen $\phi'(\vec{r}, t)$ en $\vec{A}'(\vec{r}, t)$ niet door de conditie (340) volledig worden vastgelegd. Immers, voor willekeurige reële differentieerbare functies $\chi(\vec{r}, t)$ geven de getransformeerde potentialen

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{A}(\vec{r}, t) &= \vec{A}'(\vec{r}, t) - \vec{\nabla}\chi(\vec{r}, t) & \text{en} & & \phi(\vec{r}, t) &= \phi'(\vec{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t}\chi(\vec{r}, t) \\ \Rightarrow A^{\mu}(x) &= A'^{\mu}(x) + \partial^{\mu}\chi(x) \end{aligned}} \quad (345)$$

aanleiding tot precies dezelfde elektrische/magnetische velden en beschrijven dus dezelfde fysica. Deze keuzevrijheid wordt de ijkvrijheid genoemd. De ijkvrijheid kan nu worden gebruikt om de potentialen in een zodanige vorm te gieten dat ze ook voldoen aan de zogenaamde Coulomb-condities

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \quad \text{en} \quad \phi(\vec{r}, t) = 0}, \quad (346)$$

zodat

$$\boxed{\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(\vec{r}, t) \quad \text{en} \quad \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t)}. \quad (347)$$

Deze ijkkeuze wordt de Coulomb-ijk genoemd. We kiezen voor deze niet-covariante ijkkeuze, in plaats van een covariante conditie zoals $\partial_{\mu}A^{\mu}(x) = 0$, omdat op die manier de twee fysische vrijheidsgraden van de theorie makkelijker geïdentificeerd kunnen worden. In een covariante ijk moeten de twee resterende, fysisch niet relevante vrijheidsgraden namelijk ook worden meegenomen. In de Coulomb-ijk reduceren de Maxwell-vergelijkingen tot de vrije elektromagnetische golfvergelijking

$$\boxed{\square \vec{A}(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right) \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \quad , \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0}, \quad (348)$$

zodat elke component van $\vec{A}(\vec{r}, t)$ aan de Klein–Gordon vergelijking voldoet met $m = 0$. Ook de elektrische en magnetische velden voldoen dan aan deze simpele golfvergelijking.

4.1.1 Oplossing van de vrije elektromagnetische golfvergelijking

We gaan de golfvergelijking (348) voor $\vec{A}(\vec{r}, t)$ nu oplossen in een afgesloten ruimte met periodieke randvoorwaarden, bijvoorbeeld een kubus met ribben L . Deze restrictie kan later waar nodig worden opgeheven door de continuümlimiet $L \rightarrow \infty$ te nemen (zie App. A.2). Vanwege de periodiciteit kan de oplossing worden uitgedrukt in termen van vlakke golven

waarvan de ruimtelijke Fourier-modes $\propto \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ gekwantiseerde waarden hebben voor de golfvectors (propagatievectors) $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$:

$$\vec{k} \equiv k \vec{e}_k \equiv \frac{\omega_k}{c} \vec{e}_k \stackrel{\S 2.5.2}{=} \frac{2\pi}{L} \vec{\nu}, \quad \text{met} \quad \nu_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \wedge \vec{\nu} \neq \vec{0}. \quad (349)$$

De Fourier-mode bij $\vec{\nu} = \vec{0}$ wordt hier weggelaten omdat er in dat geval geen sprake is van een elektromagnetische golf. De algemene oplossing van de vrije elektromagnetische golfvergelijking wordt dan

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V\epsilon_0}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \left[\overbrace{a_{\vec{k},\lambda} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t)}^{\text{positieve-frequentie opl.}} + \overbrace{a_{\vec{k},\lambda}^* \exp(i\omega_k t - i\vec{k} \cdot \vec{r})}^{\text{negatieve-frequentie opl.}} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \vec{u}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) \left[a_{\vec{k},\lambda}(t) + \eta_\lambda a_{-\vec{k},\lambda}^*(t) \right] \end{aligned} \quad (350)$$

in termen van de Fourier-componenten

$$\vec{u}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) \equiv \overbrace{\frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{\sqrt{V}}}^{\text{Fourier-mode}} * \overbrace{\vec{e}_\lambda(\vec{e}_k)}^{\text{eenheidsvector}}. \quad (351)$$

De factor $\sqrt{\hbar/2\omega_k}$ is hierbij ingevoerd om de Fourier-coëfficiënten

$$a_{\vec{k},\lambda}(t) \equiv a_{\vec{k},\lambda} \exp(-i\omega_k t) \quad (352)$$

dimensieloos te maken, hetgeen van belang zal zijn voor de kwantisatie. Ten gevolge van de Coulomb-conditie (346) is één van de drie vrijheidsgraden van de vectorpotentiaal $\vec{A}(\vec{r}, t)$ niet fysisch, aangezien het kan worden weggeijkt. Dit aspect is terug te vinden in de transversaliteit van de polarisatievectors $\vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \in \mathbb{R}^3$:

$$\vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \cdot \vec{k} \stackrel{\vec{\nabla} \cdot \vec{A}=0}{=} 0, \quad \text{met} \quad \vec{e}_\lambda^2(\vec{e}_k) = 1 \quad \text{en} \quad \vec{e}_1(\vec{e}_k) \cdot \vec{e}_2(\vec{e}_k) = 0. \quad (353)$$

Deze polarisatievectors worden zodanig gekozen dat de eenheidsvectoren $\vec{e}_1(\vec{e}_k)$, $\vec{e}_2(\vec{e}_k)$ en \vec{e}_k een rechtshandig assenstelsel vormen:

$$\begin{aligned} \vec{e}_1(\vec{e}_k) \times \vec{e}_2(\vec{e}_k) &= \vec{e}_k, \quad \vec{e}_2(\vec{e}_k) \times \vec{e}_k = \vec{e}_1(\vec{e}_k), \quad \vec{e}_k \times \vec{e}_1(\vec{e}_k) = \vec{e}_2(\vec{e}_k), \\ \sum_{\lambda=1}^2 \epsilon_{\lambda,j}(\vec{e}_k) \epsilon_{\lambda,l}(\vec{e}_k) + \frac{k_j}{k} \frac{k_l}{k} &\stackrel{\text{volledigheid}}{=} \delta_{jl} \quad (j, l = x, y, z), \end{aligned} \quad (354)$$

en zodanig dat dit behouden blijft onder de spiegeling $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$:

$$\vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \xrightarrow{\vec{k} \rightarrow -\vec{k}} \vec{e}_\lambda(-\vec{e}_k) \equiv \eta_\lambda \vec{e}_\lambda(\vec{e}_k), \quad \text{met} \quad \eta_1 = +1 \quad \text{en} \quad \eta_2 = -1. \quad (355)$$

Nog een paar opmerkingen over vergelijking (350).

- In de laatste stap van vergelijking (350) is \vec{k} vervangen door $-\vec{k}$ in de tweede term. Hierbij is gebruikt dat de sommatie over alle \vec{k} -waarden symmetrisch is onder deze transformatie en dat de polarisatievector transformeert overeenkomstig vergelijking (355). Het zal van de toepassing afhangen welke van de twee gegeven uitdrukkingen het handigst is om te gebruiken. Om af te lezen dat $\vec{A}(\vec{r}, t)$ reëel is kan je bijvoorbeeld beter de eerste uitdrukking gebruiken, terwijl de tweede uitdrukking meer geschikt is als er ruimtelijke integralen moeten worden uitgevoerd.
- In het vorige hoofdstuk zouden we de positieve-frequentie termen $\propto \exp(-i\omega_k t)$ hebben geïnterpreteerd als positieve-energie oplossingen en de negatieve-frequentie termen $\propto \exp(i\omega_k t)$ als negatieve-energie oplossingen. Dat gaan we hier dus niet doen omdat we weten hoe de klassieke energie van het systeem er precies uitziet.

4.1.2 Elektromagnetische golven in termen van harmonische oscillaties

De volgende stap is de bepaling van de Hamiltoniaan (energie) van het vrije elektromagnetische veld, gebruik makende van de oplossing (350). Uit de klassieke elektrodynamica weten we dat deze Hamiltoniaan wordt gegeven door

$$\mathcal{H} = \frac{\epsilon_0}{2} \int_V d\vec{r} \left[\vec{\mathcal{E}}^2(\vec{r}, t) + c^2 \vec{\mathcal{B}}^2(\vec{r}, t) \right] \stackrel{(347)}{=} \frac{\epsilon_0}{2} \int_V d\vec{r} \left[\left(\frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \right)^2 + c^2 \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 \right], \quad (356)$$

waarbij $\rho_{\mathcal{H}}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 [\vec{\mathcal{E}}^2(\vec{r}, t) + c^2 \vec{\mathcal{B}}^2(\vec{r}, t)]/2$ de energiedichtheid is van het klassieke elektromagnetische veld. Met behulp van de orthonormaliteitsrelaties voor de Fourier-componenten die in appendix E zijn gegeven is dit uit te drukken in termen van de onafhankelijke coëfficiënten $a_{\vec{k}, \lambda}(t)$ en $a_{\vec{k}, \lambda}^*(t)$. Voor de energiebijdrage ten gevolge van het elektrisch veld gaat dit als volgt:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathcal{E}} &\stackrel{(356)}{=} \frac{\epsilon_0}{2} \int_V d\vec{r} \left(\frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \right)^2 \stackrel{\vec{A} \in \mathbb{R}^3}{=} \frac{\epsilon_0}{2} \int_V d\vec{r} \left(\frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \right) \cdot \left(\frac{\partial \vec{A}^*(\vec{r}, t)}{\partial t} \right) \\ &\stackrel{(350)}{=} \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\lambda, \lambda'=1}^2 \frac{\hbar}{2\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \left[\dot{a}_{\vec{k}, \lambda}(t) + \eta_{\lambda} \dot{a}_{-\vec{k}, \lambda}^*(t) \right] \left[\dot{a}_{\vec{k}', \lambda'}^*(t) + \eta_{\lambda'} \dot{a}_{-\vec{k}', \lambda'}(t) \right] * \\ &\quad * \int_V d\vec{r} \vec{u}_{\vec{k}, \lambda}(\vec{r}) \cdot \vec{u}_{\vec{k}', \lambda'}^*(\vec{r}) \stackrel{(E.5)}{=} \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \frac{\hbar}{\omega_k} \left| \dot{a}_{\vec{k}, \lambda}(t) + \eta_{\lambda} \dot{a}_{-\vec{k}, \lambda}^*(t) \right|^2 \\ &\stackrel{(352)}{=} \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar \omega_k \left| a_{\vec{k}, \lambda}(t) - \eta_{\lambda} a_{-\vec{k}, \lambda}^*(t) \right|^2. \end{aligned}$$

De energiebijdrage ten gevolge van het magnetisch veld gaat op analoge wijze:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_B &\stackrel{(356)}{=} \frac{c^2 \epsilon_0}{2} \int_V d\vec{r} \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 \stackrel{\vec{A} \in \mathbb{R}^3}{=} \frac{c^2 \epsilon_0}{2} \int_V d\vec{r} \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) \right) \cdot \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}^*(\vec{r}, t) \right) \\
&\stackrel{(350)}{=} \frac{1}{2} c^2 \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\lambda, \lambda'=1}^2 \frac{\hbar}{2\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \left[a_{\vec{k}, \lambda}(t) + \eta_\lambda a_{-\vec{k}, \lambda}^*(t) \right] \left[a_{\vec{k}', \lambda'}^*(t) + \eta_{\lambda'} a_{-\vec{k}', \lambda'}(t) \right] * \\
&\quad * \int_V d\vec{r} \left(\vec{k} \times \vec{u}_{\vec{k}, \lambda}(\vec{r}) \right) \cdot \left(\vec{k}' \times \vec{u}_{\vec{k}', \lambda'}^*(\vec{r}) \right) \\
&\stackrel{(E.6), (349)}{=} \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar \omega_k \left| a_{\vec{k}, \lambda}(t) + \eta_\lambda a_{-\vec{k}, \lambda}^*(t) \right|^2 .
\end{aligned}$$

Samengevoegd vinden we de compacte uitdrukking

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar \omega_k \left(|a_{\vec{k}, \lambda}(t)|^2 + |a_{-\vec{k}, \lambda}(t)|^2 \right) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar \omega_k |a_{\vec{k}, \lambda}(t)|^2 . \quad (357)$$

Omdat geldt dat $|a_{\vec{k}, \lambda}(t)|^2 = |a_{-\vec{k}, \lambda}(t)|^2$ is deze Hamiltoniaan netjes tijdsafhankelijk, zoals verwacht voor een geïsoleerd systeem. In de laatste stap gaan we dit herschrijven in termen van de reële grootheden

$$\begin{aligned}
Q_{\vec{k}, \lambda}(t) &\equiv \left[a_{\vec{k}, \lambda}(t) + a_{\vec{k}, \lambda}^*(t) \right] \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \\
\text{en } P_{\vec{k}, \lambda}(t) &\equiv \dot{Q}_{\vec{k}, \lambda}(t) \stackrel{(352)}{=} -i\omega_k \left[a_{\vec{k}, \lambda}(t) - a_{\vec{k}, \lambda}^*(t) \right] \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} . \quad (358)
\end{aligned}$$

Dan gaat de Hamiltoniaan over in de inzichtelijke vorm

$$\boxed{\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \left(P_{\vec{k}, \lambda}^2(t) + \omega_k^2 Q_{\vec{k}, \lambda}^2(t) \right) = \mathcal{H}(\{Q_{\vec{k}, \lambda}\}, \{P_{\vec{k}, \lambda}\})} . \quad (359)$$

De grootheden $Q_{\vec{k}, \lambda}$ en $P_{\vec{k}, \lambda}$ zijn nu kanoniek geconjugeerde variabelen, aangezien ze voldoen aan de Hamilton-vergelijkingen

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P_{\vec{k}, \lambda}} = P_{\vec{k}, \lambda} \stackrel{(358)}{=} \dot{Q}_{\vec{k}, \lambda} \quad \text{en} \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q_{\vec{k}, \lambda}} = \omega_k^2 Q_{\vec{k}, \lambda} \stackrel{(352)}{=} -\ddot{Q}_{\vec{k}, \lambda} \stackrel{(358)}{=} -\dot{P}_{\vec{k}, \lambda} .$$

Een elektromagnetische golf in het vacuüm is het resultaat van harmonische oscillaties van het elektromagnetisch veld. De Hamiltoniaan bestaat uit een aftelbaar oneindig aantal onafhankelijke lineaire harmonische oscillatoren, die gekarakteriseerd worden door de propagatierichting \vec{e}_k van de golf, de polarisatievector $\vec{e}_\lambda(\vec{e}_k)$ en de frequentie $\omega_k = ck$.

4.2 Kwantisatie en fotonen

Omdat de Hamiltoniaan simpelweg uit een collectie lineaire harmonische oscillatoren bestaat, kan er nu overeenkomstig § 1.6.1 en § 1.5 worden gekwantiseerd. De Hamiltoniaan gaat daarbij over in een Hamilton-operator in termen van de gegeneraliseerde plaatsoperatoren $\hat{Q}_{\vec{k},\lambda}(t)$ in het Heisenbergbeeld en bijbehorende kanoniek geconjugeerde impulsoperatoren $\hat{P}_{\vec{k},\lambda}(t)$. Deze operatoren voldoen aan de fundamentele commutatierelaties

$$[\hat{Q}_{\vec{k},\lambda}(t), \hat{P}_{\vec{k}',\lambda'}(t)] = i\hbar \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \hat{1} \quad , \quad [\hat{Q}_{\vec{k},\lambda}(t), \hat{Q}_{\vec{k}',\lambda'}(t)] = [\hat{P}_{\vec{k},\lambda}(t), \hat{P}_{\vec{k}',\lambda'}(t)] = 0 \quad . \quad (360)$$

Definieer vervolgens creatie-, annihilatie- en teloperatoren in het Heisenbergbeeld volgens

$$\begin{aligned} \text{creatie-operatoren} & : \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger(t) \equiv \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar}} \hat{Q}_{\vec{k},\lambda}(t) - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_k}} \hat{P}_{\vec{k},\lambda}(t) \equiv \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \exp(i\omega_k t) \quad , \\ \text{annihilatie-operatoren} & : \hat{a}_{\vec{k},\lambda}(t) \equiv \hat{a}_{\vec{k},\lambda} \exp(-i\omega_k t) \quad , \\ \text{teloperatoren} & : \hat{n}_{\vec{k},\lambda}(t) \equiv \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger(t) \hat{a}_{\vec{k},\lambda}(t) = \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda} \equiv \hat{n}_{\vec{k},\lambda} \quad . \end{aligned} \quad (361)$$

Deze creatie- en annihilatie-operatoren voldoen aan de bosonische commutatierelaties

$$\boxed{[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}(t), \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}^\dagger(t)] = \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \hat{1} \quad , \quad [\hat{a}_{\vec{k},\lambda}(t), \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}(t)] = [\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger(t), \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}^\dagger(t)] = 0} \quad . \quad (362)$$

In overeenstemming met de Hamilton-operator (76) voor een enkele lineaire harmonische oscillator wordt de Hamilton-operator voor het gekwantiseerde elektromagnetische veld dan

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar\omega_k (\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda} + \hat{a}_{\vec{k},\lambda} \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar\omega_k (\hat{n}_{\vec{k},\lambda} + \frac{1}{2} \hat{1})} \quad . \quad (363)$$

Deze en andere observabelen behorende bij collectieve grootheden van het elektromagnetisch veld kunnen op alternatieve wijze worden verkregen door de velden in de klassieke grootheden te vervangen door de overeenkomstige veldoperatoren in het Heisenbergbeeld. De reële vectorpotentiaal uit vergelijking (350) gaat daarbij over in de overeenkomstige hermitische elektromagnetische veldoperator

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{A}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V\epsilon_0}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t) + \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \exp(i\omega_k t - i\vec{k} \cdot \vec{r}) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \vec{u}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) \left[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}(t) + \eta_\lambda \hat{a}_{-\vec{k},\lambda}^\dagger(t) \right] \end{aligned}} \quad (364)$$

in het Heisenbergbeeld. Deze veldoperator voldoet aan dezelfde vrije elektromagnetische

golfvergelijking als de klassieke vectorpotentiaal. De gekwantiseerde versies van de elektrische en magnetische velden volgen uit de gebruikelijke relaties

$$\hat{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(\vec{r}, t) \quad \text{en} \quad \hat{\mathcal{B}}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \hat{A}(\vec{r}, t). \quad (365)$$

Met behulp van appendix E alsmede de commutatierelaties (362) kan nu het volgende worden afgeleid (zie het werkcollege voor een voorbeeld).

- De totale Hamilton-operator voor het gekwantiseerde elektromagnetische veld wordt

$$\hat{H} \equiv \frac{\epsilon_0}{2} \int_V d\vec{r} \left[\hat{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \cdot \hat{\mathcal{E}}^\dagger(\vec{r}, t) + c^2 \hat{\mathcal{B}}(\vec{r}, t) \cdot \hat{\mathcal{B}}^\dagger(\vec{r}, t) \right] = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar \omega_k \left(\hat{n}_{\vec{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \hat{1} \right). \quad (366)$$

- De totale impulsoperator voor het gekwantiseerde elektromagnetische veld volgt uit de Poynting-vector:

$$\hat{\vec{P}} \equiv \epsilon_0 \int_V d\vec{r} \left[\hat{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \times \hat{\mathcal{B}}^\dagger(\vec{r}, t) \right] = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar \vec{k} \hat{n}_{\vec{k}, \lambda}. \quad (367)$$

- De totale spinoperator voor het gekwantiseerde elektromagnetische veld wordt

$$\hat{\vec{S}} \equiv \epsilon_0 \int_V d\vec{r} \left[\hat{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \times \hat{A}^\dagger(\vec{r}, t) \right] = \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{e}_k \left(\hat{n}_{\vec{k}, R} - \hat{n}_{\vec{k}, L} \right), \quad (368)$$

waarbij de teloperatoren $\hat{n}_{\vec{k}, R} = \hat{a}_{\vec{k}, R}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, R}$ en $\hat{n}_{\vec{k}, L} = \hat{a}_{\vec{k}, L}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, L}$ gedefinieerd zijn door middel van de relaties

$$\hat{a}_{\vec{k}, R} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_{\vec{k}, 1} - i \hat{a}_{\vec{k}, 2}) \quad \text{en} \quad \hat{a}_{\vec{k}, L} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_{\vec{k}, 1} + i \hat{a}_{\vec{k}, 2}). \quad (369)$$

4.2.1 Deeltjesinterpretatie bij het gekwantiseerde elektromagnetische veld

Uit de voorgaande observabelen behorende bij collectieve grootheden van het elektromagnetisch veld kunnen we nu rechtstreeks de deeltjesinterpretatie van de gekwantiseerde vrije elektromagnetische theorie aflezen. In verband met de bosonische commutatierelaties kan een elektromagnetisch veld worden beschouwd als zijnde opgebouwd uit bosonische kwanta, fotonen genaamd. De operator $\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger$ creëert zo'n foton met impuls $\hbar \vec{k}$, energie $\hbar \omega_k = \hbar c k$ en polarisatie λ , terwijl $\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}$ eenzelfde foton annihileert. De teloperator $\hat{n}_{\vec{k}, \lambda}$ telt deze fotonen. Aan de hand van de additieve spinoperator (368) kan worden geconcludeerd dat fotonen spin-1 deeltjes zijn, zoals al werd voorspeld op basis van het relativiteitsprincipe in opgave 29 van het werkcollege. Het is echter wel zo dat de heliciteit van het foton, d.w.z. de

spincomponent langs de propagatierichting \vec{e}_k , slechts de waarden $+\hbar$ (rechtsdraaiend) en $-\hbar$ (linksdraaiend) kan aannemen. De afwezigheid van de heliceiteseigenwaarde 0 is een direct gevolg van het feit dat één van de drie vrijheidsgraden van het vectorveld weggeijkt kan worden en derhalve onfysisch is. Deze uitspraak heeft alleen een betekenis onafhankelijk van het referentiestelsel als de fotonen massaloos zijn, hetgeen inderdaad volgt uit het relativistische verband tussen massa, energie en impuls:

$$m^2 c^4 = E^2 - \vec{p}^2 c^2 = \hbar^2 \omega_k^2 - \hbar^2 k^2 c^2 \stackrel{(349)}{=} 0 .$$

Als de fotonen namelijk een eindige massa zouden hebben gehad, dan zou er een rustsysteem hebben bestaan ten opzichte waarvan de fotonen stilstaan. In dat geval zou er geen propagatierichting en dus ook geen heliceit te definiëren zijn geweest. Massaloze deeltjes bewegen met de lichtsnelheid in elk inertiaalstelsel, zodat er geen rustsysteem te vinden is.

4.2.2 Fotontoestanden en toestandsdichtheid voor fotonen

Op grond van § 1.2.1 zijn de multi-fotontoestanden te beschrijven in termen van de bosonische eigentoestanden van de teloperatoren:

$$\boxed{\begin{aligned} |n_1, n_2, \dots\rangle &= \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots |0\rangle \equiv \prod_j \frac{(\hat{a}_j^\dagger)^{n_j}}{\sqrt{n_j!}} |0\rangle , \\ \text{met } |0\rangle &= \text{het genormeerde fotonvacuüm} \end{aligned}} . \quad (370)$$

Net zoals in hoofdstuk 1 werd gedaan nummert de label $j = 1, 2, \dots$ hier de volledige set kwantumgetallen \vec{k} en λ . De multi-fotontoestanden hebben de volgende bosonische eigenschappen [zie verg. (30)]:

$$\begin{aligned} \hat{n}_j |\dots, n_j, \dots\rangle &= n_j |\dots, n_j, \dots\rangle , \\ \hat{a}_j |\dots, n_j, \dots\rangle &= \sqrt{n_j} |\dots, n_j - 1, \dots\rangle , \\ \hat{a}_j^\dagger |\dots, n_j, \dots\rangle &= \sqrt{n_j + 1} |\dots, n_j + 1, \dots\rangle . \end{aligned} \quad (371)$$

De toestandsfunctie van het stralingsveld kan dan worden geschreven in termen van deze basis, waarbij de grootte van een bepaald bezettingsgetal de sterkte van de desbetreffende monochromatische component van dat stralingsveld weergeeft.

Voor later gebruik leiden we nu ook de toestandsdichtheid af voor fotonen met golfvector \vec{k} en polarisatie λ . In volledige analogie met de stappen in § 2.5.2 bepalen we het aantal 1-foton-toestanden met energie in het interval $[E, E + dE]$, polarisatie λ , en \vec{e}_k in de

ruimtehoek $d\Omega$ rond de vaste (θ, ϕ) -richting \vec{e}_Ω :

$$\begin{aligned} \rho_\lambda(E, \Omega) d\Omega dE &= \frac{V}{8\pi^3} (k^2 dk d\Omega) \stackrel{k=E/(\hbar c)}{=} \frac{VE^2}{(2\pi\hbar c)^3} d\Omega dE \\ \Rightarrow \boxed{\rho_\lambda(E, \Omega) = \frac{VE^2}{(2\pi\hbar c)^3} \quad (\lambda = 1, 2)} . \end{aligned} \quad (372)$$

4.2.3 Nulpuntsenergie en het Casimir-effect

Voor de totale Hamilton-operator in vergelijking (366) geldt

$$\hat{H} |n_1, n_2, \dots\rangle \stackrel{(366)}{=} \left(\sum_j \hbar\omega_j n_j + E_0 \right) |n_1, n_2, \dots\rangle , \quad (373)$$

waarbij $\hbar\omega_j$ de energie is van de door j gelabelde fotonmode. Net als in het geval van de lineaire harmonische oscillator is er ook hier sprake van een nulpuntsenergie E_0 :

$$\hat{H} |0\rangle = E_0 |0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar\omega_k |0\rangle = \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_k |0\rangle , \quad (374)$$

hetgeen afkomstig is van de operatorcombinaties $\frac{1}{2}(\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda} + \hat{a}_{\vec{k},\lambda} \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger)$. De nulpuntsenergie van het fotonvacuüm representeert een absolute oneindige energieschaal ten opzichte waarvan de fotontoestanden veelvoudigen van de fotonenergieën $\{\hbar\omega_j, j = 1, 2, \dots\}$ hoger liggen. Er zijn nu twee situaties mogelijk.

- E_0 hangt niet af van externe parameters zoals de afmetingen van de doos. Denk hierbij aan een elektromagnetisch veld zonder enige restricties. Kwantummechanisch gezien zijn alleen overgangen tussen energieniveaus en energieveranderingen meetbaar. In de beschouwde situatie zijn derhalve uitsluitend de energieverschillen tussen de afzonderlijke multi-foton energie-eigentoestanden van belang en kan de nulpuntsenergie simpelweg worden gesubtraheerd door te definiëren dat $\hat{H} |0\rangle \equiv 0 |0\rangle$. Dit kan worden bewerkstelligd middels normaalordering van de operator \hat{H} (zie § 1.2.2):

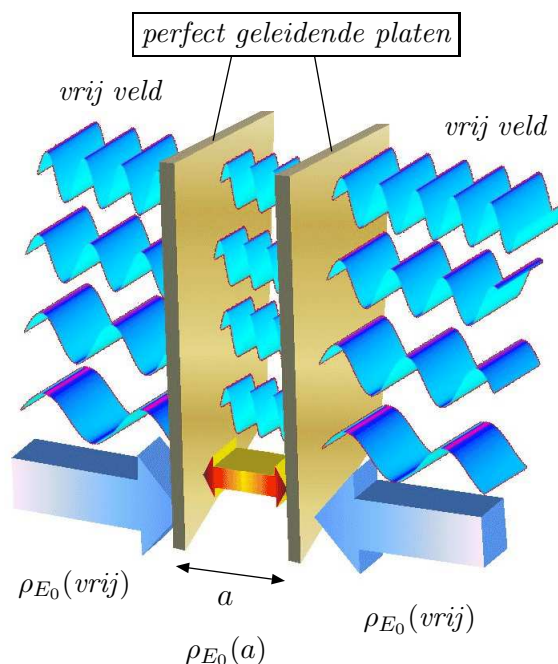
$$\begin{aligned} \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda} &\rightarrow N(\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda}) \equiv \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda} , \\ \hat{a}_{\vec{k},\lambda} \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger &\rightarrow N(\hat{a}_{\vec{k},\lambda} \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger) \equiv \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k},\lambda} , \end{aligned}$$

zodat \hat{H} in een additieve vorm wordt gegoten:

$$N(\hat{H}) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \hbar\omega_k \hat{n}_{\vec{k},\lambda} .$$

- E_0 hangt wel af van externe parameters zoals de ribbe L van de kubusvormige doos. Variatie van deze parameters kan leiden tot fysisch meetbare energieverschuivingen en dus tot krachten (zie onderstaand voorbeeld). In zulke gevallen mag je hooguit een universele (parameteronafhankelijke) energie subtraheren, zoals de nulpuntsenergie voor een elektromagnetisch veld zonder enige restricties.

Casimir-effect (Hendrik Casimir, 1948): beschouw twee parallelle, perfect geleidende platen. Deze platen bevinden zich op een dusdanig kleine afstand a van elkaar dat de platen als effectief oneindig groot zijn op te vatten. Omdat de nulpuntsenergie-dichtheid tussen de platen verschilt van die buiten de platen ontstaat er een aantrekkende kracht tussen de twee platen (zie werkcollege). Dit wordt het Casimir-effect genoemd. Experimenteel bleek het echter zeer moeilijk om de twee platen met uniforme micrometerprecisie ten opzichte van elkaar te configureren. Het Casimir-effect werd uiteindelijk 50 jaar na de voorspelling experimenteel geverifieerd door de platen te vervangen door een bol-en-plaat configuratie: S.K. Lamoreaux deed dat in 1997 in het millimeter a -bereik en U. Mohideen & A. Roy in 1998 in het micrometer a -bereik. Het Casimir-effect is in feite één van die zeldzame puur kwantummechanische fenomenen die zich ook voorbij het moleculaire bereik manifesteren.



Trouwens: misschien zit in het hele concept van nulpuntsenergie wel meer fysica verborgen dan we nu vermoeden. Fysisch gezien zijn namelijk niet alleen energiever verschillen van belang, maar ook de absolute waarde van de energie. Denk daarbij bijvoorbeeld aan de kosmologische implicaties van zo'n nulpuntsenergie in verband met de relatie tussen energie en massa. Het zou best kunnen dat voor de constructie van een consistente fundamentele theorie het nodig is dat de oneindigheden ten gevolge van de nulpuntsenergieën van de verschillende fundamentele deeltjes precies tegen elkaar wegvallen.

4.2.4 Continuümlimiet

Ter volledigheid zetten we hier op een rijtje wat er precies verandert als de afmeting van de afgesloten ruimte oneindig groot wordt genomen (continuümlimiet). Voor onze kubus houdt deze continuümlimiet in dat $L \rightarrow \infty$ wordt genomen (zie App. A.2). De \vec{k} -sommatie loopt over alle waarden van de gehele getallen $\nu_{x,y,z} = (L/2\pi)k_{x,y,z}$, zodat voor $L \rightarrow \infty$ het \vec{k} -spectrum oneindig dicht komt te liggen en de som overgaat in een integraal:

$$\sum_{\vec{k}} \xrightarrow{\text{feitelijk}} \sum_{\vec{\nu}} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}. \quad (375)$$

Voor $L \rightarrow \infty$ dienen verder de commutatierelaties voor creatie- en annihilatie-operatoren te voldoen aan de uitdrukkingen voor een continue representatie:

$$[\hat{a}_\lambda(\vec{k}), \hat{a}_{\lambda'}^\dagger(\vec{k}')] = \delta_{\lambda,\lambda'} \delta(\vec{k} - \vec{k}') \hat{1} \quad \Rightarrow \quad \hat{a}_{\vec{k},\lambda} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{V}} \hat{a}_\lambda(\vec{k}). \quad (376)$$

De veldoperator $\hat{A}(\vec{r}, t)$ uit vergelijking (364) gaat dan over in

$$\hat{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\lambda=1}^2 \int d\vec{k} \sqrt{\frac{\hbar}{16\pi^3 \epsilon_0 \omega_k}} \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \left[\hat{a}_\lambda(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t) + \hat{a}_\lambda^\dagger(\vec{k}) \exp(i\omega_k t - i\vec{k} \cdot \vec{r}) \right]. \quad (377)$$

4.3 Een nieuwe kijk op deeltjes–golf dualiteit

De veldoperator $\hat{A}(\vec{r}, t)$ bevat de golfaspecten die horen bij de fotontoestanden, zodat er sprake is van deeltjes–golf dualiteit, want elke creatie- en annihilatie-operator correspondeert met een specifieke term in de vlakke-golf expansie van de vectorpotentiaal $\vec{A}(\vec{r}, t)$.

Laten we eens kijken naar het wezenlijke verschil met de aanpak uit het vorige hoofdstuk.

- De termen met positieve frequentie: bij een poging om een 1-deeltjes QM op te zetten zouden we in plaats van met de operator $\hat{a}_{\vec{k},\lambda} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t)$ te maken hebben gehad met een vlakke golf $\propto \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t)$ als overeenkomstige stationaire oplossing van de relativistische golfvergelijking. Door de operatoren $\hat{E} = i\hbar \partial/\partial t$ en $\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$ hierop te laten werken zouden we tot de conclusie zijn gekomen dat er sprake was van een toestand met energie $\hbar\omega_k$ en impuls $\hbar\vec{k}$. Aan de gekwantiseerde elektromagnetische theorie moet echter een veeldeeltjesinterpretatie worden toegekend, waarbij de annihilatie-operator $\hat{a}_{\vec{k},\lambda} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t)$ werkt op multi-fotontoestanden. Losgelaten op een multi-fotontoestand met $n_{\vec{k},\lambda}$ fotonen in de 1-fotontoestand met kwantumgetallen \vec{k} en λ geeft deze operator aanleiding tot eenzelfde type vlakke golf:

$$\hat{a}_{\vec{k},\lambda} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t) \quad \rightarrow \quad \sqrt{n_{\vec{k},\lambda}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t),$$

waarbij de grootte van de proportionaliteitsfactor afhangt van het bezettingsgetal van de aangegeven 1-fotontoestand. Deeltjes–golf dualiteit houdt in deze context dus in dat de annihilatie van een foton met positieve energie $\hbar\omega_k$ en impuls $\hbar\vec{k}$ altijd gepaard zal gaan met een vlakke-golf factor $\propto \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t)$.

- De termen met negatieve frequentie: het belangrijkste verschil tussen 1-deeltjes- en veeldeeltjestheorie treedt op voor de operator $\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \exp(i\omega_k t - i\vec{k} \cdot \vec{r})$. Dit zou in de 1-deeltjestheorie zijn overeengekomen met een vlakke golf $\propto \exp(i\omega_k t - i\vec{k} \cdot \vec{r})$,

hetgeen we in het vorige hoofdstuk geïnterpreteerd zouden hebben als een toestand met negatieve energie $-\hbar\omega_k$ en impuls $-\hbar\vec{k}$. In de veeldeeltjestheorie worden deze kwantumgetallen echter effectief van teken omgedraaid, omdat er nu sprake is van fotoncreatie in plaats van fotonannihilatie. De operator $\hat{a}_{k,\lambda}^\dagger \exp(i\omega_k t - i\vec{k} \cdot \vec{r})$ correspondeert met de creatie van een foton met positieve energie $\hbar\omega_k$ en impuls $\hbar\vec{k}$, hetgeen altijd gepaard zal gaan met een vlakke-golf factor $\propto \exp(i\omega_k t - i\vec{k} \cdot \vec{r})$.

Tweede kwantisatie: het voorgaand voorschrift om het elektromagnetisch veld te kwantiseren is een expliciet voorbeeld van tweede kwantisatie, zoals beschreven in § 1.5 voor het Schrödinger-veld. Uitgaande van de klassieke golfvergelijking is hier inderdaad rechtstreeks overgegaan naar een overeenkomstige veeldeeltjestheorie in het Heisenbergbeeld. De klassieke vectorpotentiaal $\vec{A}(\vec{r}, t)$ was een klassieke functie met drie componenten, gedefinieerd in ieder ruimte-tijd punt. De gekwantiseerde vectorpotentiaal $\hat{A}(\vec{r}, t)$ is een veldoperator werkende op toestandsfuncties in de Fock-ruimte voor fotonen. In deze veldoperator zijn \vec{r} en t geen kwantummechanische variabelen, maar simpelweg parameters die de vlakke golven parametriseren. In deze beschrijvingswijze worden \vec{r} en t op gelijke voet behandeld, in tegenstelling tot de niet-relativistische QM waar t een parameter is en \vec{r} als eigenwaarde gekoppeld is aan de observabele \hat{r} . Dit aspect is nou net wat nodig is in de relativistische QM (zie Hst. 5).

4.4 Interacties met niet-relativistische QM systemen

In de klassieke elektrodynamica wordt de invloed van een klassiek elektromagnetisch veld op een klassiek deeltje met massa m en lading q weergegeven via minimale substitutie. In de Coulomb-ijk wordt daarbij de impuls \vec{p} van het klassieke deeltje vervangen door $\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t)$, waarbij \vec{r} de coördinaat is van het deeltje. Na deze substitutie representeert \vec{p} de kanonieke impuls van het deeltje in aanwezigheid van het elektromagnetisch veld.

In de QM wordt de Hamilton-operator van het volledige systeem gegeven door

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{e.m.}} + \hat{V}(t), \quad \text{met} \quad \hat{V}(t) = \hat{V}_{\text{int}}(t) + \hat{V}_{\text{spin}}(t), \quad (378)$$

waarbij $\hat{H}_{\text{e.m.}}$ de Hamilton-operator (366) is van het vrije elektromagnetische veld in een afgesloten volume V met periodieke randvoorwaarden. De term \hat{H}_0 is de Hamilton-operator van het ongestoorde niet-relativistische deeltje, hetgeen een vrij deeltje kan zijn of een deeltje gebonden in een potentiaal. De interacties tussen het deeltje en het elektromagnetisch veld worden gegeven door

$$\hat{V}_{\text{int}}(t) = -\frac{q}{m} \hat{A}(\hat{r}, t) \cdot \hat{p} + \frac{q^2}{2m} \hat{A}^2(\hat{r}, t), \quad (379)$$

$$\hat{V}_{\text{spin}}(t) = -\hat{\mathcal{M}}_S \cdot \hat{\mathcal{B}}(\hat{r}, t), \quad \hat{\mathcal{M}}_S = -\frac{|e|\hbar}{2m} g \frac{\hat{S}}{\hbar}. \quad (380)$$

De eerste interactie wordt verkregen door minimale substitutie toe te passen op $\hat{p}^2/(2m)$ en vervolgens de Coulomb-conditie $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0$ te gebruiken. De tweede interactie is de extra interactie tussen het magneteveld en het door de spin geïnduceerde intrinsiek magnetisch dipoolmoment van het deeltje, die we in hoofdstuk 3 zijn tegengekomen.

Deze beschrijving is één stap meer kwantummechanisch dan de aanpak in hoofdstuk 7 van het college Kwantummechanica 2, waar het elektromagnetisch veld als klassiek werd beschouwd in verband met de hoge foton dichtheid. Nu werkt de interactie $\hat{V}(t)$ namelijk zowel op de toestanden van het geladen deeltje, via \hat{r} en \hat{p} , als op de multi-foton toestanden, via $\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}$ en $\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger$. De veldoperator $\hat{A}(\vec{r}, t)$ legt hierbij het contact tussen het geladen deeltje enerzijds, waarbij \vec{r} het aangrijpingspunt van de interactie is, en het stralingsveld anderzijds, waarbij de interactie gepaard gaat met creatie (emissie) en annihilatie (absorptie) van fotonen. Anders geformuleerd, de veldoperator $\hat{A}(\vec{r}, t)$ is de universele drager van de elektromagnetische interacties. Sterkere stralingsvelden resulteren in sterkere emissie- dan wel absorptie-effecten omdat de annihilatie- en creatiefactoren $\sqrt{n_j}$ en $\sqrt{n_j+1}$ in vergelijking (371) in dat geval groter zijn. Het verschil tussen deze twee factoren gaat een belangrijke rol spelen bij het kwantummechanische fenomeen van spontane fotonemissie.

$\hat{V}_{\text{int}}(t)$ in eerste-orde storingstheorie: absorptie en emissie van één foton.

Om de implicaties van de kwantisatie van het elektromagnetisch veld te bestuderen beschouwen we elektromagnetische processen waarbij precies één foton met kwantumgetallen \vec{k}, λ wordt geabsorbeerd of geëmitteerd. Ter vereenvoudiging van het probleem nemen we voor het gemak aan dat de interactie $\hat{V}_{\text{int}}(t)$ als een zwakke storing te beschouwen is en dat de magnetische interactie $\hat{V}_{\text{spin}}(t)$ ten opzichte van $\hat{V}_{\text{int}}(t)$ te verwaarlozen is (zoals in de dipoolbenadering in § 4.4.2). Dientengevolge kan de spin van het deeltje effectief buiten beschouwing worden gelaten. Vanwege de periodieke tijdsafhankelijkheid van het elektromagnetisch veld kan er nu dus storingstheorie voor periodieke storingen worden toegepast (zie § 5.2 van het college Kwantummechanica 2). Voor 1-fotonprocessen komt dan in eerste-orde storingstheorie alleen de lineaire term in \hat{A} in aanmerking, zodat effectief

$$\hat{V}(t) \rightarrow \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \left[\hat{C}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \exp(-i\omega_k t) + \hat{C}_{\vec{k}, \lambda} \exp(i\omega_k t) \right],$$

$$\text{met } \hat{C}_{\vec{k}, \lambda} \stackrel{(364), (379)}{=} -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_k}} \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \exp(-i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}}) \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \cdot \hat{\vec{p}}. \quad (381)$$

Immers, in eerste-orde storingstheorie verandert het aantal fotonen met ± 1 onder invloed van de lineaire term in \hat{A} en met $0, \pm 2$ onder invloed van de kwadratische term.¹² Stel

¹²De kwadratische term draagt in eerste-orde storingstheorie bij tot 2-fotonprocessen en fotonverstrooiing aan atomen. Let wel: de tweede-orde storingscorrecties ten gevolge van de lineaire term dragen ook bij tot deze processen.

nu dat het systeem vóór de interactie in de volgende ongestoorde begintoestand zit:

$$|\phi_i^{(0)}\rangle = |\psi_A\rangle |\cdots, n_{\vec{k},\lambda}, \cdots\rangle, \quad (382)$$

$|\psi_A\rangle =$ ongestoorde begintoestand van het geladen deeltje bij energie E_A ,

$|\cdots, n_{\vec{k},\lambda}, \cdots\rangle =$ fotontoestand met $n_{\vec{k},\lambda}$ fotonen van het type (\vec{k}, λ) .

Vervolgens gaan we na een voldoende lange tijd de waarschijnlijkheid bepalen voor overgangen naar de eindtoestand

$$|\phi_f^{(0)}\rangle = |\psi_B\rangle |\cdots, n_{\vec{k},\lambda} \pm 1, \cdots\rangle, \quad (383)$$

$|\psi_B\rangle =$ ongestoorde eindtoestand van het geladen deeltje bij energie E_B ,

$|\cdots, n_{\vec{k},\lambda} \pm 1, \cdots\rangle =$ dezelfde fotontoestand met één (\vec{k}, λ) -foton meer of minder.

De relevante matrixelementen die deze overgangswaarschijnlijkheid gaan vastleggen zijn

$$\begin{aligned} \boxed{\text{Absorptie}} & : (C_{\vec{k},\lambda}^\dagger)_{fi} \stackrel{(381)}{=} -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_k}} \langle \phi_f^{(0)} | \hat{a}_{\vec{k},\lambda} \exp(i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}}) \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \cdot \hat{\vec{p}} | \phi_i^{(0)} \rangle \\ & \stackrel{(371)}{=} -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar n_{\vec{k},\lambda}}{2V\epsilon_0\omega_k}} \langle \psi_B | \exp(i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}}) \hat{\vec{p}} | \psi_A \rangle \cdot \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \end{aligned} \quad (384)$$

als de foton-eindtoestand wordt gegeven door $|\cdots, n_{\vec{k},\lambda} - 1, \cdots\rangle$, en

$$\begin{aligned} \boxed{\text{Emissie}} & : (C_{\vec{k},\lambda})_{fi} \stackrel{(381)}{=} -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_k}} \langle \phi_f^{(0)} | \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger \exp(-i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}}) \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \cdot \hat{\vec{p}} | \phi_i^{(0)} \rangle \\ & \stackrel{(371)}{=} -\frac{q}{m} \sqrt{\frac{\hbar(n_{\vec{k},\lambda} + 1)}{2V\epsilon_0\omega_k}} \langle \psi_B | \exp(-i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}}) \hat{\vec{p}} | \psi_A \rangle \cdot \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \end{aligned} \quad (385)$$

als de foton-eindtoestand wordt gegeven door $|\cdots, n_{\vec{k},\lambda} + 1, \cdots\rangle$. Met behulp van Fermi's Gouden Regel voor lang aangeschakelde periodieke storingen (zie §5.2 van het college Kwantummechanica 2) geeft dit aanleiding tot de volgende overgangswaarschijnlijkheid per tijdseenheid per fotontoestand:

$$w_{\vec{k},\lambda}^{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar} |(C_{\vec{k},\lambda}^\dagger)_{fi}|^2 \delta(E_B - E_A - \hbar\omega_k) \quad , \quad w_{\vec{k},\lambda}^{\text{em}} = \frac{2\pi}{\hbar} |(C_{\vec{k},\lambda})_{fi}|^2 \delta(E_B - E_A + \hbar\omega_k). \quad (386)$$

Afhankelijk van de grootte van $n_{\vec{k},\lambda}$ treden een aantal verschillende situaties op:

- Als $n_{\vec{k},\lambda}$ zodanig groot is dat $\sqrt{n_{\vec{k},\lambda} + 1} \approx \sqrt{n_{\vec{k},\lambda}}$, dan is er sprake van een semi-klassieke situatie. In dat geval heeft de absorptie/emissie van één foton geen merkbare

invloed op het stralingsveld en kan dat stralingsveld effectief als klassiek worden beschouwd met klassieke veldsterkte $|A_0(\omega_k)| \equiv \sqrt{2\hbar n_{\vec{k},\lambda}/(V\epsilon_0\omega_k)}$. Dit is de situatie die in hoofdstuk 7 van het college Kwantummechanica 2 werd behandeld.

- Bij afnemende waarde van $n_{\vec{k},\lambda}$ wordt de situatie steeds meer kwantummechanisch. Absorptie wordt nog steeds goed benaderd door de semi-klassieke aanpak omdat $|A_0(\omega_k)|^2 \propto n_{\vec{k},\lambda}$, maar de absorptie van het foton heeft nu weldegelijk invloed op de sterkte van het resterende stralingsveld. Emissie wordt niet goed semi-klassiek voorspeld, aangezien $n_{\vec{k},\lambda}+1$ merkbaar van $n_{\vec{k},\lambda}$ gaat verschillen.
- De meest extreme verschillen met de semi-klassieke aanpak treden op in afwezigheid van een stralingsveld, d.w.z. $n_{\vec{k},\lambda} = 0$. In die situatie wordt er klassiek geen overgang voorspeld, terwijl de QM weldegelijk de mogelijkheid tot emissie van een foton vanuit een aangeslagen toestand voorspelt! Dit pure kwantummechanische fenomeen heet spontane emissie.

We zien dat er in de kwantummechanische aanpak twee emissievormen tegelijkertijd worden beschreven: spontane emissie als de juiste frequentiecomponent afwezig is in het stralingsveld ($n_{\vec{k},\lambda} = 0$), dan wel gestimuleerde emissie als er een stralingsveld wordt aangeboden met de juiste frequentiecomponent ($n_{\vec{k},\lambda} > 0$). In het laatste geval volgt uit vergelijking (385) dat de overgangswaarschijnlijkheid groter wordt naarmate $n_{\vec{k},\lambda}$ groter wordt, vandaar de naam gestimuleerde emissie.

4.4.1 Klassieke limiet

Beschouw een monochromatisch stralingsveld $|n_{\vec{k},\lambda}\rangle$. De klassieke elektromagnetische beschrijving is dan van toepassing als de kwantisatie-effecten ten gevolge van de commutatierelaties (362) kunnen worden verwaarloosd. Dit treedt op wanneer het toevoegen en verwijderen van een foton geen invloed heeft op de veldsterkte, d.w.z. wanneer $n_{\vec{k},\lambda}$ groot genoeg is. Preciezer geformuleerd: het aantal (\vec{k}, λ) -fotonen per karakteristiek volume $\hbar^3/|\vec{p}_\gamma|^3 = 1/k^3$ moet zeer groot zijn. De werking van de creatie- en annihilatie-operatoren $\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger$ en $\hat{a}_{\vec{k},\lambda}$ wordt voor zo'n sterk stralingsveld effectief gegeven door de getalswaarden $e^{-i\delta_k} \sqrt{n_{\vec{k},\lambda}}$ respectievelijk $e^{i\delta_k} \sqrt{n_{\vec{k},\lambda}}$ (zie § 1.6.4), zodat

$$\begin{aligned} \hat{A}(\vec{r}, t)|n_{\vec{k},\lambda}\rangle &\approx \sqrt{\frac{\hbar n_{\vec{k},\lambda}}{2V\epsilon_0\omega_k}} \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \left[e^{i\delta_k} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_k t) + e^{-i\delta_k} \exp(i\omega_k t - i\vec{k} \cdot \vec{r}) \right] |n_{\vec{k},\lambda}\rangle \\ &\approx |A_0(\omega_k)| \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t + \delta_k) |n_{\vec{k},\lambda}\rangle \quad , \quad |A_0(\omega_k)| \equiv \sqrt{\frac{2\hbar n_{\vec{k},\lambda}}{V\epsilon_0\omega_k}} . \end{aligned}$$

De werking van het stralingsveld $|n_{\vec{k},\lambda}\rangle$ op een ladingsdrager is in dat geval equivalent met de klassieke werking van een monochromatische vlakke golf.

We zien hier dus een duidelijk verschil tussen de klassieke theorieën voor straling en deeltjes (zoals elektronen).

- De klassieke limiet van de Schrödinger-golfmechanica voor een elektron beschrijft het gedrag van dat deeltje onder invloed van de Newtonse mechanica, terwijl een klassiek gas van zulke deeltjes wordt verkregen bij lage dichtheden.
- De klassieke limiet van de kwantummechanische theorie van straling beschrijft het gedrag van zeer veel fotonen met een hoge dichtheid aan de hand van een klassieke elektromagnetische golf die voldoet aan de Maxwell-vergelijkingen.

Dit verklaart waarom eerst het golfaspect van licht en het deeltjesaspect van elektronen waargenomen werden, zodat beide fenomenen fundamenteel verschillend leken te zijn.

4.4.2 Spontane fotonemissie (geen tentamenstof)

Met behulp van de toestandsdichtheid voor fotonen uit § 4.2.2 wordt de overgangswaarschijnlijkheid per tijdseenheid om spontaan een foton met polarisatie λ te emitteren in een ruimtehoek $d\Omega$ rond \vec{e}_Ω gegeven door

$$\begin{aligned}
 W_{A \rightarrow B + \gamma_\lambda, d\Omega}^{\text{spont.em.}} &= \frac{2\pi}{\hbar} d\Omega \int d(\hbar\omega_k) \rho_\lambda(\hbar\omega_k, \Omega) |(C_{\vec{k}, \lambda})_{fi}|^2 \delta(E_B - E_A + \hbar\omega_k) \\
 &\stackrel{(385), (372)}{=} \frac{q^2 \omega_{AB}}{8\pi^2 \hbar c^3 m^2 \epsilon_0} \left| \langle \psi_B | \exp(-i\omega_{AB} \vec{e}_\Omega \cdot \hat{\vec{r}}/c) \hat{\vec{p}} | \psi_A \rangle \cdot \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_\Omega) \right|^2 d\Omega, \quad (387)
 \end{aligned}$$

met de gebruikelijke definitie $\omega_{AB} \equiv (E_A - E_B)/\hbar$

Toepassing 1: kan een vrij deeltje met massa $m \neq 0$ en welgedefinieerde impuls $\vec{p}_A \equiv \hbar\vec{k}_A$ spontaan een foton emitteren? Antwoord: nee!

Bewijs: de ongestoorde ruimtelijke golffunctie van het deeltje vóór de interactie is hier

$$\psi_A(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\vec{r} \cdot \vec{k}_A).$$

Als ongestoorde eindtoestand van het deeltje beschouwen we een willekeurige eigenfunctie van de impulsoperator bij de impulseigenwaarde $\vec{p}_B \equiv \hbar\vec{k}_B$:

$$\psi_B(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\vec{r} \cdot \vec{k}_B).$$

Het relevante matrixelement voor de overgang is nu

$$\langle \psi_B | \exp(-i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}}) \hat{\vec{p}} | \psi_A \rangle = \hbar\vec{k}_A (2\pi)^{-3} \int d\vec{r} \exp(i\vec{r} \cdot [\vec{k}_A - \vec{k}_B - \vec{k}]) = \hbar\vec{k}_A \delta(\vec{k}_A - \vec{k}_B - \vec{k}),$$

zodat op basis van vergelijking (387) aan twee condities tegelijkertijd moet zijn voldaan wil de overgang mogelijk zijn. Er moet namelijk behoud van zowel energie als impuls gelden:

$$E_B = \sqrt{\vec{p}_B^2 c^2 + m^2 c^4} = E_A - \hbar \omega_k = \sqrt{\vec{p}_A^2 c^2 + m^2 c^4} - \hbar c k \quad \text{en} \quad \vec{p}_B = \vec{p}_A - \hbar \vec{k} .$$

We kunnen nu beide condities in elkaar schuiven:

$$\begin{aligned} \vec{p}_B^2 + m^2 c^2 &\stackrel{\text{impuls}}{=} (\vec{p}_A - \hbar \vec{k})^2 + m^2 c^2 \stackrel{\text{energie}}{=} \vec{p}_A^2 + m^2 c^2 + \hbar^2 k^2 - 2\hbar k \sqrt{\vec{p}_A^2 + m^2 c^2} \\ \xrightarrow{k \neq 0} \sqrt{\vec{p}_A^2 + m^2 c^2} &= \vec{p}_A \cdot \frac{\vec{k}}{k} \leq |\vec{p}_A| , \end{aligned}$$

hetgeen niet mogelijk is voor $m \neq 0$. Dit energie–impuls behoudsargument geldt trouwens even zo goed voor fotonabsorptie en voor 1-fotonprocessen ten gevolge van $\hat{V}_{\text{spin}}(t)$.

Toepassing 2: spontane overgangen van een 1-elektronatoom in de dipoolbenadering.

Voor spontane emissie-overgangen van relatief lichte 1-elektron atomen (zoals waterstof) geldt dat de golflengte van het geëmitteerde foton veel groter is dan de afmeting van het atoom. Kijk bijvoorbeeld naar de overgang van een toestand met $n = 2$ naar een toestand met $n = 1$. Deze overgang gaat gepaard met een energieverval $\Delta E = 3m_e c^2 (Z\alpha)^2 / 8$. Dit komt overeen met een golflengte $\lambda_\gamma = 2\pi/k = 2\pi\hbar c / \Delta E \approx (1.2/Z^2) \times 10^{-7}$ m, hetgeen voor niet te grote waarden van Z veel groter is dan de $\langle r_{\text{atoom}} \rangle = \mathcal{O}(10^{-10}$ m) afmeting van de ladingsdistributie van het 1-elektron atoom. In de elektrische dipoolbenadering maken we hiervan gebruik door enerzijds de Fourier-mode $\exp(-i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}})$ te vervangen door $\hat{1}$, omdat $kr \ll 1$ over de afmeting van het atoom, en door anderzijds de magnetische interactie weg te laten. De motivatie voor deze laatste benadering volgt uit het feit dat de factor $\vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k) \cdot \hat{\vec{p}}$ in $\hat{V}_{\text{int}}(t)$ aanleiding geeft tot $\mathcal{O}(\hbar / \langle r_{\text{atoom}} \rangle)$ effecten, terwijl de factor $\hbar \vec{k} \times \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_k)$ in $\hat{V}_{\text{spin}}(t)$ aanleiding geeft tot veel zwakkere $\mathcal{O}(\hbar k)$ effecten.

Met behulp van de commutatierelatie

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e} + V(\hat{\vec{r}}) \quad \Rightarrow \quad [\hat{H}_0, \hat{\vec{r}}] = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial \hat{\vec{p}}} = -i\hbar \frac{\hat{\vec{p}}}{m_e}$$

wordt het relevante matrixelement voor spontane fotonemissie in de dipoolbenadering gegeven door

$$\langle \psi_B | \hat{\vec{p}} | \psi_A \rangle = \frac{im_e}{\hbar} \langle \psi_B | [\hat{H}_0, \hat{\vec{r}}] | \psi_A \rangle = -i\omega_{AB} m_e \langle \psi_B | \hat{\vec{r}} | \psi_A \rangle \equiv -i\omega_{AB} m_e \vec{r}_{BA} .$$

Uit vergelijking (387) volgt dan in de dipoolbenadering

$$W_{A \rightarrow B + \gamma_\lambda, d\Omega}^{\text{spont.em.}} \approx \frac{e^2 \omega_{AB}^3}{8\pi^2 \hbar c^3 \epsilon_0} |\vec{r}_{BA} \cdot \vec{\epsilon}_\lambda(\vec{e}_\Omega)|^2 d\Omega . \quad (388)$$

Vervolgens wordt er gesommeerd over de fotonpolarisaties met behulp van de volledighedsrelatie

$$\sum_{\lambda=1}^2 \epsilon_{\lambda,j}(\vec{e}_\Omega) \epsilon_{\lambda,l}^*(\vec{e}_\Omega) \frac{\vec{e}_\lambda(\vec{e}_\Omega) \in \mathbb{R}^3}{=} \sum_{\lambda=1}^2 \epsilon_{\lambda,j}(\vec{e}_\Omega) \epsilon_{\lambda,l}(\vec{e}_\Omega) \stackrel{(354)}{=} \delta_{jl} = e_{\Omega,j} e_{\Omega,l}$$

en wordt er geïntegreerd over alle richtingen \vec{e}_Ω , waarbij de z -as langs \vec{r}_{BA} wordt gelegd:

$$\begin{aligned} W_{A \rightarrow B + \gamma}^{\text{spont.em.}} &\approx \frac{e^2 \omega_{AB}^3}{8\pi^2 \hbar c^3 \epsilon_0} \int d\Omega (|\vec{r}_{BA}|^2 - |\vec{r}_{BA} \cdot \vec{e}_\Omega|^2) = \frac{e^2 \omega_{AB}^3 |\vec{r}_{BA}|^2}{8\pi^2 \hbar c^3 \epsilon_0} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos\theta \sin^2\theta \\ &= \frac{e^2 \omega_{AB}^3}{3\pi \hbar c^3 \epsilon_0} |\vec{r}_{BA}|^2 = \boxed{\frac{4}{3} \alpha_{\text{em}} \frac{\omega_{AB}^3}{c^2} |\vec{r}_{BA}|^2} \approx W_{A \rightarrow B + \gamma}^{\text{spont.em.}}. \end{aligned} \quad (389)$$

Hier is α_{em} de elektromagnetische fijnstructuurconstante die op de gebruikelijke manier is gedefinieerd volgens

$$\alpha_{\text{em}} \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx 1/137. \quad (390)$$

Hieruit volgt dan de gemiddelde levensduur τ_A en vervalbreedte Γ_A van de toestand A :

$$\boxed{\tau_A = \frac{1}{\Gamma_A} = \frac{1}{\sum_j W_{A \rightarrow B_j + \gamma}^{\text{spont.em.}}}}, \quad (391)$$

hetgeen gesommeerd is over alle toegestane eindtoestanden B_j voor een elektrische dipoolovergang. Op grond van § 7.3.2 van het college Kwantummechanica 2 weten we dat deze eindtoestanden moeten voldoen aan de zogenaamde dipoolselectieregels $|\Delta\ell| = 1$ en $|\Delta m_\ell| = 0$ of 1 , hetgeen samenhangt met de spin van het geëmitteerde foton. Soms geldt dat $\vec{r}_{BA} = \vec{0}$ voor alle toestanden met $E_B < E_A$. Dit is bijvoorbeeld het geval voor de 2s-toestand van het waterstofatoom, waarvoor er geen dipoolovergang mogelijk is naar de 1s-grondtoestand omdat beide toestanden $\ell = 0$ hebben. Om de (langere) levensduur van zulke toestanden te bepalen moet de volgende term in de multipoolexpansie worden meegenomen. Dit houdt in dat de magnetische interactie nu niet kan worden weggelaten (gevolg: magnetische dipoolovergangen) en dat in $\hat{V}_{\text{int}}(t)$ de Fourier-mode $\exp(-i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}})$ moet worden vervangen door $\hat{1} - i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}}$ (gevolg: elektrische quadrupoolovergangen). Voor de 2s-toestand van het waterstofatoom zijn zelfs deze overgangen niet mogelijk. De 1-fotonovergang $2s \rightarrow 1s + \gamma$ is namelijk verboden op grond van behoud van impulsmoment. De veel zwakkere 2-fotonovergang $2s \rightarrow 1s + \gamma + \gamma$ is daarentegen wel mogelijk. Dit verklaart dan ook waarom de gemiddelde levensduur van de 2s toestand (122 ms) zoveel groter is dan die van de 2p toestand (1.6 ns).

4.4.3 Het fotongas: kwantumstatistiek voor fotonen

Als laatste voorbeeld van de interactie tussen kwantumsystemen en gekwantiseerde elektromagnetische velden bekijken we de kwantumstatistiek voor fotonen. In het werkcollege zal aan de hand van vergelijkingen (384)–(386) een conditie worden afgeleid voor thermisch evenwicht tussen een atomair warmtebad bij temperatuur T en elektromagnetische straling met kwantumgetallen \vec{k} en λ . Uit deze evenwichtsconditie volgt dat het gemiddelde bezettingsgetal van de desbetreffende 1-fotontoestand bij temperatuur $T = 1/(k_B\beta)$ voldoet aan

$$\boxed{\bar{n}_{\vec{k},\lambda} = \frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega_k) - 1}}, \quad (392)$$

hetgeen we herkennen als een Bose–Einstein distributie met $\alpha = 0$. Dit is dezelfde distributie als afgeleid in opgave 15 van het werkcollege voor een kanoniek ensemble waarvan de constituenten bestaan uit één enkele lineaire harmonische oscillator. Het feit dat we fotonen in het algemeen niet met het grootkanoniek-ensembleconcept kunnen behandelen hangt samen met de afwezigheid van een behoudswet voor het totale aantal fotonen.¹³ Ten gevolge van de absorptie door de atomen komen de fotonen namelijk niet als deeltjes in het atomaire warmtebad terecht en dragen ze uitsluitend bij tot de thermodynamische energiebalans. De entropie van het warmtebad is dan ook onafhankelijk van het aantal fotonen. De afwezigheid van een fotonbehoudswet zorgt er tevens voor dat er in deze situatie geen Bose–Einstein condensatie van fotonen zal optreden omdat het entropisch gunstiger is dat het atomaire warmtebad zulke fotonen absorbeert: het condensaat betreft één enkele kwantumtoestand, terwijl het aantal warmtebadtoestanden toeneemt bij energie-absorptie.

Sluit het elektromagnetisch veld nu op binnen een zwart lichaam (“black body”), waarvan de wanden fotonen met alle energieën kunnen absorberen/emitteren. In het geval van zo’n geïdealiseerd zwart lichaam hebben we te maken met een ideaal fotongas. De energiedistributie van het stralingsveld per eenheid van energie en volume wordt dan

$$U(E) \stackrel{(392)}{=} \frac{1}{V} \frac{E}{\exp(\beta E) - 1} \int d\Omega \sum_{\lambda=1}^2 \rho_{\lambda}(E, \Omega) \stackrel{(372)}{=} \frac{8\pi}{h^3 c^3} \frac{E^3}{\exp(\beta E) - 1}. \quad (393)$$

Hieruit kan de stralingswet van Planck worden afgeleid voor de energiedistributie per eenheid van frequentie $\nu = E/h$ en volume:

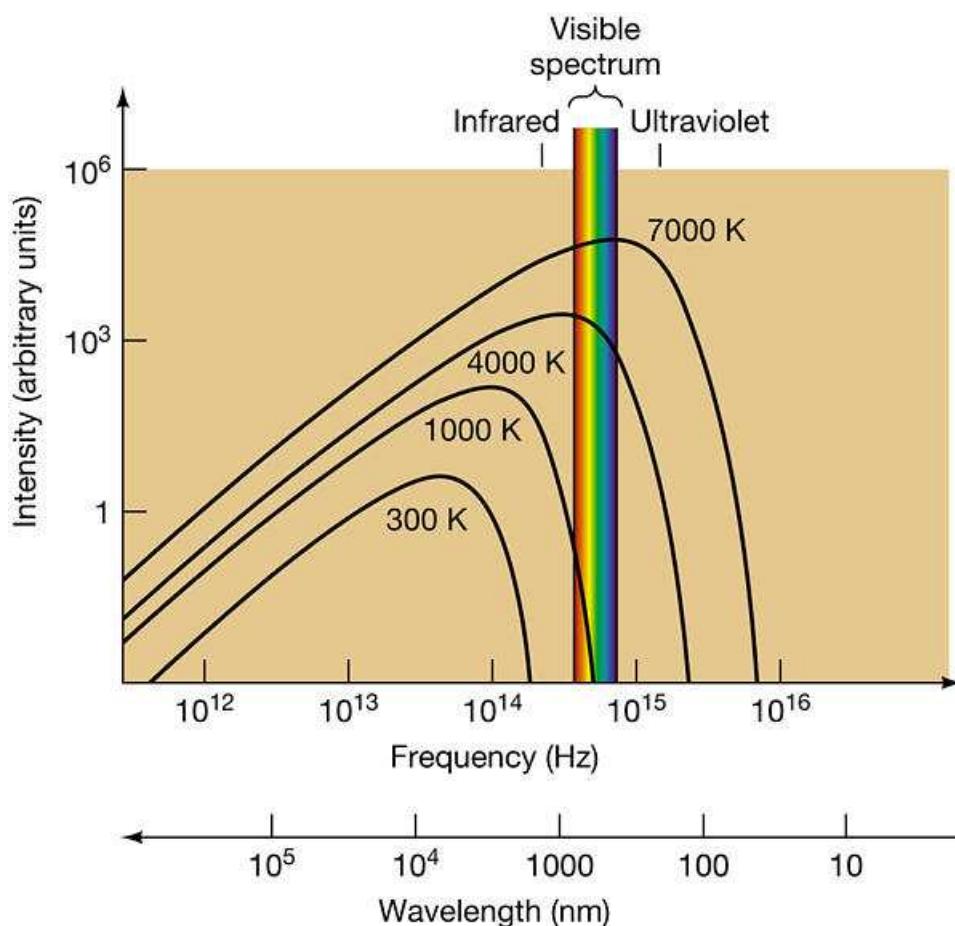
$$\boxed{U(\nu) = U(E) \frac{dE(\nu)}{d\nu} \stackrel{(393)}{=} \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(h\nu/k_B T) - 1}}, \quad (394)$$

¹³Men dacht lang dat een fotongas met deeltjesbehoud niet te realiseren was, maar in 2010 kwam hier verandering in. Het fotongas binnen de microresonator beschreven in opgave 15 van het werkcollege voldoet in zeer goede benadering aan een fotonbehoudswet en geeft daarom weldegelijk aanleiding tot Bose–Einstein condensatie.

alsmede de wet van Stefan–Boltzmann voor de totale energiedichtheid:

$$U_{\text{tot}} = \int_0^{\infty} dE U(E) \stackrel{(393), x=\beta E}{=} \frac{k_B^4 T^4}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{\exp(x) - 1} = \frac{\pi^2 k_B^4}{15 \hbar^3 c^3} T^4. \quad (395)$$

Experimentele realisatie: gebruik een grote holte (oven) met een klein gaatje erin. Als de wanden van de holte ruw genoeg zijn, dan zou licht dat via het gaatje de holte binnenvalt vele malen aan de wanden moeten reflecteren alvorens weer via het gaatje uit te kunnen treden. Het licht zal dan vrijwel zeker voordien door de wanden worden geabsorbeerd. Het gaatje is derhalve in goede benadering als zwart lichaam te beschouwen. Door de temperatuur in de holte te variëren is dan de thermische stralingswet van Planck experimenteel te verifiëren. Een ander vrijwel volmaakt voorbeeld van Plancks stralingspectrum wordt gevormd door de kosmische achtergrondstraling afkomstig van de oerknal [“cosmic microwave background (CMB)”], hetgeen overeenkomt met een temperatuur van $T = 2.725$ K.



5 Veeldeeltjesinterpretatie van de relativistische QM

Gemotiveerd door de kwantisatie van het elektromagnetisch veld zal in dit hoofdstuk een veeldeeltjesinterpretatie worden toegekend aan de oplossingen van de relativistische golfvergelijkingen die we in hoofdstuk 3 hebben geconstrueerd.

Uitgebreidere versies van het hier besproken materiaal zijn te vinden in Schwabl (Hst. 13) en Merzbacher (Hst. 24).

Negatieve-energietoestanden en de 1-deeltjes relativistische QM: de pogingen om een relativistische 1-deeltjes QM op te zetten gingen in hoofdstuk 3 telkens gepaard met een lastig te interpreteren set van negatieve-energietoestanden. In het bosonische geval, zoals in de Klein–Gordon theorie, resulteerde dit in onoverkomelijke problemen die de theorie ongeschikt maakten voor het opzetten van een 1-deeltjes relativistische QM. In het fermionische geval, zoals in de vrije Dirac-theorie, bood het Pauli-uitsluitingsprincipe een uitweg door aan te nemen dat in de vacuümtoestand van het universum alle 1-fermion negatieve-energietoestanden bezet zijn. Deze toestanden in de Dirac-zee gedragen zich dynamisch alsof er sprake is van een tegengestelde lading. Een voorbeeld hiervan is het relativistisch 1-elektron atoom, dat gebonden toestanden met positieve energie heeft. Bij omkering van de kernlading ($Z \rightarrow -Z$) zijn er echter alleen gebonden toestanden met negatieve energie. Dit is consistent met het plaatje dat de positief geladen kern de negatieve-energie elektronen effectief afstoot en dat bij omkering van de kernlading de negatieve-energie elektronen effectief worden aangetrokken. Een andere manier om de tegengestelde lading af te kunnen lezen is door in de Dirac-vergelijking (328) met behulp van de substitutie $E = E_{\text{NR}} - mc^2$ de negatieve-energietoestanden te selecteren. Dan vinden we dezelfde eigenwaardenvergelijking als voorheen met $\psi_U \leftrightarrow \psi_D$, $E_{\text{NR}} \rightarrow -E_{\text{NR}}$, $\hat{p} \rightarrow -\hat{p}$ en $q \rightarrow -q$. In opgave 28 van het werkcollege is aangetoond hoe inderdaad uit een negatieve-energietoestand door middel van ladingsconjugatie een positieve-energietoestand met omgekeerde lading kan worden geconstrueerd. In de vrije Dirac-theorie lijkt dus de beschrijving verborgen te zitten van een tweede type deeltje met tegengestelde lading. Met behulp van de gatentheorie-aanpak (zie § 1.7.1) kunnen deze deeltjes met tegengestelde lading worden geassocieerd met gaten in de Dirac-zee.

Een conflict met gatentheorie: het optreden van het β^+ -vervalproces $p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$ in instabiele kernen met een overschot aan protonen is in tegenspraak met bovenstaande gatentheorie-interpretatie. We zouden het geproduceerde e^+ namelijk als een gat in de Dirac-zee van elektronen willen interpreteren. Echter, het creëren van zo'n gat in de Dirac-zee zou tegelijkertijd gepaard moeten gaan met het creëren van een positieve-energie elektron (elektron–gat excitatie), hetgeen overduidelijk niet het geval is in het aangegeven β^+ -vervalproces!

Veeldeeltjesinterpretatie van de relativistische QM: dit alles duidt er op dat het misschien beter is om de relativistische QM niet als 1-deeltjestheorie op te zetten, maar als veeldeeltjestheorie net als voor het elektromagnetisch veld. Dit idee is niet in tegenspraak met de niet-relativistische QM. Immers, zoals eerder opgemerkt zijn de fotonen massaloos en derhalve altijd relativistisch te beschouwen. Deze fotonen zijn zonder energiedrempel te creëren en annihilieren. Massieve deeltjes daarentegen hebben weldegelijk een energiedrempel ten gevolge van de rustmassa:

- voor kinetische energieën $\ll mc^2$ gedragen zulke systemen zich niet-relativistisch, d.w.z. ze hebben een vast aantal deeltjes.
- voor kinetische energieën $= \mathcal{O}(mc^2)$ worden de veeldeeltjesaspecten zichtbaar.

De veeldeeltjestheorie wordt nu net zo opgezet als voor het elektromagnetisch veld: de veldvergelijking wordt door middel van een Fourier-decompositie (vlakke-golf ontbinding) opgelost en de Hamiltoniaan behorende bij de veldvergelijking wordt vervolgens geschreven als een oneindige set van lineaire harmonische oscillatoren. Tenslotte wordt deze Hamiltoniaan gekwantiseerd in het Heisenbergbeeld en worden de energiekwanta als deeltjes geïnterpreteerd. De deeltjes–golf dualiteit is dan een automatisch gevolg van het feit dat de creatie/annihilatie van een deeltje altijd gepaard gaat met een overeenkomstige vlakke-golf factor, zie bijvoorbeeld vergelijking (364) voor het elektromagnetisch veld.

Vanaf dit punt houdt de 1-deeltjes QM op en maakt plaats voor een veeldeeltjesformulering op basis van tweede kwantisatie. Deze veeldeeltjesformulering staat bekend onder de naam relativistische kwantumveldentheorie en wordt normaal gesproken beschreven in termen van padintegralen dan wel Lagrange-dichtheden voor continue systemen. In deze collegereeks zullen we ons beperken tot het afleiden van de markante kwantisatie-eigenschappen zonder daarbij meteen het kwantumveldentheorie-formalisme in te duiken.

5.1 Kwantisatie van het Klein–Gordon veld

We beginnen weer met de Klein–Gordon vergelijking voor vrije spin-0 deeltjes met rustmassa m en lading q . Voor het afleiden van de veeldeeltjesformulering negeren we het probleem met de 1-deeltjes kwantummechanische interpretatie en beschouwen we de Klein–Gordon vergelijking als een relativistische klassieke golfvergelijking.

De klassieke energiedichtheid: om het verband met het elektromagnetisch veld wat duidelijker te maken gaan we werken met een herschaald Klein–Gordon veld $\phi(x)$, zodanig dat $\psi(x) = \sqrt{2mc^2} \phi(x)/\hbar$. Dit Klein–Gordon veld voldoet aan

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right)\phi(x) = \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right)\phi(x) = 0 \quad (396)$$

en heeft een bijbehorende klassieke energiedichtheid¹⁴ (zonder bewijs)

$$\rho_{\mathcal{H}}(x) = \left(\frac{\partial}{\partial t} \phi^*(x) \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} \phi(x) \right) + c^2 \left(\vec{\nabla} \phi^*(x) \right) \cdot \left(\vec{\nabla} \phi(x) \right) + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi^*(x) \phi(x). \quad (397)$$

In deze vorm is de overeenkomst met de klassieke energiedichtheid van het elektromagnetisch veld duidelijk. De eerste twee termen zijn het analogon van de energiedichtheden ten gevolge van respectievelijk het elektrisch veld en het magnetisch veld. De laatste term is een rustmassaterm, die natuurlijk afwezig is voor de massaloze fotonen. De andere verschillen tussen beide energiedichtheden volgen uit het feit dat de fotonen spin-1 deeltjes zijn, terwijl we hier te maken hebben met spin-0 deeltjes (zoals afgeleid in § 3.1).

Opmerking: in de relativistische kwantumveldentheorie wordt dit allemaal iets systematischer aangepakt door te werken met Lagrange-dichtheden voor continue systemen, met in dit geval $\phi(x)$ en $\phi^*(x)$ als gegeneraliseerde coördinaten. De Klein–Gordon vergelijking volgt dan simpelweg uit de Euler–Lagrange (bewegings)vergelijking behorende bij deze Lagrange-dichtheid. Uit de Lagrange-dichtheid kan vervolgens de Hamilton-dichtheid van het systeem worden afgeleid, hetgeen samenvalt met bovenstaande energiedichtheid.

Vlakke-golf ontbinding en kwantisatie: nu gaan we in analogie met de Maxwell-vergelijkingen ook de Klein–Gordon vergelijking oplossen in een afgesloten ruimte met periodieke randvoorwaarden. Dit gebeurt weer aan de hand van een Fourier-decompositie in termen van periodieke vlakke golven:

$$\phi(x) = \sum_{\vec{p}} \frac{\hbar}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} u_{\vec{p}}(\vec{x}) \left[a_{\vec{p}}(t) + c_{\vec{p}}(t) \right], \quad u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar). \quad (398)$$

De positieve- en negatieve-frequentie Fourier-coëfficiënten $a_{\vec{p}}(t)$ en $c_{\vec{p}}(t)$ voldoen aan

$$a_{\vec{p}}(t) = a_{\vec{p}} \exp(-iE_{\vec{p}}t/\hbar) \quad \text{en} \quad c_{\vec{p}}(t) = c_{\vec{p}} \exp(iE_{\vec{p}}t/\hbar),$$

$$\text{met} \quad \vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L} \vec{\nu}, \quad E_{\vec{p}} \equiv \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} > 0 \quad (\nu_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (399)$$

Voor de Fourier-componenten $u_{\vec{p}}(\vec{x})$ geldt tenslotte de gebruikelijke normalisatieconditie

$$\int_V d\vec{x} u_{\vec{p}}(\vec{x}) u_{\vec{p}'}^*(\vec{x}) \stackrel{(E.4)}{=} \delta_{\vec{p}, \vec{p}'}. \quad (400)$$

De totale energie binnen het volume V wordt dan simpelweg

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(t) &= \int_V d\vec{x} \rho_{\mathcal{H}}(x) \stackrel{(397),(400)}{=} \sum_{\vec{p}} \frac{E_{\vec{p}}}{2} \left(|a_{\vec{p}}(t) - c_{\vec{p}}(t)|^2 + |a_{\vec{p}}(t) + c_{\vec{p}}(t)|^2 \right) \\ &= \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} \left(|a_{\vec{p}}(t)|^2 + |c_{\vec{p}}(t)|^2 \right) = \boxed{\sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} \left(|a_{\vec{p}}|^2 + |c_{\vec{p}}|^2 \right) = \mathcal{H}}. \quad (401) \end{aligned}$$

¹⁴Voor $\phi(x) \in \mathbb{R}$ moet deze energiedichtheid vermenigvuldigd worden met een factor 1/2, aangezien het aantal vrijheidsgraden dan gehalveerd is.

Deze superpositie van vibratiemodes wordt nu gekwantiseerd in het Heisenbergbeeld in analogie met vergelijkingen (357)–(361) voor het elektromagnetisch veld:

$$\begin{aligned} a_{\vec{p}}(t) &\rightarrow \hat{a}_{\vec{p}}(t) \equiv \hat{a}_{\vec{p}} \exp(-iE_{\vec{p}}t/\hbar), \\ c_{\vec{p}}(t) &\rightarrow \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger(t) \equiv \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger \exp(iE_{\vec{p}}t/\hbar). \end{aligned} \quad (402)$$

Om een correcte deeltjesinterpretatie aan de negatieve-energie oplossingen te kunnen geven is het hierbij essentieel dat de tweede operator een creatie-operator is als de eerste operator een annihilatie-operator is. Het scalaire Klein–Gordon veld gaat zo over in een scalaire veldoperator

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(x) &= \sum_{\vec{p}} \frac{\hbar}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} u_{\vec{p}}(\vec{x}) \left[\hat{a}_{\vec{p}}(t) + \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger(t) \right] \\ &= \sum_{\vec{p}} \frac{\hbar}{\sqrt{2VE_{\vec{p}}}} \left[\hat{a}_{\vec{p}} \exp(-ip \cdot x/\hbar) + \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \exp(ip \cdot x/\hbar) \right] \end{aligned} \quad (403)$$

met

$$p^0 \equiv E_{\vec{p}}/c = \sqrt{m^2c^2 + \vec{p}^2}, \quad (404)$$

hetgeen aan dezelfde golfvergelijking voldoet als het klassieke Klein–Gordon veld.

Deeltjesinterpretatie: bij de gekwantiseerde Klein–Gordon theorie hoort de volgende deeltjesinterpretatie (zie onderstaande veeldeeltjesoperatoren). De operatoren $\hat{a}_{\vec{p}}$ en $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$ annihileren en creëren spin-0 deeltjes met impuls \vec{p} en positieve energie $E_{\vec{p}}$. De operatoren $\hat{b}_{\vec{p}}$ en $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$ annihileren en creëren de bijbehorende antideeltjes met dezelfde spin, impuls en positieve energie, maar met tegengestelde lading. De veldoperator $\hat{\phi}(x)$ werkt in de Fockruimte behorende bij zowel de spin-0 deeltjes als de bijbehorende antideeltjes.¹⁵ Om de negatieve-energie oplossingen van de Klein–Gordon vergelijking zinvol te behandelen worden deeltjes en antideeltjes dus tezamen beschreven in de veeldeeltjesformulering van de relativistische QM. Een negatieve-energie oplossing komt dan namelijk overeen met het verwijderen van een antideeltje met positieve energie en tegengestelde lading. Deeltjes en antideeltjes zijn dus te interpreteren als identieke deeltjes met tegengestelde waarden voor het kwantumgetal lading, terwijl de veldoperator $\hat{\phi}(x)$ correspondeert met één specifieke waarde van dit kwantumgetal. Het kwantumgetal lading geeft hierbij aan hoe de deeltjes interageren met hun omgeving. We onderscheiden drie soorten (behouden) lading: elektrische lading, zwakke lading (zwakke isospin) en sterke lading (kleurlading), behorende bij de ons bekende niet-gravitationele krachten.

¹⁵Als $\phi(x) \in \mathbb{R}$, dan geldt $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger = \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$, zodat er geen onderscheid is tussen de deeltjes en antideeltjes die derhalve allebei lading 0 moeten hebben.

Motivatie voor de gegeven deeltjesinterpretatie: net als voor het elektromagnetisch veld voldoen de creatie- en annihilatie-operatoren aan bosonische commutatierelaties:

$$\boxed{[\hat{a}_{\vec{p}}(t), \hat{a}_{\vec{p}'}^\dagger(t)] = [\hat{b}_{\vec{p}}(t), \hat{b}_{\vec{p}'}^\dagger(t)] = \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \hat{1}, \quad \text{de overige commutatoeren zijn } 0} \quad (405)$$

Voer nu de teloperatoren

$$\boxed{\hat{n}_{\vec{p}}^{(+)} \equiv \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger(t) \hat{a}_{\vec{p}}(t) = \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \quad \text{en} \quad \hat{n}_{\vec{p}}^{(-)} \equiv \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger(t) \hat{b}_{\vec{p}}(t) = \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}}} \quad (406)$$

in om het aantal deeltjes respectievelijk antideeltjes te tellen. De totale Hamilton-operator van het vrije niet-interagerende veeldeeltjessysteem is dan net als in vergelijking (363) compact te schrijven als

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} \left(\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger(t) \hat{a}_{\vec{p}}(t) + \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger(t) \hat{b}_{-\vec{p}}(t) \right) = \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} \left(\hat{n}_{\vec{p}}^{(+)} + \hat{n}_{\vec{p}}^{(-)} + \hat{1} \right)} \quad (407)$$

Het energiespectrum is nu dus netjes van onderen begrensd. Verder zien we dat de nulpuntsenergie van het vacuüm wederom oneindig en positief is. De afgekeurde “waarschijnlijkheidsdichtheid” van §3.1 krijgt in de veeldeeltjesformulering een geheel andere betekenis. Het is gerelateerd aan de totale ladingsoperator van het veeldeeltjessysteem, immers

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{\text{tot}} &\equiv \frac{iqc}{\hbar} \int_V d\vec{x} \left(\hat{\phi}^\dagger(x) \partial_0 \hat{\phi}(x) - \partial_0 \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x) \right) \\ &\stackrel{(403), 1^e}{=} \frac{q}{2} \sum_{\vec{p}} \left([\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger(t) + \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger(t)] [\hat{a}_{\vec{p}}(t) - \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger(t)] + [\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger(t) - \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger(t)] [\hat{a}_{\vec{p}}(t) + \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger(t)] \right) \\ &\stackrel{(405)}{=} q \sum_{\vec{p}} \left(\hat{n}_{\vec{p}}^{(+)} - \hat{n}_{-\vec{p}}^{(-)} - \hat{1} \right) = \boxed{q \sum_{\vec{p}} \left(\hat{n}_{\vec{p}}^{(+)} - \hat{n}_{\vec{p}}^{(-)} - \hat{1} \right) = \hat{Q}_{\text{tot}}} \quad (408) \end{aligned}$$

telt inderdaad deeltjes met lading q en antideeltjes met lading $-q$. De Lorentz-invariante continuïteitsvergelijking representeert derhalve geen behoud van waarschijnlijkheid, maar behoud van totale lading van het veeldeeltjessysteem. De totale-impulsoperator van het vrije niet-interagerende veeldeeltjessysteem wordt tenslotte gegeven door de additieve uitdrukking (zonder bewijs)

$$\boxed{\hat{\vec{P}} = \sum_{\vec{p}} \vec{p} \left(\hat{n}_{\vec{p}}^{(+)} + \hat{n}_{\vec{p}}^{(-)} \right)} \quad (409)$$

Uit de drie veeldeeltjesoperatoren (407)–(409) kan de gegeven deeltjesinterpretatie dan rechtstreeks worden afgelezen.

Localiteit: fysische observabelen in verschillende ruimtelijke punten moeten onderling commuteren en dus gelijktijdig meetbaar zijn. De meetresultaten van een herhaalde kwantummechanische meting in een bepaald ruimtelijk punt mag namelijk niet te beïnvloeden zijn door het gelijktijdig uitvoeren van een herhaalde kwantummechanische meting in een ander ruimtelijk punt, hoe klein de onderlinge afstand tussen de ruimtelijke punten ook is. Dit wordt localiteit of ook wel microcausaliteit genoemd. Als de metingen elkaar wel op die manier zouden kunnen beïnvloeden, dan vindt er informatie-overdracht plaats die sneller gaat dan de lichtsnelheid, hetgeen in strijd is met de relativiteitstheorie. Bij de ene meting zou men dan namelijk het plaatsvinden van de andere meting kunnen waarnemen. In de plaatsrepresentatie kunnen de fysische observabelen worden geschreven in termen van de veldoperatoren (403), zodat uit de commutatierelaties van deze veldoperatoren zou moeten volgen dat aan localiteit is voldaan. De relevante commutatoren zijn dus

$$[\hat{\phi}(\vec{x}, t), \hat{\phi}(\vec{x}', t)] = [\hat{\phi}^\dagger(\vec{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}', t)] \stackrel{(403),(405)}{=} 0, \quad (410)$$

$$[\hat{\phi}(\vec{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}', t)] = \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \frac{\hbar^2 u_{\vec{p}}(\vec{x}) u_{\vec{p}'}^*(\vec{x}')}{2\sqrt{E_{\vec{p}} E_{\vec{p}'}}} [\hat{a}_{\vec{p}}(t) + \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger(t), \hat{a}_{\vec{p}'}^\dagger(t) + \hat{b}_{-\vec{p}'}(t)] \stackrel{(405)}{=} 0.$$

Deze commutatoren verdwijnen inderdaad netjes in alle vereiste situaties. Dit zou niet het geval zijn geweest als de creatie- en annihilatie-operatoren aan fermionische anticommutatierelaties hadden voldaan.

5.2 Kwantisatie van het Dirac-veld

De klassieke energiedichtheid: beschouw het Dirac-veld $\psi(x)$ dat voldoet aan de klassieke Dirac-vergelijking voor vrije spin-1/2 deeltjes met rustmassa m en lading q :

$$(i\hbar \not{\partial} - mc)\psi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - \beta mc^2\right)\psi(x) = 0. \quad (411)$$

De bijbehorende klassieke energiedichtheid wordt gegeven door

$$\rho_{\mathcal{H}}(x) = \psi^\dagger(x) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \psi^\dagger(x) \left(-i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2\right) \psi(x). \quad (412)$$

Vlakke-golf ontbinding en kwantisatie: de Dirac-vergelijking wordt vervolgens opgelost in de gebruikelijke afgesloten ruimte met periodieke randvoorwaarden. Dit leidt tot de volgende vlakke-golf ontbinding

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{mc^2}{E_{\vec{p}}}} u_{\vec{p}}(\vec{x}) \left[u_{\lambda}^+(\vec{p}) a_{\vec{p}, \lambda}(t) + u_{\lambda}^-(\vec{p}) c_{\vec{p}, \lambda}(t) \right] \\ &\equiv \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \frac{\exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar)}{\sqrt{VE_{\vec{p}}/mc^2}} \left[u_{\lambda}^+(\vec{p}) a_{\vec{p}, \lambda} \exp(-iE_{\vec{p}}t/\hbar) + u_{\lambda}^-(\vec{p}) c_{\vec{p}, \lambda} \exp(iE_{\vec{p}}t/\hbar) \right], \end{aligned} \quad (413)$$

met \vec{p} en $E_{\vec{p}}$ hetzelfde als voor het Klein–Gordon veld [zie vergelijking (399)]. De Dirac-spinoren $u_{\lambda}^{\pm}(\vec{p})$ voldoen aan

$$\hat{S} \cdot \hat{p} u_{\lambda}^{\pm}(\vec{p}) = \lambda \hbar \vec{p} u_{\lambda}^{\pm}(\vec{p}) \quad \text{en} \quad (\not{p}_{\pm} - mc) u_{\lambda}^{\pm}(\vec{p}) = 0, \quad (414)$$

waarbij $\lambda = +1/2$ of $-1/2$ de heliceitseigenwaarde aangeeft, $p_{\pm}^0 = \pm E_{\vec{p}}/c$ de energie-eigenwaarde en $\vec{p}_{\pm} = \vec{p}$ de impuls-eigenwaarde. Voor vrije spin-1/2 deeltjes is in opgave 27 van het werkcollege immers afgeleid dat \hat{H} , \hat{p} en $\hat{S} \cdot \hat{p}$ een commensurabele set operatoren vormen. Verder zijn deze Dirac-spinoren genormeerd in overeenstemming met de normeringsconditie in vergelijking (320):

$$u_{\lambda}^{\pm}(\vec{p})^{\dagger} u_{\lambda'}^{\pm}(\vec{p}) = \frac{E_{\vec{p}}}{mc^2} \delta_{\lambda, \lambda'} \quad \text{en} \quad u_{\lambda}^{\pm}(\vec{p})^{\dagger} u_{\lambda'}^{\mp}(\vec{p}) = 0. \quad (415)$$

De totale energie binnen het volume V wordt dan met behulp van de normalisatieconditie (400) voor de Fourier-componenten $u_{\vec{p}}(\vec{x})$ gegeven door

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(t) &= \int_V d\vec{x} \rho_{\mathcal{H}}(x) \stackrel{(412), (413)}{=} \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda, \lambda'} mc^2 \left[u_{\lambda}^{+}(\vec{p})^{\dagger} a_{\vec{p}, \lambda}^{*}(t) + u_{\lambda}^{-}(\vec{p})^{\dagger} c_{\vec{p}, \lambda}^{*}(t) \right] \times \\ &\times \left[u_{\lambda'}^{+}(\vec{p}) a_{\vec{p}, \lambda'}(t) - u_{\lambda'}^{-}(\vec{p}) c_{\vec{p}, \lambda'}(t) \right] \stackrel{(415)}{=} \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} E_{\vec{p}} \left(|a_{\vec{p}, \lambda}(t)|^2 - |c_{\vec{p}, \lambda}(t)|^2 \right), \end{aligned}$$

hetgeen aanleiding geeft tot de additieve uitdrukking

$$\boxed{\mathcal{H} = \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} E_{\vec{p}} \left(|a_{\vec{p}, \lambda}|^2 - |c_{\vec{p}, \lambda}|^2 \right)}. \quad (416)$$

Op grond van dit minteken is het duidelijk dat het geen zin heeft de kwantisatie met bosonische creatie- en annihilatie-operatoren uit te voeren. De totale energie is niet van anderen begrensd en is dus niet op dezelfde manier als voor het Klein–Gordon veld te kwantiseren. Om het minteken te compenseren worden we gedwongen om de alternatieve veeldeeltjesformulering te hanteren, zodat de creatie- en annihilatie-operatoren voldoen aan fermionische anticommutatierelaties.

In dit geval ziet de kwantisatie er als volgt uit in het Heisenbergbeeld:

$$\begin{aligned} a_{\vec{p}, \lambda}(t) &\rightarrow \hat{a}_{\vec{p}, \lambda}(t) \equiv \hat{a}_{\vec{p}, \lambda} \exp(-iE_{\vec{p}}t/\hbar), \\ c_{\vec{p}, \lambda}(t) &\rightarrow \hat{b}_{-\vec{p}, \lambda}^{\dagger}(t) \equiv \hat{b}_{-\vec{p}, \lambda}^{\dagger} \exp(iE_{\vec{p}}t/\hbar). \end{aligned} \quad (417)$$

Het Dirac-veld gaat zo over in een veldoperator die aan de Dirac-vergelijking voldoet:

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\psi}(x) &= \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{mc^2}{E_{\vec{p}}}} u_{\vec{p}}(\vec{x}) \left[u_{\lambda}^{+}(\vec{p}) \hat{a}_{\vec{p}, \lambda}(t) + u_{\lambda}^{-}(\vec{p}) \hat{b}_{-\vec{p}, \lambda}^{\dagger}(t) \right] \\ &= \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{mc^2}{VE_{\vec{p}}}} \left[u_{\lambda}^{+}(\vec{p}) \hat{a}_{\vec{p}, \lambda} \exp(-ip \cdot x/\hbar) + u_{\lambda}^{-}(-\vec{p}) \hat{b}_{\vec{p}, \lambda}^{\dagger} \exp(ip \cdot x/\hbar) \right] \end{aligned}}, \quad (418)$$

met wederom

$$\boxed{p^0 \equiv E_{\vec{p}}/c = \sqrt{m^2 c^2 + \vec{p}^2}}. \quad (419)$$

Deeltjesinterpretatie en motivatie: de operatoren $\hat{a}_{\vec{p},\lambda}$ en $\hat{a}_{\vec{p},\lambda}^\dagger$ annihileren en creëren spin-1/2 deeltjes met impuls \vec{p} , positieve energie $E_{\vec{p}}$ en heliceit λ . De operatoren $\hat{b}_{\vec{p},\lambda}$ en $\hat{b}_{\vec{p},\lambda}^\dagger$ annihileren en creëren de bijbehorende antideeltjes met dezelfde spin, impuls, positieve energie en heliceit, maar met tegengestelde lading. Zoals aangegeven, ten gevolge van de eis dat het energiespectrum van onderen begrensd moet zijn (en localiteit), laten we de creatie- en annihilatie-operatoren voldoen aan fermionische anticommutatierelaties:

$$\boxed{\{\hat{a}_{\vec{p},\lambda}(t), \hat{a}_{\vec{p}',\lambda'}^\dagger(t)\} = \{\hat{b}_{\vec{p},\lambda}(t), \hat{b}_{\vec{p}',\lambda'}^\dagger(t)\} = \delta_{\vec{p},\vec{p}'} \delta_{\lambda,\lambda'} \hat{1}, \text{ overige anticommutatoren zijn } 0}. \quad (420)$$

Dit impliceert wederom een identieke veeldeeltjesaanpak waarbij deeltjes en antideeltjes tezamen worden beschreven in de relativistische QM. Voer nu de teloperatoren

$$\boxed{\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} \equiv \hat{a}_{\vec{p},\lambda}^\dagger(t) \hat{a}_{\vec{p},\lambda}(t) = \hat{a}_{\vec{p},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{p},\lambda} \quad \text{en} \quad \hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} \equiv \hat{b}_{\vec{p},\lambda}^\dagger(t) \hat{b}_{\vec{p},\lambda}(t) = \hat{b}_{\vec{p},\lambda}^\dagger \hat{b}_{\vec{p},\lambda}} \quad (421)$$

in om het aantal deeltjes respectievelijk antideeltjes te tellen. De totale Hamilton-operator van het vrije niet-interagerende veeldeeltjessysteem is dan compact te schrijven als

$$\begin{aligned} & \int_V d\vec{x} \hat{\psi}^\dagger(x) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(x) \stackrel{(400),(415),(418)}{=} \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} E_{\vec{p}} \left(\hat{a}_{\vec{p},\lambda}^\dagger(t) \hat{a}_{\vec{p},\lambda}(t) - \hat{b}_{-\vec{p},\lambda}(t) \hat{b}_{-\vec{p},\lambda}^\dagger(t) \right) \\ & = \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} E_{\vec{p}} \left(\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} + \hat{n}_{-\vec{p},\lambda}^{(-)} - \hat{1} \right) = \boxed{\sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} E_{\vec{p}} \left(\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} + \hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} - \hat{1} \right)} = \hat{H}. \quad (422) \end{aligned}$$

Het energiespectrum is dus inderdaad netjes van onderen begrensd dankzij de anticommutatierelaties voor de creatie- en annihilatie-operatoren $\hat{b}_{\vec{p},\lambda}^\dagger(t)$ en $\hat{b}_{\vec{p},\lambda}(t)$. De waarschijnlijkheidsdichtheid van §3.2.1 krijgt in de veeldeeltjesformulering weer de betekenis van totale ladingsoperator van het veeldeeltjessysteem, immers

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{\text{tot}} & \equiv q \int_V d\vec{x} \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \stackrel{(400),(415),(418)}{=} q \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \left(\hat{a}_{\vec{p},\lambda}^\dagger(t) \hat{a}_{\vec{p},\lambda}(t) + \hat{b}_{-\vec{p},\lambda}(t) \hat{b}_{-\vec{p},\lambda}^\dagger(t) \right) \\ & \stackrel{(420),(421)}{=} \boxed{q \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \left(\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} - \hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} + \hat{1} \right)} = \hat{Q}_{\text{tot}} \quad (423) \end{aligned}$$

telt inderdaad deeltjes met lading q en antideeltjes met lading $-q$. Tenslotte wordt de totale-impulsoperator van het vrije niet-interagerende veeldeeltjessysteem gegeven door de additieve uitdrukking

$$\boxed{\hat{\vec{P}} = \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \vec{p} \left(\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} + \hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} \right)}. \quad (424)$$

Energie van het vacuüm: in bovenstaande vorm voor de Hamilton-operator heeft het vacuüm een oneindige negatieve energie, maar legt het wel de grondtoestand vast. Voor fermionische kwantisatiecondities heeft het vacuüm dus een nulpuntsenergie per vibratiemode die tegengesteld is aan de overeenkomstige nulpuntsenergie voor bosonische kwantisatiecondities. Dus het zou best wel eens zo kunnen zijn dat in de natuur het aantal bosonische en fermionische vrijheidsgraden aan elkaar gelijk zijn, zodat de nulpuntsenergie eindig kan worden zonder daarvoor de oneindigheden met de hand te verwijderen. Dit idee wordt bijvoorbeeld gebruikt in de supersymmetrie, waar inderdaad bosonische en fermionische vrijheidsgraden via een symmetrie aan elkaar gekoppeld worden. Kwantummechanisch gezien is het verdwijnen van de oneindige nulpuntsenergie niet essentieel, maar kosmologisch gezien wel omdat een energiedichtheid equivalent is met een kromming van de tijd–ruimte.

Localiteit: ook om aan localiteit te voldoen zijn er anticommutatierelaties nodig en wel de volledige set. In het werkcollege zal namelijk worden aangetoond dat in dat geval

$$\begin{aligned} \{\hat{\psi}_i(\vec{x}, t), \hat{\psi}_{i'}(\vec{x}', t)\} &= \{\hat{\psi}_i^\dagger(\vec{x}, t), \hat{\psi}_{i'}^\dagger(\vec{x}', t)\} = 0, \\ \{\hat{\psi}_i(\vec{x}, t), \hat{\psi}_{i'}^\dagger(\vec{x}', t)\} &= \delta_{ii'} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \hat{1} \quad (i, i' = 1, \dots, 4), \end{aligned} \quad (425)$$

zodat de relevante anticommutatoren van de Dirac-velden netjes verdwijnen in alle vereiste situaties. Dit was niet het geval geweest als de creatie- en annihilatie-operatoren aan bosonische commutatierelaties hadden voldaan. Een belangrijke opmerking hierbij is dat fysische observabelen uit even aantallen Dirac-velden moeten bestaan. Fysische waarnemingen veranderen namelijk niet onder draaiing van de ruimte over een hoek 2π , terwijl de Dirac-spinoren van teken omslaan (zie opgave 26 van het werkcollege). Producten van even aantallen Dirac-velden geven vervolgens aanleiding tot commutatoren die te schrijven zijn in termen van anticommutatoren van de Dirac-velden (zie de truc op p.10), zodat localiteit te realiseren is door middel van zowel anticommutatierelaties als commutatierelaties.

Spin–statistiek theorema: spin en statistiek zijn gerelateerd in de relativistische QM. Kwantisatie van relativistische golfvergelijkingen behorende bij willekeurige spin leidt tot de uitspraak dat bosonen geheeltallige spin moeten hebben en fermionen halfvallige spin.

Bij de expliciete afleiding van dit theorema wordt ten eerste geëist dat het energiespectrum van onderen begrensd is. Dit zal vastleggen of de creatie- en annihilatie-operatoren $\hat{b}_{\vec{p}, \lambda}^\dagger$ en $\hat{b}_{\vec{p}, \lambda}$ aan commutatierelaties of anticommutatierelaties voldoen. Uit de localiteitsconditie volgt tenslotte dat $\hat{a}_{\vec{p}, \lambda}^\dagger$ en $\hat{a}_{\vec{p}, \lambda}$ aan dezelfde operatoralgebra moeten voldoen én dat beide sets operatoren onderling ook moeten commuteren dan wel anticommuteren.

5.2.1 Toegift: de 1-(quasi)deeltjesbenadering voor elektronen

Uitgaande van de veeldeeltjestheorie voor elektronen en positronen (anti-elektronen) proberen we tenslotte om het succes van de 1-deeltjes Dirac-theorie voor elektronen te begrijpen. Definieer hiertoe het

$$\underline{\text{elektron-vacuüm}} \quad |0_e\rangle, \quad \text{met} \quad \hat{\psi}(x)|0_e\rangle \equiv 0 \quad \text{en} \quad \langle 0_e|0_e\rangle \equiv 1. \quad (426)$$

Dit wil zeggen dat $\forall_{\vec{p}, \lambda} \hat{a}_{\vec{p}, \lambda}|0_e\rangle = \hat{b}_{\vec{p}, \lambda}^\dagger|0_e\rangle = 0$, zodat dit “vacuüm” geen elektronen bevat. Wel zijn alle mogelijke 1-positrontoestanden bezet en bestaat het elektron-vacuüm derhalve uit een oneindig aantal positronen. We hebben hier in feite te maken met een quasi-deeltjesvacuüm behorende bij de quasi-deeltjes annihilatie-operator $\hat{\psi}(x)$ in het Heisenbergbeeld. In verband met het Pauli-uitsluitingsprincipe werkt dit constructievoorschrift voor het elektron-vacuüm alleen voor fermionen en niet voor bosonen.

Toevoeging van een elektron aan het elektron-vacuüm en verwijdering van een positron uit het elektron-vacuüm kunnen allebei effectief als een soort 1-elektrontoestand worden opgevat, waarbij er in het laatste geval sprake is van een negatieve energie en een effectieve lading $-|e|$ ten opzichte van het vacuüm. In deze quasi-deeltjes zienswijze is een willekeurige 1-elektrontoestand te definiëren als een

$$\underline{\text{1-ladingstoestand}} \quad |1_e\rangle, \quad \text{met} \quad |1_e\rangle \equiv \int_V d\vec{x} \hat{\psi}^\dagger(x) \psi_e(x) |0_e\rangle. \quad (427)$$

Deze 1-ladingstoestand is in het Heisenbergbeeld gedefinieerd, net zoals de veldoperator $\hat{\psi}(x)$. Dit houdt automatisch in dat de tijdsafhankelijkheid van $\hat{\psi}^\dagger(x)$ gecompenseerd wordt door de tijdsafhankelijkheid van de spinorcoëfficiënt $\psi_e(x)$. De coëfficiënt $\psi_e(x)$ zal geïdentificeerd gaan worden met de spinorgolffunctie in de 1-elektron Dirac-theorie. In het werkcollege zal worden aangetoond dat de toestanden $\hat{\psi}^\dagger(x)|0_e\rangle$ de volgende orthonormaliteitseigenschap hebben:

$$\langle 0_e | \hat{\psi}_i(\vec{x}, t) \hat{\psi}_{i'}^\dagger(\vec{x}', t) | 0_e \rangle = \delta_{ii'} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \hat{1} \quad (i, i' = 1, \dots, 4), \quad (428)$$

waaruit we kunnen afleiden dat

$$\begin{aligned} \langle 1_e | 1_e \rangle &= \int_V d\vec{x} \int_V d\vec{x}' \psi_e^\dagger(\vec{x}, t) \langle 0_e | \hat{\psi}(\vec{x}, t) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}', t) | 0_e \rangle \psi_e(\vec{x}', t) = \int_V d\vec{x} \psi_e^\dagger(\vec{x}, t) \psi_e(\vec{x}, t), \\ \psi_e(\vec{x}, t) &= \int_V d\vec{x}' \langle 0_e | \hat{\psi}(\vec{x}, t) \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}', t) | 0_e \rangle \psi_e(\vec{x}', t) \stackrel{(427)}{=} \langle 0_e | \hat{\psi}(\vec{x}, t) | 1_e \rangle. \end{aligned} \quad (429)$$

Dit betekent onder andere dat de normering van de spinorgolffunctie $\psi_e(x)$ automatisch volgt uit de normering van de 1-ladingstoestand $|1_e\rangle$.

De lading van bovenstaande veeldeeltjestoestanden wordt gegeven door

$$\hat{Q}_{\text{tot}} |0_e\rangle \stackrel{(423)}{=} -|e| \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \left(\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} - \hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} + \hat{1} \right) |0_e\rangle = 0 |0_e\rangle, \quad (430)$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{\text{tot}} |1_e\rangle &\stackrel{(427)}{=} \int_V d\vec{x} \hat{Q}_{\text{tot}} \hat{\psi}^\dagger(x) |0_e\rangle \psi_e(x) \stackrel{(430)}{=} \int_V d\vec{x} [\hat{Q}_{\text{tot}}, \hat{\psi}^\dagger(x)] |0_e\rangle \psi_e(x) \\ &\stackrel{(423)}{=} -|e| \int_V d\vec{x} \hat{\psi}^\dagger(x) \psi_e(x) |0_e\rangle \stackrel{(427)}{=} -|e| |1_e\rangle, \end{aligned} \quad (431)$$

waarbij gebruik is gemaakt van $\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} |0_e\rangle = 0 |0_e\rangle$ en $\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} |0_e\rangle = |0_e\rangle$ alsmede de relaties

$$\sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \left[\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} - \hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} + \hat{1}, \hat{a}_{\vec{p}',\lambda'}^\dagger(t) \right] \stackrel{(420),(421)}{=} \hat{a}_{\vec{p}',\lambda'}^\dagger(t)$$

en

$$\sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} \left[\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} - \hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} + \hat{1}, \hat{b}_{\vec{p}',\lambda'}(t) \right] \stackrel{(420),(421)}{=} \hat{b}_{\vec{p}',\lambda'}(t).$$

De terminologie 1-ladingstoestand voor $|1_e\rangle$ is dus niet misplaatst. Net zo min als de omschrijving van $|0_e\rangle$ als “vacuüm”, hetgeen verdere ondersteuning vindt in de uitdrukking voor de totale energie:

$$\hat{H} |0_e\rangle \stackrel{(422)}{=} \sum_{\vec{p}} \sum_{\lambda} E_{\vec{p}} \left(\hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(+)} + \hat{n}_{\vec{p},\lambda}^{(-)} - \hat{1} \right) |0_e\rangle = 0 |0_e\rangle. \quad (432)$$

Tenslotte geldt dat

$$\begin{aligned} \left(-i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2 \right) \psi_e(x) &\stackrel{(429)}{=} \langle 0_e | \left(-i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2 \right) \hat{\psi}(x) | 1_e \rangle \\ &\stackrel{\text{Dirac-verg.}}{=} \langle 0_e | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(x) | 1_e \rangle \stackrel{(429)}{=} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_e(x). \end{aligned} \quad (433)$$

Dus $\psi_e(x)$ voldoet aan de Dirac-vergelijking, is normeerbaar en bevat negatieve-energie componenten. Inderdaad is $\psi_e(x)$ derhalve te identificeren met de spinorgolf functie in de 1-elektron Dirac-theorie.

De 1-deeltjes Dirac-theorie hangt derhalve samen met een specifieke 1-(quasi)deeltjesbenadering van de veeldeeltjestheorie. Deze benadering is succesvol zolang er maar geen fluctuaties van orde $m_e c^2$ in de energie optreden op tijdschalen van orde $\Delta t = \mathcal{O}(\hbar/m_e c^2)$ (voor tijdsafhankelijke interacties) of op afstandsschalen van orde $\Delta r = \mathcal{O}(\hbar/m_e c)$ (voor tijdsafhankelijke potentialen). Als dat wel het geval is dan moeten de effecten ten gevolge van de creatie/annihilatie van elektronen en positronen worden meegenomen. Bijvoorbeeld kan er elektron-positron annihilatie optreden, d.w.z. annihilatie van het elektron samen met een positron uit het elektron-vacuüm onder emissie van een foton. Het omgekeerde van dit foton-emissieproces wordt paarcreatie genoemd. Om zulke effecten echt uit te

kunnen rekenen dient dan kwantumveldentheorie te worden gebruikt, waarbij alle deeltjes (elektronen, positronen, fotonen, ...) door middel van veldoperatoren worden beschreven en de veldvergelijkingen inclusief interacties door middel van Lagrangianen worden gerepresenteerd. De interacties hebben dan hun oorsprong in zogenaamde ijksymmetrieën en daarbij behorende ladingsbehoudswetten, zoals behoud van totale elektromagnetische lading in het geval van de elektromagnetische interacties.

A Fourier-reeksen en Fourier-integralen

In dit dictaat wordt veelvuldig gebruik gemaakt van Fourier-decomposities. De relevante aspecten van deze decomposities worden hier kort op een rijtje gezet.

A.1 Fourier-reeksen

Systemen met een ringvormige structuur en systemen die ruimtelijk ingeperkt zijn laten zich beschrijven in termen van toestandsfuncties met een bepaalde periodiciteit. Beschouw hiertoe een 1-dimensionale functie $f(x)$, waarvoor geldt dat de functie en de ruimtelijke afgeleide stapsgewijs continu zijn op het interval $x \in (-L/2, L/2)$ én waarvoor tevens geldt dat aan de ruimtelijke periodiciteitsconditie $f(x) = f(x+L)$ is voldaan. De Fourier-analyse (zie het college Trillingen en Golven) zegt ons dan dat zo'n functie te ontbinden is ten opzichte van een basis van periodieke vlakke golven (Fourier-modes):

$$f_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(2\pi i n x / L) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(i k x) \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) . \quad (\text{A.1})$$

Deze functies herkennen we onmiddellijk als impulseigenfuncties bij de gekwantiseerde impulseigenwaarden $\hbar k$. Voor deze basis geldt de orthonormaliteitsrelatie

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx \exp(i x [k - k']) = \delta_{kk'} , \quad (\text{A.2})$$

waarbij x_0 willekeurig te kiezen is. Omdat x meestal op het interval $(-L/2, L/2)$ wordt beschouwd, is het handig om $x_0 = -L/2$ te nemen. Op basis van de volledighedsrelatie bij de periodieke Fourier-modes wordt de Fourier-ontbinding van de periodieke functie $f(x)$ gegeven door de Fourier-reeks

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{A_n}{\sqrt{L}} \exp(2\pi i n x / L) \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{A_0}{\sqrt{L}} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{A_n + A_{-n}}{\sqrt{L}} \cos(2\pi n x / L) + i \frac{A_n - A_{-n}}{\sqrt{L}} \sin(2\pi n x / L) \right]$$

$$\equiv \frac{B_0}{\sqrt{L}} + \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{L}} \left[B_n \cos(2\pi n x / L) + C_n \sin(2\pi n x / L) \right] , \quad (\text{A.4})$$

met

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-L/2}^{L/2} dx f(x) \exp(-2\pi i n x / L) . \quad (\text{A.5})$$

Periodieke systemen vs opgesloten systemen: het verband tussen periodieke systemen en systemen die opgesloten zitten in een afgesloten ruimte laat zich als volgt inzien. Stel dat

de ondoordringbare randen van de omsluiting gepositioneerd zijn op $x = 0$ en $x = L$, dan zal de toestandsfunctie moeten voldoen aan de continuïteitsconditie $\psi(0) = \psi(L) = 0$ (zie § 2.5). Binnen de omsluiting valt deze functie echter samen met een periodieke functie $f(x) = f(x + 2L)$ die ook nog eens oneven pariteit heeft, zodat $f(x) = -f(-x)$. Door deze extra eis blijven namelijk alleen de staande golven $\propto \sin(\pi n x/L)$ voor $n = 1, 2, \dots$ in de Fourier-reeks (A.4) over, zodat inderdaad $f(0) = f(L) = 0$. De periodiciteitslengte is nu $2L$, terwijl tegelijkertijd n slechts positieve waarden kan doorlopen. Het aantal toegestane gekwantiseerde k -waarden is in dit geval gelijk aan het aantal k -waarden voor een systeem met periodiciteitslengte L , met uitzondering van de afwezigheid van het kwantumgetal $k = 0$. De aanwezigheid van de rand maakt zich dus merkbaar in de afwezigheid van de constante Fourier-mode met kwantumgetal $k = 0$. Voor een afgesloten ruimte is de invloed van de rand slechts dan relevant wanneer de kwantumtoestanden met de laagste absolute waarden van de impuls en dus de grootste de Broglie-golflengten een relevante bijdrage tot de beschrijving van het systeem leveren. Dit treedt bijvoorbeeld op bij bosonische gassen bij lage temperaturen (zie Hst. 2).

A.2 Fourier-integralen

De Fourier-ontbinding van niet-periodieke kwadratisch integreerbare functies wordt verkregen door de continuïmlimiet $L \rightarrow \infty$ te nemen in het bovenstaande periodieke geval. Om deze overgang netjes uit te voeren moet er wel voor gezorgd worden dat de basis van vlakke golven nu op een δ -functie genormeerd is. Daarbij maken we gebruik van het feit dat $k = 2\pi n/L$, zodat voor $L \rightarrow \infty$ het k -spectrum oneindig dicht komt te liggen en de n -sommities overgaan in k -integralen:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk . \quad (\text{A.6})$$

De gezochte basisfuncties zijn de impulseigenfuncties bij de impulseigenwaarden $\hbar k$:

$$f_k(x) = f_n(x) \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \stackrel{(A.1)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) \quad (k \in \mathbb{R}) , \quad (\text{A.7})$$

met orthonormaliteitsrelatie

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(ix[k - k']) = \delta(k - k') . \quad (\text{A.8})$$

De Fourier-reeks gaat over in een Fourier-transformatie (Fourier-integraal):

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp(ikx) \quad \text{en} \quad A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \exp(-ikx) . \quad (\text{A.9})$$

A.2.1 Definitie van de δ -functie

De δ -functie in vergelijking (A.8) wordt gedefinieerd aan de hand van een willekeurige continue testfunctie $g(x)$:

$$\forall_g g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' g(x') \delta(x - x') . \quad (\text{A.10})$$

Omdat $g(x)$ willekeurig is moet $\delta(x - x')$ verdwijnen voor $x \neq x'$. De piek van $\delta(x - x')$ bij $x = x'$ moet zodanig zijn dat de integraal over $\delta(x - x')$ rond $x = x'$ altijd precies één oplevert. De δ -functie bestaat derhalve alleen als een limiet van een reeks functies die steeds sterker gepiekt zijn rond $x = x'$. Het resultaat van zo'n limietprocedure wordt een distributie genoemd. Een voorbeeld hiervan is de integraal

$$\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ikx - \epsilon|k|) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{ix + \epsilon} - \frac{1}{ix - \epsilon} \right) = \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \quad (\epsilon > 0) .$$

Voor afnemende ϵ wordt $\delta_\epsilon(x)$ steeds kleiner voor $x \neq 0$, terwijl tegelijkertijd geldt dat

$$\int_{x_1 < 0}^{x_2 > 0} dx \delta_\epsilon(x) \stackrel{v=x/\epsilon}{=} \frac{1}{\pi} \int_{x_1/\epsilon}^{x_2/\epsilon} \frac{dv}{v^2 + 1} = \frac{1}{\pi} \left(\arctan(x_2/\epsilon) - \arctan(x_1/\epsilon) \right) \xrightarrow{\epsilon \downarrow 0} 1 .$$

De volgende representaties voor de δ -functie zullen worden gebruikt in dit dictaat:

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ikx) , \quad (\text{A.11})$$

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{\theta(x + \epsilon) - \theta(x)}{\epsilon} = \theta'(x) , \quad (\text{A.12})$$

waarbij $\theta(x)$ de gebruikelijke stapfunctie is.

Voor de δ -functie gelden de volgende handige rekenregels:

$$g(x) \delta(x - c) = g(c) \delta(x - c) , \quad (\text{A.13})$$

alsmede

$$\delta(h(x)) = \sum_j \frac{1}{|h'(x_j)|} \delta(x - x_j) \quad \text{voor } h(x_j) = 0 \text{ en } h'(x_j) \neq 0 , \quad (\text{A.14})$$

vooropgesteld dat $h(x)$ voldoende net is rond de wortels van de vergelijking $h(x) = 0$.

In drie dimensies wordt tenslotte de volgende compacte notatie gebruikt:

$$\delta(\vec{r}) \equiv \delta(x) \delta(y) \delta(z) \Rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \stackrel{(\text{A.11})}{=} \delta(\vec{r}) . \quad (\text{A.15})$$

B Eigenschappen van de Pauli-spinmatrices

Omdat de QM overspoeld wordt met spin-1/2 deeltjes (zoals elektronen, nucleonen, etc.) zetten we de eigenschappen van de Pauli-spinmatrices

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

even apart op een rijtje. Deze 2×2 matrices zijn direct gerelateerd aan de spinoperator \hat{S} voor spin-1/2 deeltjes via de relatie

$$\vec{\sigma} \equiv \frac{2}{\hbar} \hat{S}. \quad (\text{B.2})$$

Uit de commutatoralgebra voor de spinoperator en het feit dat \hat{S}_z eigenwaarden $\pm \hbar/2$ heeft zijn de volgende eigenschappen af te leiden voor de Pauli-spinmatrices:

$$\begin{aligned} \sigma_k &= \sigma_k^\dagger, \quad \text{Tr}(\sigma_k) = 0, \quad \det(\sigma_k) = -1 \quad (k = x, y, z) \\ \text{en} \quad [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z \quad (\text{cyclisch}). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Als we de eenheidsmatrix in de spinruimte aanduiden met I , dan gelden de volgende additionele eigenschappen voor de Pauli-spinmatrices:

$$\begin{aligned} \sigma_k^2 &= I \quad (k = x, y, z) \quad \text{en} \quad \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z \quad (\text{cyclisch}) \\ \Rightarrow \quad \{\sigma_j, \sigma_k\} &= 2\delta_{jk} I \quad (j, k = x, y, z). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Aan de hand hiervan kunnen de relevante spooreigenschappen in de spinruimte worden gecompleteerd tot

$$\text{Tr}(I) = 2, \quad \text{Tr}(\sigma_j) \stackrel{(B.3)}{=} 0 \quad \text{en} \quad \text{Tr}(\sigma_j \sigma_k) \stackrel{(B.4)}{=} 2\delta_{jk} \quad (j, k = x, y, z). \quad (\text{B.5})$$

Verder geldt de volgende identiteit voor willekeurige 3-dimensionale vectoren \vec{A} en \vec{B} :

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \frac{1}{2} \sum_{j,k} A_j B_k ([\sigma_j, \sigma_k] + \{\sigma_j, \sigma_k\}) \stackrel{(B.3),(B.4)}{=} (\vec{A} \cdot \vec{B}) I + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}), \quad (\text{B.6})$$

waarbij gebruikt is dat

$$\sum_{j,k} \frac{A_j B_k}{2} [\sigma_j, \sigma_k] \stackrel{(B.3)}{=} i\sigma_z (A_x B_y - A_y B_x) + i\sigma_x (A_y B_z - A_z B_y) + i\sigma_y (A_z B_x - A_x B_z).$$

Samen met de eenheidsmatrix vormen de Pauli-spinmatrices een basis van 2×2 matrices, derhalve kan een willekeurige 2×2 matrix A worden ontbonden als

$$A = A_0 I + \vec{A} \cdot \vec{\sigma} \quad (A_0 \in \mathbb{C} \quad \text{en} \quad A_{x,y,z} \in \mathbb{C}). \quad (\text{B.7})$$

C Multiplicatorenmethode van Lagrange

Stel we willen de extrema bepalen van een grootheid $F(q_1, \dots, q_N)$ als tegelijkertijd moet worden voldaan aan de randvoorwaarde $f(q_1, \dots, q_N) = C$. In dat geval kan gebruik worden gemaakt van de zogenaamde multiplicatorenmethode van Lagrange. Dit houdt in dat er gezocht moet worden naar oplossingen van de variationele vergelijking

$$\delta \left(F(q_1, \dots, q_N) - \lambda(q_1, \dots, q_N) \{ f(q_1, \dots, q_N) - C \} \right) = 0, \quad (\text{C.1})$$

waarbij δ staat voor het onafhankelijk variëren van zowel de coördinaten q_1, \dots, q_N als de Lagrange-multiplier λ . Dit resulteert in de vergelijking

$$\sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial q_j} - (f - C) \frac{\partial \lambda}{\partial q_j} - \lambda \frac{\partial f}{\partial q_j} \right) \delta q_j - (f - C) \delta \lambda = 0 \quad \forall \delta \lambda, \delta q_j$$

$$\Rightarrow f(q_1, \dots, q_N) = C \quad \text{en} \quad \frac{\partial F}{\partial q_j} = \lambda \frac{\partial f}{\partial q_j} \quad (j = 1, \dots, N). \quad (\text{C.2})$$

Inderdaad is op deze manier automatisch aan de vereiste randvoorwaarde voldaan. Door nu de gevonden oplossing(en) voor q_1, \dots, q_N in de randvoorwaarde $f(q_1, \dots, q_N) = C$ in te vullen is er tenslotte een verband te leggen tussen de Lagrange-multiplier λ en de constante C . De hier beschreven methode wordt in het dictaat gebruikt bij het maximaliseren van de entropie van ensembles in thermisch evenwicht en bij het zoeken naar de grondtoestandsenergie van veeldeeltjessystemen.

D Speciale relativiteit: conventies en definities

In deze appendix worden wat conventies vastgelegd met betrekking tot het werken in een vlakke tijd–ruimte (Minkowski-ruimte). De tijdcoördinaat t en ruimtecoördinaten \vec{r} van een deeltje worden samengevoegd in een contravariante plaatsvector

$$x^\mu : \quad x^0 \equiv ct \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \equiv \vec{x} \equiv \vec{r}, \quad (\text{D.1})$$

waarbij $\mu = 0, 1, 2, 3$ de Minkowski-index is. Ook de energie E en impuls \vec{p} worden gecombineerd in een contravariante impulsvector

$$p^\mu : \quad p^0 \equiv E/c = \frac{mc}{\sqrt{1 - \vec{v}^2/c^2}} \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} p^1 \\ p^2 \\ p^3 \end{pmatrix} \equiv \vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - \vec{v}^2/c^2}}, \quad (\text{D.2})$$

voor een deeltje met rustmassa m en snelheid $\vec{v} = d\vec{r}/dt$.

De metrische tensor in de Minkowski-ruimte wordt gegeven door

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \emptyset \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ \emptyset & & & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.3})$$

Uit de contravariante vector a^μ kan dan de bijbehorende covariante vector

$$a_\mu \equiv g_{\mu\nu} a^\nu \quad (\text{D.4})$$

worden afgeleid, gebruik makende van de Einstein-sommatieconventie die zegt dat een herhaalde Minkowski-index automatisch de sommatie over deze index inhoudt. Tenslotte wordt het inwendig product (scalair product)

$$x \cdot y \equiv x^\mu y_\mu = x_\mu y^\mu = g_{\mu\nu} x^\mu y^\nu = x^0 y^0 - \vec{x} \cdot \vec{y} \quad (\text{D.5})$$

ingevoerd, hetgeen natuurlijk niet positief definit is ten gevolge van de tijd-ruimte metriek $g_{\mu\nu}$ in de Minkowski-ruimte.

Referentiestelsels waarbinnen deeltjes die geen kracht ondervinden eenparig (langs een rechte wereldlijn) bewegen worden inertiaalsystemen genoemd.
Relativiteitsprincipe: alle inertiaalsystemen zijn fysisch gezien equivalent en de lichtsnelheid is hetzelfde in elk inertiaalsysteem.

Dit relativiteitsprincipe vertaalt zich in de transformatiekarakteristiek van de plaatsvectoren bij overgang van een inertiaalsysteem S met oorsprong O naar een inertiaalsysteem S' met oorsprong O' . Neem aan dat $O = O'$ op het tijdstip $t = 0$ en geef de bijbehorende coördinatentransformatie als volgt aan:

$$S : x^\mu \quad \rightarrow \quad S' : x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu. \quad (\text{D.6})$$

De coördinatentransformatie (Lorentz-transformatie) Λ moet lineair zijn om in afwezigheid van krachten eenparige bewegingen op eenparige bewegingen af te beelden. Zo'n coördinatentransformatie kan worden gedefinieerd door te eisen dat $x^2 \equiv x \cdot x$ niet verandert tijdens de transformatie. Een deeltje dat zich vanaf $t = 0$ met de lichtsnelheid vanuit O verplaatst, d.w.z. $c^2 = \vec{v}^2 = \vec{x}^2/t^2 \Rightarrow x^2 = 0$, heeft dan automatisch ook de lichtsnelheid in elk ander inertiaalsysteem S' , want $x'^2 = 0 \Rightarrow \vec{v}'^2 = \vec{x}'^2/t'^2 = c^2$. Uit deze eis leiden we af dat

$$\forall_x x^2 = x'^2 \xrightarrow{(D.5),(D.6)} \forall_x g_{\rho\sigma} x^\rho x^\sigma = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma g_{\mu\nu} x^\rho x^\sigma \Rightarrow \Lambda^\mu_\rho \Lambda_{\mu\sigma} = g_{\rho\sigma}. \quad (\text{D.7})$$

Hieruit volgt onmiddellijk dat $(\Lambda^0_0)^2 = 1 + (\Lambda^1_0)^2 + (\Lambda^2_0)^2 + (\Lambda^3_0)^2 \geq 1$. De inverse van de Lorentz-transformatie wordt dan

$$\Lambda^{\mu\rho} \Lambda_{\mu\sigma} = g^\rho_\sigma = \begin{pmatrix} 1 & & & \emptyset \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ \emptyset & & & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \Lambda^{\mu\rho} = (\Lambda^{-1})^{\rho\mu}, \quad \det(\Lambda) = \pm 1. \quad (\text{D.8})$$

De Lorentz-transformaties laten zich als volgt onderverdelen. Ten eerste zijn er de zogenaamde eigenlijke orthochrone Lorentz-transformaties (of kortweg: “de Lorentz-transformaties”), waarvoor geldt dat $\det(\Lambda) = +1$ en $\Lambda^0_0 \geq 1$. Deze transformaties omvatten:

- ruimtelijke rotaties, rond drie onafhankelijke ruimtelijke assen.
- Lorentz-boosts, in drie onafhankelijke ruimtelijke richtingen. Voorbeeld: S' beweegt met eenparige snelheid $v = \beta c$ in de x^1 -richting ten opzichte van S . In dat geval geldt

$$\Lambda^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{1-\beta^2} & -\beta/\sqrt{1-\beta^2} & 0 & 0 \\ -\beta/\sqrt{1-\beta^2} & 1/\sqrt{1-\beta^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \cosh \eta & -\sinh \eta & 0 & 0 \\ -\sinh \eta & \cosh \eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{D.9})$$

$$\xrightarrow{\beta \ll 1, x^0=ct} \text{ niet-relativistische Galilei-transformatie : } \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v/c & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Hieraan kunnen nog twee klassen van Lorentz-transformaties worden toegevoegd, namelijk transformaties met $\det(\Lambda) = -1$ en $\Lambda^0_0 \geq 1$, zoals de pariteitstransformatie die optreedt bij spiegeling van de ruimte, en transformaties met $\Lambda^0_0 \leq -1$, zoals de tijdomkeertransformatie. Samengevoegd leidt dit tot de zogenaamde homogene Lorentz-transformaties, waarbij een willekeurige transformatie te schrijven is als product van rotaties, boosts, ruimtespiegeling en tijdomkeer. Ruimtespiegeling en tijdomkeer hebben een aparte status:

- vrije-deeltjessystemen zijn invariant onder deze transformaties, maar in aanwezigheid van de zogenaamde zwakke wisselwerkingen gaat deze invariantie verloren;
- deze transformaties zijn niet continu met de eenheidstransformatie te verbinden, in tegenstelling tot de eigenlijke orthochrone Lorentz-transformaties die een continue groep vormen waardoor een eindige transformatie te schrijven is als een oneindige serie infinitesimale transformaties. Ruimtespiegeling en tijdomkeer incorporeren feitelijk de mogelijke discrete Lorentz-transformaties.

Uiteindelijk moet ook nog de mogelijkheid worden beschouwd dat de oorsprong O' verschoven is ten opzichte van O :

$$\begin{aligned} x'^\mu &= \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu \quad (\text{kortweg: } x' = \Lambda x + a), \quad \text{met } a^\mu \text{ een constante 4-vector} \\ \Rightarrow x^\mu &= (\Lambda^{-1})^\mu_\nu (x' - a)^\nu \quad (\text{kortweg: } x = \Lambda^{-1}[x' - a]). \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

Alle transformaties samen vormen de zogenaamde inhomogene Lorentz-transformaties, die ook wel Poincaré-transformaties worden genoemd. Ze zijn gedefinieerd aan de hand van de vergelijking $(x - y)^2 = (x' - y')^2$.

Voor het construeren van een relativistische golfvergelijking, die dezelfde vorm heeft in alle inertiaalsystemen, hebben we een aantal typen grootheden (onafhankelijk van plaats en tijd) en velden (afhankelijk van plaats en tijd) nodig.

- Scalaire grootheden: grootheden die hetzelfde zijn in elk inertiaalsysteem, zoals bijvoorbeeld $p^2 = p \cdot p$ en de lichtsnelheid c .

- Scalaire velden: velden met het volgende transformatiekarakteristiek

$$S : \phi(x) \rightarrow S' : \phi'(x') = \phi(x) \stackrel{(D.10)}{=} \phi(\Lambda^{-1}[x' - a]).$$

- Contravariante vectorgrootheden: 4-vectoren die transformeren als $A'^\mu = \Lambda^\mu_\nu A^\nu$, zoals bijvoorbeeld p^μ .

- Contravariante vectorvelden: velden met het volgende transformatiekarakteristiek

$$S : A^\mu(x) \rightarrow S' : A'^\mu(x') = \Lambda^\mu_\nu A^\nu(x) \stackrel{(D.10)}{=} \Lambda^\mu_\nu A^\nu(\Lambda^{-1}[x' - a]).$$

- Covariante vectorgrootheden: 4-vectoren die transformeren als

$$A'_\mu = g_{\mu\rho} A'^\rho = g_{\mu\rho} \Lambda^\rho_\sigma A^\sigma = g_{\mu\rho} \Lambda^\rho_\sigma g^{\sigma\nu} A_\nu = \Lambda_\mu^\nu A_\nu \stackrel{(D.8)}{=} (\Lambda^{-1})^\nu_\mu A_\nu.$$

- Covariante vectorvelden: velden met het volgende transformatiekarakteristiek

$$S : A_\mu(x) \rightarrow S' : A'_\mu(x') = g_{\mu\rho} A'^\rho(x') = g_{\mu\rho} \Lambda^\rho_\sigma A^\sigma(x) = g_{\mu\rho} \Lambda^\rho_\sigma g^{\sigma\nu} A_\nu(x) \\ \stackrel{(D.10)}{=} \Lambda_\mu^\nu A_\nu(\Lambda^{-1}[x' - a]) \stackrel{(D.8)}{=} (\Lambda^{-1})^\nu_\mu A_\nu(\Lambda^{-1}[x' - a]).$$

Voorbeelden: de gradiënt in de Minkowski-ruimte,

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Rightarrow \partial_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{en} \quad \begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix} = \vec{\nabla}, \quad (D.11)$$

is een covariante vectorgrootheid omdat

$$\partial'_\mu = \frac{\partial}{\partial x'^\mu} = \left(\frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \right) \frac{\partial}{\partial x^\nu} \stackrel{(D.10)}{=} (\Lambda^{-1})^\nu_\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \stackrel{(D.8)}{=} \Lambda_\mu^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} = \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu.$$

Daarmee is $\partial^\mu = g^{\mu\nu} \partial_\nu$ automatisch een contravariante vectorgrootheid. Verder geldt

- $A_\mu(x) \equiv \partial_\mu \phi(x)$ is een covariant vectorveld als $\phi(x)$ een scalair veld is.

$$\text{Bewijs: } A'_\mu(x') = \partial'_\mu \phi'(x') = \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu \phi(x) = \Lambda_\mu^\nu A_\nu(x).$$

- $\phi(x) \equiv A_\mu(x) B^\mu(x)$ is een scalair veld als A en B vectorvelden zijn.

$$\text{Bewijs: } \phi'(x') = A'_\mu(x') B'^\mu(x') = A_\nu(x) (\Lambda^{-1})^\nu_\mu \Lambda^\mu_\rho B^\rho(x) = A_\nu(x) B^\nu(x) = \phi(x).$$

- $\phi(x) \equiv \partial_\mu A^\mu(x)$ is een scalair veld als $A^\mu(x)$ een contravariant vectorveld is (zie vorig voorbeeld).

E Elektromagnetische orthonormaliteitsrelaties

Beschouw de periodieke elektromagnetische Fourier-componenten

$$\vec{u}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) , \quad (\text{E.1})$$

waarbij de golfvector \vec{k} de volgende gekwantiseerde waarden kan aannemen:

$$\vec{k} \equiv k \vec{e}_k \equiv \frac{\omega_k}{c} \vec{e}_k = \frac{2\pi}{L} \vec{\nu} , \quad \text{met} \quad \nu_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \wedge \vec{\nu} \neq \vec{0} . \quad (\text{E.2})$$

De polarisatievectoren $\vec{e}_1(\vec{e}_k)$ en $\vec{e}_2(\vec{e}_k)$ vormen samen met de propagatierichting \vec{e}_k een orthonormaal rechtshandig assenstelsel:

$$\begin{aligned} \vec{e}_1(\vec{e}_k) \times \vec{e}_2(\vec{e}_k) &= \vec{e}_k \quad , \quad \vec{e}_2(\vec{e}_k) \times \vec{e}_k = \vec{e}_1(\vec{e}_k) \quad , \quad \vec{e}_k \times \vec{e}_1(\vec{e}_k) = \vec{e}_2(\vec{e}_k) , \\ \vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \cdot \vec{e}_{\lambda'}(\vec{e}_k) &= \delta_{\lambda,\lambda'} . \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

Met behulp van de orthonormaliteitsrelatie voor periodieke Fourier-modes:

$$\frac{1}{V} \int_V d\vec{r} \exp(i\vec{r} \cdot [\vec{k} - \vec{k}']) = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} , \quad (\text{E.4})$$

kunnen dan de volgende identiteiten worden afgeleid voor de Fourier-componenten:

$$\int_V d\vec{r} \vec{u}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) \cdot \vec{u}_{\vec{k}',\lambda'}^*(\vec{r}) \stackrel{(\text{E.4})}{=} \vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \cdot \vec{e}_{\lambda'}(\vec{e}_k) \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \stackrel{(\text{E.3})}{=} \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} , \quad (\text{E.5})$$

$$\begin{aligned} \int_V d\vec{r} \left(\vec{e}_k \times \vec{u}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) \right) \cdot \left(\vec{e}_{k'} \times \vec{u}_{\vec{k}',\lambda'}^*(\vec{r}) \right) &\stackrel{(\text{E.4})}{=} \left(\vec{e}_k \times \vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \right) \cdot \left(\vec{e}_{k'} \times \vec{e}_{\lambda'}(\vec{e}_k) \right) \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \\ &\stackrel{(\text{E.3})}{=} \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} , \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

$$\begin{aligned} \int_V d\vec{r} \vec{u}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) \times \left(\vec{e}_{k'} \times \vec{u}_{\vec{k}',\lambda'}^*(\vec{r}) \right) &\stackrel{(\text{E.4})}{=} \vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \times \left(\vec{e}_{k'} \times \vec{e}_{\lambda'}(\vec{e}_k) \right) \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \\ &\stackrel{(\text{E.3})}{=} \vec{e}_k \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} , \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

$$\begin{aligned} \int_V d\vec{r} \vec{u}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) \times \vec{u}_{\vec{k}',\lambda'}^*(\vec{r}) &\stackrel{(\text{E.4})}{=} \vec{e}_\lambda(\vec{e}_k) \times \vec{e}_{\lambda'}(\vec{e}_k) \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \\ &\stackrel{(\text{E.3})}{=} \vec{e}_k (\delta_{\lambda,1} \delta_{\lambda',2} - \delta_{\lambda,2} \delta_{\lambda',1}) \delta_{\vec{k},\vec{k}'} . \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

Index

- γ -matrices van Dirac, 122
- absorptie, 147
- additieve veeldeeltjesgrootheden
 - 1-deeltjes grootheden, 16
 - 2-deeltjes grootheden, 19
- annihilatie-operator, 7
- anticommutatierelaties, 11, 14
- anticommutator, 10
- atomair warmtebad, 152

- bewegingsvergelijking van Heisenberg, 21
- bezettingsgetallen, 6
 - distributies, 89
- bezettingsgetalrepresentatie, 6
- bindingsenergie, 76
 - voor kernen, 83
- Bogolyubov-transformatie, 38
- Bose–Einstein condensatie, 91, 95
 - kritieke temperatuur, 94
- Bose-gas, 94
 - gedegeneerd, 95
- Bose–Einstein statistiek, 2, 88
- bosonen, 2, 10
- bosonische Bogolyubov-transformatie, 39

- Casimir-effect, 142
- Chandrasekhar limiet, 87
- chemische potentiaal, 69, 100
- coherente toestand, 28
- commutatierelaties, 10, 13
- Compton-golflengte, 132
- constante van Boltzmann, 61
- continuïteitsvergelijking, 116, 121
- continuümlimiet, 72, 77
 - voor het e.m. veld, 143
- contravariante vectorgrootheden, viii
- contravariante vectorvelden, viii

- Cooper-instabiliteit, 47
- Coulomb-condities, 135
- Coulomb-ijk, 135
- covariante vectorgrootheden, viii
- covariante vectorvelden, viii
- creatie-operator, 6

- d’Alembertiaan, 114
- Darwin-term, 130
- de Broglie hypothese, 113
- deeltjes–golf dualiteit, 113, 155
- deeltjesdichtheidsoperator, 14
- deeltjesinterpretatie, 24
- dichtheidsmatrix, 51, 54
- dichtheidsoperator, 54
 - bewegingsvergelijking, 60
- dipoolselectieregels, 151
- Dirac-representatie, 121
- Dirac-spinoperator, 125
- Dirac-vergelijking, 119
 - anticommutatierelaties, 160
 - Dirac-spinoren, 120
 - energiedichtheid, 159
 - spin-1/2 antideeltjes, 161
 - spin-1/2 deeltjes, 125, 161
 - totale ladingsoperator, 161
 - veldoperator, 160
- Dirac-zee, 126
- doos, 70
- drukionisatie, 85

- elektrische dipoolbenadering, 150
- elektromagnetisme
 - 4-stroom, 134
 - 4-vectorpotentiaal, 128, 134
 - commutatierelaties, 139
 - klassieke limiet, 148
 - spin-1 deeltjes, 140

veldoperator, 139
 elektron–gat excitatie, 46
 elektrongas, 78
 emissie, 147

- gestimuleerd, 148
- spontaan, 148
 - levensduur, 151

 energie-kwanta, 25

- fotonen, 140

 energiekwanta, 24
 ensemblegemiddelde, 54

- tijdsevolutie, 60

 ensembles

- gemengd, 52, 58
- grootkanoniek, 68
- kanoniek, 63
- microkanoniek, 66
- ongepolariseerd, *zie* volledig random
- puur, 50, 58, 60
- volledig random, 59, 60

 entropie, 61
 equipartitie van energie, 65
 Fermi-bol, 77
 Fermi-energie, 45, 75, 77, 90
 Fermi-gas, 70, 99

- gedegeneerd, 99
- volledig gedegeneerd, 75, 100

 Fermi-impuls, 77
 Fermi-oppervlak, 77
 Fermi-temperatuur, 76
 Fermi-zee, 46, 75
 Fermi–Dirac statistiek, 2, 88
 fermionen, 2, 11
 fermionische Bogolyubov-transformatie, 48
 fijnstructuur, 131
 Fock-ruimte, 5
 fonteineffect, 44
 fotonen, 140
 fotongas, 152
 fotonstatistiek, 152
 fotontoestanden, 141
 Fourier-integraal, ii
 Fourier-modes, i
 Fourier-reeks, i
 Fourier-transformatie, ii
 g-factor, 130
 gat, 48
 gatentheorie, 46
 geleidingselektronen, 78
 gelocaliseerd, 1
 gemiddelde bezettingsgetallen, 89
 gesloten systeem, 63
 golfvector, 72, 77, 136
 Heisenbergbeeld, 21
 heliceit, 128, 140
 helium I, 43
 helium II, 43
 heliumfilm, 44
 ideaal gas, 3, 91
 identieke deeltjes, 1
 ijkvrijheid, 135
 incoherent mengsel, 52
 inertiaalsysteem, vi
 intrinsiek magnetisch dipoolmoment, 130
 intrinsieke vrijheidsgraden, 115
 klassiek gas, 93
 Klein–Gordon vergelijking, 114

- commutatierelaties, 158
- energiedichtheid, 156
- scalair veld, 116
- scalaire veldoperator, 157
- spin-0 antideeltjes, 157
- spin-0 deeltjes, 116, 157
- totale ladingsoperator, 158

 ladingsconjugatie, 154

ladingsgetal, 81
 Lagrange-multiplier, v
 lange-afstandscorrelaties, 97
 linksdraaiend, 141
 Liouville-vergelijking, 60
 localiteit, 158
 long-range order, 97
 Lorentz-transformaties, vi
 eigenlijke Lorentz-transformaties, vii
 homogeen, vii
 Lorentz-boosts, vii
 orthochroon, vii
 ruimtelijke rotaties, vii
 loweringoperator, 24

 macroscopisch bezet, 95
 magnetisatie, 66
 magnetisatiedichtheid, 101
 massagetal, 81
 Maxwell–Boltzmann statistiek, 88
 Maxwell-vergelijkingen, 133
 microcausaliteit, 159
 minimale substitutie, 128, 145
 Minkowski-ruimte, v
 contravariante vector, v
 covariante vector, vi
 Einstein-sommatieconventie, vi
 inwendig product, vi
 metrische tensor, v
 Minkowski-index, v
 multiplicatorenmethode van Lagrange, v

 neutronenster, 88
 neutrongas, 88
 niet-interagerende veeldeeltjessystemen, 3
 normaalordering, 20, 142
 nucleonverdeling, 81
 nulpuntsenergie, 25, 142

 observabelen voor identieke deeltjes, 1
 onderscheidbaar, 1

 ononderscheidbaar, 1
 ordeparameter, 97
 oscillatoren
 bosonische kwanta, 25, 27
 gedwongen, 26
 vrij, 24
 overlappende golffuncties, 1

 paar-teloperator, 20
 paramagnetische susceptibiliteit, 66, 102
 partitiefunctie
 grootkanoniek, 69
 kanoniek, 64
 Pauli-spinmatrices, iv, 57
 Pauli-uitsluitingsprincipe, 5, 12
 Pauli-vergelijking, 130
 periodieke vlakke golven, i
 permutatie-operator, 2
 persistent current, 43
 plasma, 78
 Poincaré-transformaties, vii
 polarisatie voor fotonen
 polarisatievector, 136
 polarisatie voor spin-1/2 deeltjes
 polarisatiegraad, 58
 polarisatierichting, 58
 polarisatievector, 57
 pure toestand, 50, 55

 quasi-deeltjes, 27, 38, 41, 111
 quasi-deeltjesvacuüm, 28, 108

 raisingoperator, 24
 rechtsdraaiend, 141
 relativistische kwantumveldentheorie, 155
 relativiteitsprincipe, vi, 113
 reservoir, 67
 Rollin film, 44

 saturatie, 84
 scalaire grootheden, viii

scalaire potentiaal, 133
 scalaire velden, viii
 Schrödinger-veld, 23
 Schrödingerbeeld, 21
 slash-notatie, 122
 Slater-determinant, 5
 spin–baan koppeling, 130
 spin–statistiek theorema, 162
 statistisch gewicht, 54
 superfluiditeit, 32

- kritische snelheid, 32
- Landau-criterium, 33

 supergeleiding, 104

- BCS theorie, 104
 - Cooper-instabiliteit, 106, 109
 - Cooper-paar, 105
 - energiegat, 108, 111
 - gap equation, 109, 112
 - grondtoestandsfunctie, 108
 - kritische temperatuur, 110
 - mean field approximation, 110
 - ordeparameter, 109
 - quasi-deeltjes, 111
 - spectrum, 108
 - zwakke-koppelinglimiet, 109

 superlek, 43
 symmetrisatie-postulaat, 1

 teloperatoren, 6, 7
 temperatuur, 64
 thermisch evenwicht, 62
 thermische de Broglie-golflengte, 92
 Thomas–Fermi model, 81
 toestandsdichtheid, 72

- voor fotonen, 142

 toestandsfuncties

- producttoestandsfunctie, 4
- volledig antisymmetrisch, 2, 14
- volledig symmetrisch, 2, 14

 totale teloperator, 8, 14

 transversaliteit, 136
 tweede kwantisatie, 19, 23, 145, 154–162
 two-fluid model, 43

 uitvriezen van vrijheidsgraden, 91

 vacuümtoestand, 6
 vectorpotentiaal, 133
 veldoperator, 15
 verwisselingsontaarding, 1
 vluchtigheid, 69

 warmtebad, 63
 warmtecapaciteit, 93
 wet van Curie, 66
 wet van Planck, 152
 wet van Stefan–Boltzmann, 153
 witte dwerg, 85

 zwart lichaam, 152