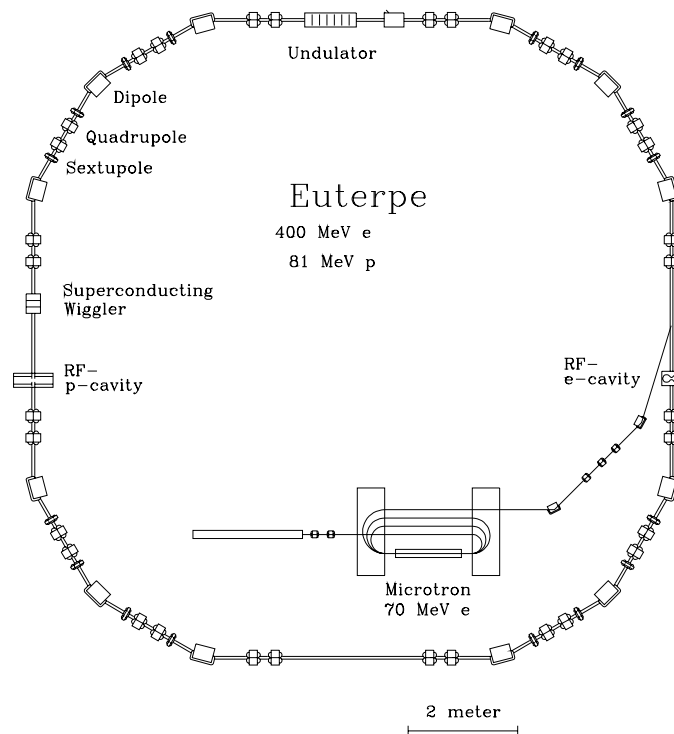


# Fysisch Formularium

Door ir. J.C.A. Wevers



Geachte lezer,

Dit document is een 108 pagina's tellend natuurkundig formuleboek op universitair niveau. Het is bedoeld als naslagwerk voor iedereen die veel formules op moet zoeken.

Dit document is, evenals een Engelstalige versie, te verkrijgen bij de auteur, Johan Wevers ([johanw@xs4all.nl](mailto:johanw@xs4all.nl)).

Het is tevens te vinden op het WWW op <http://www.xs4all.nl/~johanw/index.html>. Hier zijn tevens Postscript en PDF versies te vinden.

Het Fysisch Formularium werd gemaakt met behulp van  $\text{tE}\text{X}$  en  $\text{L}\text{A}\text{T}\text{E}\text{X}$  versie 2.09.

Het kan voorkomen dat Uw implementatie van  $\text{L}\text{A}\text{T}\text{E}\text{X}$  problemen heeft met het Fysisch Formularium. De meest waarschijnlijke bron van problemen is het gebruik van grote bezier curven of de  $\text{e}\text{m}\text{T}\text{E}\text{X}$  specials in sommige figuren. Indien U de layout waarin vectoren vet weergegeven worden prefereert kunt U het commentaar voor het alternatieve  $\backslash\text{vec}$  commando in de  $\text{T}\text{E}\text{X}$  file weghalen en hercompileren.

Ik houd me altijd aanbevolen voor opmerkingen en suggesties over het Fysisch Formularium.

De Creative Commons Naamsvermelding 3.0 Nederland Licentie is van toepassing op dit werk. Ga naar <http://creativecommons.org/licenses/by/3.0/nl/> of stuur een brief naar Creative Commons, 171 Second Street, Suite 300, San Francisco, California, 94105, VS om deze licentie te bekijken.

Johan Wevers

---

# Inhoudsopgave

<b>Inhoudsopgave</b>	<b>I</b>
<b>Natuurconstanten</b>	<b>1</b>
<b>1 Mechanica</b>	<b>2</b>
1.1 Puntkinematica in een vast stelsel	2
1.1.1 Definities	2
1.1.2 Poolcoördinaten	2
1.2 Relatieve beweging	2
1.3 Puntdynamica in een vast stelsel	2
1.3.1 Kracht, impuls(moment), energie	2
1.3.2 Conservatief krachtveld	3
1.3.3 Gravitatie	3
1.3.4 Baanvergelijkingen	3
1.3.5 De viriaalstelling	4
1.4 Puntdynamica in een bewegend stelsel	4
1.4.1 Schijnkrachten	4
1.4.2 Tensorvorm	5
1.5 Dynamica van massapuntverzamelingen	5
1.5.1 Het massamiddelpunt	5
1.5.2 Botsingen	6
1.6 Dynamica van starre lichamen	6
1.6.1 Traagheidsmoment	6
1.6.2 Hoofdassen	6
1.6.3 Tijdfhankelijkheid	6
1.7 Variatierekening, Hamilton en Lagrange mechanica	7
1.7.1 Variatierekening	7
1.7.2 Hamiltonmechanica	7
1.7.3 Beweging om evenwicht, linearisatie	7
1.7.4 Faseruimte, stelling van Liouville	8
1.7.5 Genererende functies	8
<b>2 Elektriciteit &amp; Magnetisme</b>	<b>9</b>
2.1 De Maxwell vergelijkingen	9
2.2 Kracht en potentiaal	9
2.3 IJktransformaties	10
2.4 Energie van het elektromagnetische veld	10
2.5 Elektromagnetische golven	10
2.5.1 Elektromagnetische golven in vacuüm	10
2.5.2 Elektromagnetische golven in materie	11
2.6 Multipolen	11
2.7 Elektrische stromen	11
2.8 Ontpolariserend veld	12
2.9 Mengsels van materialen	12

<b>3</b>	<b>Relativiteitstheorie</b>	<b>13</b>
3.1	De speciale relativiteitstheorie . . . . .	13
3.1.1	De Lorentztransformatie . . . . .	13
3.1.2	Rood en blauw verschuiving . . . . .	14
3.1.3	De energie-impuls tensor en de veldtensor . . . . .	14
3.2	De algemene relativiteitstheorie . . . . .	14
3.2.1	Riemannse meetkunde, de Einstein tensor . . . . .	14
3.2.2	Het lijnelement . . . . .	15
3.2.3	Planeetbanen en de periheliumverschuiving . . . . .	16
3.2.4	De baan van een foton . . . . .	17
3.2.5	Gravitatiegolven . . . . .	17
3.2.6	Kosmologie . . . . .	17
<b>4</b>	<b>Trillingen</b>	<b>18</b>
4.1	Harmonische trillingen . . . . .	18
4.2	Mechanische trillingen . . . . .	18
4.3	Elektrische trillingen . . . . .	19
4.4	Golfgedrag in lange leidingen . . . . .	19
4.5	Gekoppelde kringen en transformatoren . . . . .	19
4.6	Slingers . . . . .	19
<b>5</b>	<b>Golven</b>	<b>20</b>
5.1	De golfvergelijking . . . . .	20
5.2	Oplossingen van de golfvergelijking . . . . .	20
5.2.1	Vlakke golven . . . . .	20
5.2.2	Sferische golven . . . . .	21
5.2.3	Cylindrische golven . . . . .	21
5.2.4	De algemene oplossing in 1 dimensie . . . . .	21
5.3	De stationaire fasemethode . . . . .	21
5.4	Greense functies voor het beginwaardenprobleem . . . . .	22
5.5	Golfpijpen en trilhouten . . . . .	22
5.6	Niet-lineaire golfvergelijkingen . . . . .	23
<b>6</b>	<b>Optica</b>	<b>24</b>
6.1	Lichtbreking . . . . .	24
6.2	Paraxiale geometrische optica . . . . .	24
6.2.1	Lenzen . . . . .	24
6.2.2	Spiegels . . . . .	25
6.2.3	Hoofdvlakken . . . . .	25
6.2.4	Vergroting . . . . .	25
6.3	Matrixmethoden . . . . .	26
6.4	Afbeeldingsfouten . . . . .	26
6.5	Reflectie en transmissie . . . . .	26
6.6	Polarisatie . . . . .	27
6.7	Prisma's en dispersie . . . . .	28
6.8	DiffRACTIE . . . . .	28
6.9	Bijzondere optische effecten . . . . .	29
6.10	De Fabry-Perot interferometer . . . . .	29
<b>7</b>	<b>Statistische fysica</b>	<b>30</b>
7.1	Vrijheidsgraden . . . . .	30
7.2	De energieverdelingsfunctie . . . . .	30
7.3	Druk op een wand . . . . .	31
7.4	De toestandsvergelijking . . . . .	31
7.5	Botsingen tussen moleculen . . . . .	32

7.6	Wisselwerking tussen moleculen . . . . .	32
<b>8</b>	<b>Thermodynamica</b>	<b>33</b>
8.1	Mathematische inleiding . . . . .	33
8.2	Definities . . . . .	33
8.3	Soortelijke warmte . . . . .	33
8.4	De 3 hoofdwetten . . . . .	34
8.5	Toestandsfuncties en Maxwellrelaties . . . . .	34
8.6	Processen . . . . .	35
8.7	Maximale arbeid . . . . .	36
8.8	Fase-overgangen . . . . .	36
8.9	Thermodynamische potentiaal . . . . .	37
8.10	Ideale mengsels . . . . .	37
8.11	Voorwaarden voor evenwicht . . . . .	37
8.12	Statistische basis voor de thermodynamica . . . . .	38
8.13	Toepassingen op andere systemen . . . . .	38
<b>9</b>	<b>Transportfysica</b>	<b>39</b>
9.1	Mathematische inleiding . . . . .	39
9.2	De behoudswetten . . . . .	39
9.3	De vergelijkingen van Bernoulli . . . . .	41
9.4	Karakterisering van stromingen door dimensieloze getallen . . . . .	41
9.5	Buisstromingen . . . . .	42
9.6	Potentiaaltheorie . . . . .	42
9.7	Grenslagen . . . . .	43
	9.7.1 Stromingsgrenslagen . . . . .	43
	9.7.2 Temperatuur grenslagen . . . . .	43
9.8	Warmtegeleiding . . . . .	43
9.9	Turbulentie . . . . .	44
9.10	Zelforganisatie . . . . .	44
<b>10</b>	<b>Quantummechanica</b>	<b>45</b>
10.1	Inleiding tot de quantummechanica . . . . .	45
	10.1.1 Zwarte straling . . . . .	45
	10.1.2 Comptoneffect . . . . .	45
	10.1.3 Elektronen diffractie . . . . .	45
10.2	Golffuncties . . . . .	45
10.3	Operatoren in de quantummechanica . . . . .	45
10.4	Het onzekerheidsprincipe . . . . .	46
10.5	De Schrödingervergelijking . . . . .	46
10.6	Pariteit . . . . .	46
10.7	Het tunneleffect . . . . .	47
10.8	De harmonische oscillator . . . . .	47
10.9	Impulsmoment . . . . .	47
10.10	Spin . . . . .	48
10.11	Het Dirac formalisme . . . . .	48
10.12	Atoomfysica . . . . .	49
	10.12.1 Oplossingen . . . . .	49
	10.12.2 Eigenwaardevergelijkingen . . . . .	49
	10.12.3 Spin-baan wisselwerking . . . . .	49
	10.12.4 Selectieregels . . . . .	50
10.13	Wisselwerking met het elektromagnetische veld . . . . .	50
10.14	Storingsrekening . . . . .	50
	10.14.1 Tijdonafhankelijke storingsrekening . . . . .	50
	10.14.2 Tijdafhankelijke storingsrekening . . . . .	51

10.15 Meer deeltjes systemen . . . . .	51
10.15.1 Algemeen . . . . .	51
10.15.2 Moleculen . . . . .	52
10.16 Quantumstatistiek . . . . .	52
<b>11 Plasmafysica</b>	<b>54</b>
11.1 Basisbegrippen . . . . .	54
11.2 Transport . . . . .	54
11.3 Elastische botsingen . . . . .	55
11.3.1 Algemeen . . . . .	55
11.3.2 De Coulomb interactie . . . . .	56
11.3.3 De geïnduceerde dipool interactie . . . . .	56
11.3.4 Het massamiddelpuntstelsel . . . . .	56
11.3.5 Verstrooiing van licht . . . . .	56
11.4 Thermodynamisch evenwicht en reversibiliteit . . . . .	57
11.5 Inelastische botsingen . . . . .	57
11.5.1 Typen botsingen . . . . .	57
11.5.2 Werkzame doorsneden . . . . .	58
11.6 Straling . . . . .	58
11.7 De Boltzmann transport vergelijking . . . . .	59
11.8 Botsings-stralings modellen . . . . .	60
11.9 Golven in plasma's . . . . .	60
<b>12 Vaste stoffysica</b>	<b>62</b>
12.1 Kristalstructuur . . . . .	62
12.2 Bindingen . . . . .	62
12.3 Roostertrillingen . . . . .	63
12.3.1 Rooster met één soort atomen . . . . .	63
12.3.2 Rooster met twee soorten atomen . . . . .	63
12.3.3 Fononen . . . . .	63
12.3.4 Soortelijke warmte . . . . .	64
12.4 Magnetisch veld in een vaste stof . . . . .	65
12.4.1 Diamagnetisme . . . . .	65
12.4.2 Paramagnetisme . . . . .	65
12.4.3 Ferromagnetisme . . . . .	65
12.5 Het vrije-elektronen Fermi gas . . . . .	66
12.5.1 Soortelijke warmte . . . . .	66
12.5.2 Elektrische geleiding . . . . .	66
12.5.3 Het Hall-effect . . . . .	67
12.5.4 Thermische geleiding . . . . .	67
12.6 Energiebanden . . . . .	67
12.7 Halfgeleiders . . . . .	67
12.8 Supergeleiders . . . . .	68
12.8.1 Beschrijving . . . . .	68
12.8.2 Het Josephson effect . . . . .	69
12.8.3 Fluxquantisatie in een supergeleidende ring . . . . .	69
12.8.4 Macroscopische quantuminterferentie . . . . .	70
12.8.5 De London vergelijking . . . . .	70
12.8.6 Het BCS-model . . . . .	70

<b>13 Groepentheorie</b>	<b>71</b>
13.1 Het begrip groep . . . . .	71
13.1.1 Definitie van een groep . . . . .	71
13.1.2 Het herordeningstheorema . . . . .	71
13.1.3 Geconjugeerde elementen, subgroepen en klassen . . . . .	71
13.1.4 Isomorfie en homomorfie; representaties . . . . .	72
13.1.5 Reducibele en irreducibele representaties . . . . .	72
13.2 Het orthogonaliteitstheorema . . . . .	72
13.2.1 Het lemma van Schur . . . . .	72
13.2.2 Het orthogonaliteitstheorema . . . . .	72
13.2.3 Karakter . . . . .	73
13.3 De relatie met de quantummechanica . . . . .	73
13.3.1 Representaties, energieniveaus en ontaarding . . . . .	73
13.3.2 Opheffing van ontaarding door storing . . . . .	73
13.3.3 Het construeren van een basisfunctie . . . . .	74
13.3.4 Het direct product van representaties . . . . .	74
13.3.5 Clebsch-Gordan coëfficiënten . . . . .	74
13.3.6 Symmetrische transformaties van operatoren, irreducibele tensoroperatoren . . . . .	75
13.3.7 Het Wigner-Eckart theorema . . . . .	75
13.4 Continue groepen . . . . .	75
13.4.1 De 3-dimensionale translatiegroep . . . . .	75
13.4.2 De 3-dimensionale rotatiegroep . . . . .	76
13.4.3 Eigenschappen van continue groepen . . . . .	76
13.5 De groep $SO(3)$ . . . . .	77
13.6 Toepassing in de quantummechanica . . . . .	78
13.6.1 Vectormodel voor samenstellen van impulsmomenten . . . . .	78
13.6.2 Irreducibele tensoroperatoren, matrixelementen en selectieregels . . . . .	78
13.7 Toepassing in de elementaire deeltjes fysica . . . . .	79
<b>14 Kernfysica</b>	<b>81</b>
14.1 Kernkrachten . . . . .	81
14.2 De vorm van de atoomkern . . . . .	82
14.3 Radioactief verval . . . . .	82
14.4 Verstrooiing en kernreacties . . . . .	83
14.4.1 Kinetisch model . . . . .	83
14.4.2 Quantummechanisch model voor n-p verstrooiing . . . . .	83
14.4.3 Energie en impulsbehoud bij kernreacties . . . . .	84
14.5 Stralingsdosimetrie . . . . .	84
<b>15 Quantumveldentheorie &amp; Deeltjesfysica</b>	<b>85</b>
15.1 Creatie en annihilatie operatoren . . . . .	85
15.2 Klassieke en quantumvelden . . . . .	85
15.3 Het interactie beeld . . . . .	86
15.4 Reëel scalair veld in het interactie beeld . . . . .	86
15.5 Geladen spin-0 deeltjes, ladingsbehoud . . . . .	87
15.6 Veldfuncties voor spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes . . . . .	87
15.7 Quantisatie van een spin- $\frac{1}{2}$ veld . . . . .	88
15.8 Quantisatie van het elektromagnetische veld . . . . .	89
15.9 Wisselwerkende velden, S-matrix . . . . .	89
15.10 Divergenties en renormalisatie . . . . .	90
15.11 Classificatie van elementaire deeltjes . . . . .	90
15.12 P en CP-schending . . . . .	92
15.13 Het standaardmodel . . . . .	93
15.13.1 De elektrozwakke theorie . . . . .	93
15.13.2 Spontane symmetriebreking: het Higgs mechanisme . . . . .	94

15.13.3 De quantumchromodynamica . . . . .	94
15.14 Padintegralen . . . . .	95
15.15 Unificatie en quantumgravitatie . . . . .	95
<b>16 Astrofysica</b>	<b>96</b>
16.1 Afstandsbepaling . . . . .	96
16.2 Lichtsterkte en magnituden . . . . .	96
16.3 Straling en steratmosferen . . . . .	97
16.4 Steropbouw en evolutie . . . . .	97
16.5 Energieproductie in sterren . . . . .	98
<b>De <math>\nabla</math>-operator</b>	<b>99</b>
<b>Het SI eenhedenstelsel</b>	<b>100</b>

---



# Natuurconstanten

Naam	Symbol	Waarde	Eenheid
Getal $\pi$	$\pi$	3,14159265358979323846	
Getal e	e	2,71828182845904523536	
Constante van Euler	$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \sum_{k=1}^n 1/k - \ln(n) \right)$	$= 0,5772156649$	
Elementaire lading	$e$	$1,60217733 \cdot 10^{-19}$	C
Gravitatieconstante	$G, \kappa$	$6,67259 \cdot 10^{-11}$	$\text{m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$
Fijnstructuurconstante	$\alpha = e^2/2hc\varepsilon_0$	$\approx 1/137$	
Lichtsnelheid in vacuüm	$c$	$2,99792458 \cdot 10^8$	m/s (def)
Permittiviteit van het vacuüm	$\varepsilon_0$	$8,854187 \cdot 10^{-12}$	F/m
Permeabiliteit van het vacuüm	$\mu_0$	$4\pi \cdot 10^{-7}$	H/m
$(4\pi\varepsilon_0)^{-1}$		$8,9876 \cdot 10^9$	$\text{Nm}^2\text{C}^{-2}$
Constante van Planck	$h$	$6,6260755 \cdot 10^{-34}$	Js
Constante van Dirac	$\hbar = h/2\pi$	$1,0545727 \cdot 10^{-34}$	Js
Bohrmagneton	$\mu_B = e\hbar/2m_e$	$9,2741 \cdot 10^{-24}$	$\text{Am}^2$
Bohrstraal	$a_0$	0,52918	Å
Rydbergconstante	$Ry$	13,595	eV
Comptongolfengete elektron	$\lambda_{Ce} = h/m_e c$	$2,463 \cdot 10^{-12}$	m
Comptongolfengete proton	$\lambda_{Cp} = h/m_p c$	$1,3214 \cdot 10^{-15}$	m
Gereduceerde massa H-atoom	$\mu_H$	$9,1045755 \cdot 10^{-31}$	kg
Constante van Stefan-Boltzmann	$\sigma$	$5,67032 \cdot 10^{-8}$	$\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$
Constante van Wien	$k_W$	$2,8978 \cdot 10^{-3}$	mK
Gasconstante	$R$	8,31441	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
Getal van Avogadro	$N_A$	$6,0221367 \cdot 10^{23}$	$\text{mol}^{-1}$
Constante van Boltzmann	$k = R/N_A$	$1,380658 \cdot 10^{-23}$	J/K
Massa van het elektron	$m_e$	$9,1093897 \cdot 10^{-31}$	kg
Massa van het proton	$m_p$	$1,6726231 \cdot 10^{-27}$	kg
Massa van het neutron	$m_n$	$1,674954 \cdot 10^{-27}$	kg
Elementaire massaeenheid	$m_u = \frac{1}{12}m(^{12}_6\text{C})$	$1,6605656 \cdot 10^{-27}$	kg
Kernmagneton	$\mu_N$	$5,0508 \cdot 10^{-27}$	J/T
Diameter van de Zon	$D_\odot$	$1392 \cdot 10^6$	m
Massa van de Zon	$M_\odot$	$1,989 \cdot 10^{30}$	kg
Rotatietijd van de Zon	$T_\odot$	25,38	dag
Straal van de aarde	$R_A$	$6,378 \cdot 10^6$	m
Massa van de aarde	$M_A$	$5,976 \cdot 10^{24}$	kg
Rotatietijd van de aarde	$T_A$	23,96	uur
Omlooptijd aarde-zon	Tropisch jaar	365,24219879	dag
Astronomische eenheid	AE	$1,4959787066 \cdot 10^{11}$	m
Lichtjaar	lj	$9,4605 \cdot 10^{15}$	m
Parsec	pc	$3,0857 \cdot 10^{16}$	m
Constante van Hubble	$H$	$\approx (75 \pm 25)$	$\text{km}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{Mpc}^{-1}$

# Hoofdstuk 1

## Mechanica

### 1.1 Puntkinematica in een vast stelsel

#### 1.1.1 Definities

De plaats  $\vec{r}$ , de snelheid  $\vec{v}$  en de versnelling  $\vec{a}$  zijn gedefinieerd als:  $\vec{r} = (x, y, z)$ ,  $\vec{v} = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ ,  $\vec{a} = (\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z})$ .  
Er geldt:

$$s(t) = s_0 + \int |\vec{v}(t)| dt; \quad \vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \int \vec{v}(t) dt; \quad \vec{v}(t) = \vec{v}_0 + \int \vec{a}(t) dt$$

Bij constante versnelling geldt dus:  $v(t) = v_0 + at$  en  $s(t) = s_0 + v_0 t + \frac{1}{2} at^2$ .

Voor de eenheidsrichtingsvectoren  $\perp$  op de baan  $\vec{e}_t$  en evenwijdig daaraan  $\vec{e}_n$  geldt:

$$\vec{e}_t = \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} = \frac{d\vec{r}}{ds} \quad \dot{\vec{e}}_t = \frac{v}{\rho} \vec{e}_n; \quad \vec{e}_n = \frac{\dot{\vec{e}}_t}{|\dot{\vec{e}}_t|}$$

Voor de *kromming*  $k$  en de *kromtestraal*  $\rho$  geldt:

$$\vec{k} = \frac{d\vec{e}_t}{ds} = \frac{d^2\vec{r}}{ds^2} = \left| \frac{d\varphi}{ds} \right|; \quad \rho = \frac{1}{|k|}$$

#### 1.1.2 Poolcoördinaten

Poolcoördinaten worden gegeven door:  $x = r \cos(\theta)$ ,  $y = r \sin(\theta)$ . Hieruit volgt voor de eenheidsvectoren:  
 $\vec{e}_r = \theta \vec{e}_\theta$ ,  $\dot{\vec{e}}_\theta = -\dot{\theta} \vec{e}_r$

De snelheid en versnelling volgen uit:  $\vec{r} = r \vec{e}_r$ ,  $\vec{v} = \dot{r} \vec{e}_r + r \dot{\theta} \vec{e}_\theta$ ,  $\vec{a} = (\ddot{r} - r \dot{\theta}^2) \vec{e}_r + (2\dot{r} \dot{\theta} + r \ddot{\theta}) \vec{e}_\theta$ .

### 1.2 Relatieve beweging

Voor de beweging van een punt D t.o.v. een punt Q geldt:  $\vec{r}_D = \vec{r}_Q + \frac{\vec{\omega} \times \vec{v}_Q}{\omega^2}$ , met  $\vec{QD} = \vec{r}_D - \vec{r}_Q$  en  $\omega = \dot{\theta}$ .

Verder geldt:  $\alpha = \ddot{\theta}$ . Het accent ' betekent: de betreffende grootte geldt in het bewegende coördinatenstelsel.

In een bewegend stelsel geldt:

$$\vec{v} = \vec{v}_Q + \vec{v}' + \vec{\omega} \times \vec{r}' \quad \text{en} \quad \vec{a} = \vec{a}_Q + \vec{a}' + \vec{\alpha} \times \vec{r}' + 2\vec{\omega} \times \vec{v}' + \vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}')$$

$$\text{met } \vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}') = -\omega^2 \vec{r}'_n$$

### 1.3 Puntdynamica in een vast stelsel

#### 1.3.1 Kracht, impuls(moment), energie

De 2e wet van Newton geeft het verband tussen een kracht op een voorwerp en de resulterende versnelling daarvan, waarin de *impuls* gegeven is door:  $\vec{p} = m\vec{v}$ :

$$\vec{F}(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d(m\vec{v})}{dt} = m \frac{d\vec{v}}{dt} + \vec{v} \frac{dm}{dt} \stackrel{m=\text{const}}{=} m\vec{a}$$

De 3e wet van Newton luidt:  $\vec{F}_{\text{actie}} = -\vec{F}_{\text{reactie}}$ .

Voor het vermogen  $P$  geldt:  $P = \dot{W} = \vec{F} \cdot \vec{v}$ . Voor de totale energie  $W$ , de kinetische energie  $T$  en de potentiële energie  $U$  geldt:  $W = T + U$ ;  $\dot{T} = -\dot{U}$  met  $T = \frac{1}{2}mv^2$ .

De stoot  $\vec{S}$  is gegeven door:  $\vec{S} = \Delta\vec{p} = \int \vec{F} dt$

De door een kracht geleverde arbeid  $A$  is  $A = \int_1^2 \vec{F} \cdot d\vec{s} = \int_1^2 F \cos(\alpha) ds$

Het krachtmoment  $\vec{\tau}$  hangt samen met het impulsmoment  $\vec{L}$ :  $\vec{\tau} = \dot{\vec{L}} = \vec{r} \times \vec{F}$ ; en  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m\vec{v} \times \vec{r}$ ;  $|\vec{L}| = mr^2\omega$ . Er geldt

$$\tau = -\frac{\partial U}{\partial \theta}$$

Voorwaarden voor een mechanisch evenwicht zijn dus:  $\sum \vec{F}_i = 0$  en  $\sum \vec{\tau}_i = 0$ .

De *wrijvingskracht* is meestal evenredig met de normaalkracht, behalve bij het op gang komen van de beweging, wanneer er een drempel overwonnen moet worden:  $F_{\text{wrijv}} = f \cdot F_{\text{norm}} \cdot \vec{e}_t$ .

### 1.3.2 Conservatief krachtveld

Een conservatieve kracht is te schrijven als de gradiënt van een potentiaal:  $\vec{F}_{\text{cons}} = -\vec{\nabla}U$ . Hieruit volgt dat  $\nabla \times \vec{F} = \vec{0}$ . Voor zo'n krachtveld geldt tevens:

$$\oint \vec{F} \cdot d\vec{s} = 0 \Rightarrow U = U_0 - \int_{r_0}^{r_1} \vec{F} \cdot d\vec{s}$$

De arbeid die een conservatief veld verricht hangt dus niet af van de gevolgde baan, maar slechts van het begin- en eindpunt van de beweging.

### 1.3.3 Gravitatie

De Newtonse gravitatiewet luidt (in de ART schrijft men ook  $\kappa$  i.p.v.  $G$ ):

$$\vec{F}_g = -G \frac{m_1 m_2}{r^2} \vec{e}_r$$

Hieruit volgt voor de gravitatiepotentiaal  $V = -Gm/r$ . Uit Gauss volgt dan:  $\nabla^2 V = 4\pi G\rho$ .

### 1.3.4 Baanvergelijkingen

Als  $V = V(r)$  volgt uit de Lagrangevergelijking voor  $\phi$  behoud van impulsmoment:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = \frac{\partial V}{\partial \phi} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\phi}) = 0 \Rightarrow L_z = mr^2\dot{\phi} = \text{constant}$$

Voor de straal als functie van de tijd is dan af te leiden dat:

$$\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = \frac{2(W - V)}{m} - \frac{L^2}{m^2 r^2}$$

De hoekvergelijking luidt nu:

$$\phi - \phi_0 = \int_0^r \left[ \frac{mr^2}{L} \sqrt{\frac{2(W - V)}{m} - \frac{L^2}{m^2 r^2}} \right]^{-1} dr \quad r^{-2}_{\text{veld}} \arccos \left( 1 + \frac{\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0}}{\frac{1}{r_0} + km/L_z^2} \right)$$

als  $F = F(r)$ :  $L = \text{constant}$ , als  $F$  conservatief is, geldt  $W = \text{constant}$ , als  $\vec{F} \perp \vec{v}$  dan is  $\Delta T = 0$  en  $U = 0$ .

### De baanvergelijkingen van Kepler

In een krachtveld  $F = kr^{-2}$  veld zijn banen kegelsneden met het krachtcentrum in een brandpunt (1e wet van Kepler). De baanvergelijking luidt:

$$r(\theta) = \frac{\ell}{1 + \varepsilon \cos(\theta - \theta_0)}, \text{ ofwel: } x^2 + y^2 = (\ell - \varepsilon x)^2$$

met

$$\ell = \frac{L^2}{G\mu^2 M_{\text{tot}}}; \quad \varepsilon^2 = 1 + \frac{2WL^2}{G^2\mu^3 M_{\text{tot}}^2} = 1 - \frac{\ell}{a}; \quad a = \frac{\ell}{1 - \varepsilon^2} = \frac{k}{2W}$$

$a$  is de lengte van de halve lange as van de ellipsbaan in het geval de baan gesloten is. De halve korte as  $b = \sqrt{a\ell}$ .  $\varepsilon$  is de *excentriciteit* van de baan. Banen met gelijke  $\varepsilon$  zijn gelijkvormig. Er zijn nu 5 soorten banen mogelijk:

1.  $k < 0$  en  $\varepsilon = 0$ : een cirkel.
2.  $k < 0$  en  $0 < \varepsilon < 1$ : een ellips.
3.  $k < 0$  en  $\varepsilon = 1$ : een parabool.
4.  $k < 0$  en  $\varepsilon > 1$ : een hyperbool naar het krachtcentrum toe gekromd.
5.  $k > 0$  en  $\varepsilon > 1$ : een hyperbool van het krachtcentrum af gekromd.

Andere combinaties zijn niet mogelijk: in een afstotend veld is de totale energie positief dus  $\varepsilon > 1$ .

Indien  $A(t_1, t_2)$  het oppervlak is tussen de baan die doorlopen is tussen  $t_1$  en  $t_2$  en het brandpunt C waaromheen de planeet draait luidt de 2e wet van Kepler (de perkenwet):

$$A(t_1, t_2) = \frac{L_C}{2m}(t_2 - t_1)$$

De 3e wet van Kepler luidt, met  $T$  de omlooptijd en  $M_{\text{tot}}$  de totale massa van het systeem:

$$\frac{T^2}{a^3} = \frac{4\pi^2}{GM_{\text{tot}}}$$

### 1.3.5 De viriaalstelling

De viriaalstelling voor 1 deeltje luidt:

$$\langle m\vec{v} \cdot \vec{r} \rangle = 0 \Rightarrow \langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle \vec{F} \cdot \vec{r} \rangle = \frac{1}{2} \left\langle r \frac{dU}{dr} \right\rangle = \frac{1}{2} n \langle U \rangle \text{ als } U = -\frac{k}{r^n}$$

De viriaalstelling voor een verzameling deeltjes luidt:

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \left\langle \sum_{\text{deeltjes}} \vec{F}_i \cdot \vec{r}_i + \sum_{\text{paren}} \vec{F}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \right\rangle$$

Deze stellingen zijn ook te schrijven als  $2E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = 0$ .

## 1.4 Puntdynamica in een bewegend stelsel

### 1.4.1 Schijnkrachten

De totale kracht in een bewegend coördinatenstelsel wordt gevonden door de schijnkrachten af te trekken van de krachten die in het referentiestelsel werken:  $\vec{F}' = \vec{F} - \vec{F}_{\text{schijn}}$ . De verschillende schijnkrachten worden gegeven door:

1. Oorsprongstransformatie:  $F_{\text{oor}} = -m\vec{a}_a$
2. Rotatie:  $\vec{F}_\alpha = -m\vec{\alpha} \times \vec{r}'$
3. Corioliskracht:  $F_{\text{cor}} = -2m\vec{\omega} \times \vec{v}$
4. Centrifugale kracht:  $\vec{F}_{\text{cf}} = m\omega^2 \vec{r}_n' = -\vec{F}_{\text{cp}}; \vec{F}_{\text{cp}} = -\frac{mv^2}{r} \vec{e}_r$

## 1.4.2 Tensorvorm

Transformatie van de Newtonse bewegingsvergelijkingen naar  $x^\alpha = x^\alpha(x)$ :

$$\frac{dx^\alpha}{dt} = \frac{\partial x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta} \frac{d\bar{x}^\beta}{dt};$$

Uit de kettingregel volgt:

$$\frac{d}{dt} \frac{dx^\alpha}{dt} = \frac{d^2 x^\alpha}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta} \frac{d\bar{x}^\beta}{dt} \right) = \frac{\partial x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta} \frac{d^2 \bar{x}^\beta}{dt^2} + \frac{d\bar{x}^\beta}{dt} \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta} \right)$$

dus:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta} = \frac{\partial}{\partial \bar{x}^\gamma} \frac{\partial x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta} \frac{d\bar{x}^\gamma}{dt} = \frac{\partial^2 x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta \partial \bar{x}^\gamma} \frac{d\bar{x}^\gamma}{dt}$$

Dit geeft:

$$\frac{d^2 x^\alpha}{dt^2} = \frac{\partial x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta} \frac{d^2 \bar{x}^\beta}{dt^2} + \frac{\partial^2 x^\alpha}{\partial \bar{x}^\beta \partial \bar{x}^\gamma} \frac{d\bar{x}^\gamma}{dt} \left( \frac{d\bar{x}^\beta}{dt} \right)$$

De Newtonse bewegingsvergelijking

$$m \frac{d^2 x^\alpha}{dt^2} = F^\alpha$$

wordt dus getransformeerd in:

$$m \left\{ \frac{d^2 x^\alpha}{dt^2} + \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \frac{dx^\beta}{dt} \frac{dx^\gamma}{dt} \right\} = F^\alpha$$

De schijn“krachten” zijn dus van de oorzaak- naar de effect kant gebracht in de vorm  $\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \frac{dx^\beta}{dt} \frac{dx^\gamma}{dt}$ .

## 1.5 Dynamica van massapuntverzamelingen

### 1.5.1 Het massamiddelpunt

De snelheid t.o.v. het massamiddelpunt  $\vec{R}$  wordt gegeven door  $\vec{v} - \dot{\vec{R}}$ . De coördinaten van het massamiddelpunt worden gegeven door:

$$\vec{r}_m = \frac{\sum m_i \vec{r}_i}{\sum m_i}$$

In een 2-deeltjes systeem worden de coördinaten van het massamiddelpunt gegeven door:

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

Met  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  wordt kinetische energie dan:  $T = \frac{1}{2} M_{\text{tot}} \dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{\vec{r}}^2$ , waarbij de *gereduceerde massa*  $\mu$  gegeven wordt door:  $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$

De bewegingen binnen en buiten het massamiddelpuntssysteem zijn te scheiden:

$$\dot{\vec{L}}_{\text{uitwendig}} = \vec{\tau}_{\text{uitwendig}}; \quad \dot{\vec{L}}_{\text{inwendig}} = \vec{\tau}_{\text{inwendig}}$$

$$\vec{p} = m\vec{v}_m; \quad \vec{F}_{\text{uitw}} = m\vec{a}_m; \quad \vec{F}_{12} = \mu\vec{u}$$

## 1.5.2 Botsingen

Bij botsingen, met B het botsingspunt en C een willekeurig ander punt, geldt:

$\vec{p} = m\vec{v}_m$  is constant, en  $T = \frac{1}{2}m\vec{v}_m^2$  is constant. De verandering in de *relatieve snelheden* volgt uit  $\vec{S}' = \Delta\vec{p} = \mu(\vec{v}_{na} - \vec{v}_{voor})$ . Verder geldt dat  $\Delta\vec{L}_C = \vec{CB} \times \vec{S}'$ ,  $\vec{p} \parallel \vec{S}' = \text{constant}$  en  $\vec{L}$  t.o.v. B is constant.

## 1.6 Dynamica van starre lichamen

### 1.6.1 Traagheidsmoment

Het impulsmoment in een bewegend coördinatenstelsel wordt gegeven door:

$$\vec{L}' = I\vec{\omega} + \vec{L}'_n$$

waarin  $I$  het *traagheidsmoment* ten opzichte van een centrale as is, dat gegeven is door:

$$I = \sum_i m_i \vec{r}_i^2; \quad T' = W_{\text{rot}} = \frac{1}{2}\omega I_{ij} \vec{e}_i \vec{e}_j = \frac{1}{2}I\omega^2$$

of, in het continue geval, door:

$$I = \frac{m}{V} \int r_n^2 dV = \int r_n^2 dm$$

Verder geldt dat:

$$L_i = I^{ij} \omega_j; \quad I_{ii} = I_i; \quad I_{ij} = I_{ji} = - \sum_k m_k x'_i x'_j$$

De stelling van Steiner luidt:  $I_{\text{t.o.v.D}} = I_{\text{t.o.v.C}} + m(DM)^2$  als as C  $\parallel$  as D.

Object	$I$	Object	$I$
Holle cylinder	$I = mR^2$	Massieve cylinder	$I = \frac{1}{2}mR^2$
Schijf, as in vlak schijf door m	$I = \frac{1}{4}mR^2$	Halter	$I = \frac{1}{2}\mu R^2$
Holle bol	$I = \frac{2}{3}mR^2$	Massieve bol	$I = \frac{2}{5}mR^2$
Staaf, as $\perp$ door m.pnt	$I = \frac{1}{12}ml^2$	Staaf, as $\perp$ door eind	$I = \frac{1}{3}ml^2$
Rechthoek, as $\perp$ vlak door m	$I = \frac{1}{12}m(a^2 + b^2)$	Rechthoek, as $\parallel b$ door m	$I = ma^2$

### 1.6.2 Hoofdassen

Elk star lichaam heeft (minstens) 3 onderling  $\perp$  centrale hoofdassen. Voor een hoofdas geldt:

$$\frac{\partial I}{\partial \omega_x} = \frac{\partial I}{\partial \omega_y} = \frac{\partial I}{\partial \omega_z} = 0 \quad \text{zodat} \quad L'_n = 0$$

er geldt:  $\dot{\omega}_k = -a_{ijk}\omega_i\omega_j$  met  $a_{ijk} = \frac{I_i - I_j}{I_k}$  als  $I_1 \leq I_2 \leq I_3$ .

### 1.6.3 Tijdafhankelijkheid

Voor het krachtmoment  $\vec{\tau}$  geldt:

$$\vec{\tau}' = I\ddot{\theta}; \quad \frac{d''\vec{L}'}{dt} = \vec{\tau}' - \vec{\omega} \times \vec{L}'$$

Het *koppel*  $\vec{T}$  is gegeven door:  $\vec{T} = \vec{F} \times \vec{d}$ .

## 1.7 Variatierekening, Hamilton en Lagrange mechanica

### 1.7.1 Variatierekening

Uitgaande van:

$$\delta \int_a^b \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt = 0 \text{ met } \delta(a) = \delta(b) = 0 \text{ en } \delta \left( \frac{du}{dx} \right) = \frac{d}{dx}(\delta u)$$

volgen de vergelijkingen van Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}$$

Wanneer bij het variatieprobleem  $\delta J(u) = 0$  nevencondities van het type  $K(u) = \text{constant}$  gelden wordt het variatieprobleem:  $\delta J(u) - \lambda \delta K(u) = 0$ .

### 1.7.2 Hamiltonmechanica

De *Lagrangiaan* wordt gegeven door:  $\mathcal{L} = \sum T(\dot{q}_i) - V(q_i)$ . De *Hamiltoniaan* wordt gegeven door:  $H = \sum \dot{q}_i p_i - \mathcal{L}$ . In 2 dimensies geldt:  $\mathcal{L} = T - U = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) - U(r, \phi)$ .

Als de gebruikte coördinaten *canonisch* zijn, zijn de Hamilton vergelijkingen de bewegingsvergelijkingen van het probleem:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

Coördinaten zijn canonisch als ze voldoen aan:  $\{q_i, q_j\} = 0$ ,  $\{p_i, p_j\} = 0$ ,  $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$  waarin  $\{, \}$  de *Poisson haak* is:

$$\{A, B\} = \sum_i \left[ \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right]$$

De Hamiltoniaan van de Harmonische oscillator is gegeven door  $H(x, p) = p^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ .

Met nieuwe coördinaten  $(\theta, I)$ , volgend uit de canonieke transformatie  $x = \sqrt{2I/m\omega} \cos(\theta)$  en  $p = -\sqrt{2Im\omega} \sin(\theta)$ , met inverse  $\theta = \arctan(-p/m\omega x)$  en  $I = p^2/2m\omega + \frac{1}{2}m\omega x^2$ , volgt:  $H(\theta, I) = \omega I$ .

De Hamiltoniaan van een geladen deeltje met lading  $q$  in een uitwendig elektromagnetisch veld is gegeven door

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + qV$$

Deze is te vinden uit de Hamiltoniaan voor een vrij deeltje  $H = p^2/2m$  door de transformaties  $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A}$  en  $H \rightarrow H - qV$ . Uit relativistisch oogpunt is dit elegant: dit komt overeen met de transformatie van de impuls 4-vector  $p^\alpha \rightarrow p^\alpha - qA^\alpha$ . Een ijktransformatie van de potentialen  $A^\alpha$  komt juist overeen met een canonieke transformatie, waardoor de Hamiltonvergelijkingen weer de bewegingsvergelijkingen van het probleem geven.

### 1.7.3 Beweging om evenwicht, linearisatie

Voor natuurlijke systemen geldt rondt een evenwichtspunt:

$$\left( \frac{\partial V}{\partial q_i} \right)_0 = 0; \quad V(q) = V(0) + V_{ik} q_i q_k \text{ met } V_{ik} = \left( \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_k} \right)_0$$

Met  $T = \frac{1}{2}(M_{ik} \dot{q}_i \dot{q}_k)$  wordt het stelsel bewegingsvergelijkingen  $M\ddot{q} + Vq = 0$  verkregen. Als  $q_i(t) = a_i \exp(i\omega t)$  wordt gesubstitueerd, heeft dit stelsel oplossingen als  $\det(V - \omega^2 M) = 0$ . Dit geeft de eigenfrequenties van het probleem:  $\omega_k^2 = \frac{a_k^T V a_k}{a_k^T M a_k}$ . Als het evenwichtspunt stabiel is geldt  $\forall k$  dat  $\omega_k^2 > 0$ . De algemene oplossing is een superpositie van de eigentrillingen.

### 1.7.4 Faseruimte, stelling van Liouville

In de faseruimte geldt:

$$\nabla = \left( \sum_i \frac{\partial}{\partial q_i}, \sum_i \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \quad \text{dus} \quad \nabla \cdot \vec{v} = \sum_i \left( \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)$$

Als de continuïteitsvergelijking  $\partial_t \varrho + \nabla \cdot (\varrho \vec{v}) = 0$  geldt, is dit te schrijven als:

$$\{\varrho, H\} + \frac{\partial \varrho}{\partial t} = 0$$

In het algemeen geldt voor een willekeurige grootheid  $A$ :

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

De stelling van Liouville is dan te schrijven als:

$$\frac{d\varrho}{dt} = 0; \quad \text{ofwel:} \quad \int p dq = \text{constant}$$

### 1.7.5 Genererende functies

Uitgaande van de coördinatentransformatie:

$$\begin{cases} Q_i = Q_i(q_i, p_i, t) \\ P_i = P_i(q_i, p_i, t) \end{cases}$$

gelden met de nieuwe Hamiltoniaan  $K$  de Hamiltonvergelijkingen:

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P_i}; \quad \frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}$$

Er zijn nu 4 gevallen te onderscheiden:

1. Als geldt:  $p_i \dot{q}_i - H = P_i \dot{Q}_i - K(P_i, Q_i, t) - \frac{dF_1(q_i, Q_i, t)}{dt}$  volgen de coördinaten uit:

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}; \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}; \quad K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

2. Als geldt:  $p_i \dot{q}_i - H = -\dot{P}_i Q_i - K(P_i, Q_i, t) + \frac{dF_2(q_i, P_i, t)}{dt}$  volgen de coördinaten uit:

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}; \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}; \quad K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t}$$

3. Als geldt:  $-\dot{p}_i q_i - H = P_i \dot{Q}_i - K(P_i, Q_i, t) + \frac{dF_3(p_i, Q_i, t)}{dt}$  volgen de coördinaten uit:

$$q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i}; \quad P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i}; \quad K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t}$$

4. Als geldt:  $-\dot{p}_i q_i - H = -P_i \dot{Q}_i - K(P_i, Q_i, t) + \frac{dF_4(p_i, P_i, t)}{dt}$  volgen de coördinaten uit:

$$q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i}; \quad Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial P_i}; \quad K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t}$$

De functies  $F_1, F_2, F_3$  en  $F_4$  heten de *genererende functies*.



## Hoofdstuk 2

# Elektriciteit & Magnetisme

### 2.1 De Maxwell vergelijkingen

Het klassieke elektromagnetische veld kan beschreven worden met de *Maxwellvergelijkingen*, die zowel in differentiële als integrale vorm geschreven kunnen worden:

$$\begin{aligned}\oint (\vec{D} \cdot \vec{n}) d^2 A &= Q_{\text{vrij, omsl}} & \nabla \cdot \vec{D} &= \rho_{\text{vrij}} \\ \oint (\vec{B} \cdot \vec{n}) d^2 A &= 0 & \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \oint \vec{E} \cdot d\vec{s} &= -\frac{d\Phi}{dt} & \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \oint \vec{H} \cdot d\vec{s} &= I_{\text{vrij, omsl}} + \frac{d\Psi}{dt} & \nabla \times \vec{H} &= \vec{J}_{\text{vrij}} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}\end{aligned}$$

Voor de fluxen geldt:  $\Psi = \iint (\vec{D} \cdot \vec{n}) d^2 A$ ,  $\Phi = \iint (\vec{B} \cdot \vec{n}) d^2 A$ .

De diëlektrische verschuiving  $\vec{D}$ , polarisatie  $\vec{P}$  en elektrische veldsterkte  $\vec{E}$  hangen samen volgens:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}, \quad \vec{P} = \sum \vec{p}_0 / \text{Vol}, \quad \epsilon_r = 1 + \chi_e, \quad \text{met } \chi_e = \frac{np_0^2}{3\epsilon_0 kT}$$

De magnetische veldsterkte  $\vec{H}$ , de magnetisatie  $\vec{M}$  en de magnetische fluxdichtheid  $\vec{B}$  hangen samen volgens:

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0 \mu_r \vec{H}, \quad \vec{M} = \sum \vec{m} / \text{Vol}, \quad \mu_r = 1 + \chi_m, \quad \text{met } \chi_m = \frac{\mu_0 n m_0^2}{3kT}$$

### 2.2 Kracht en potentiaal

De kracht en het elektrische veld tussen 2 puntladingen wordt gegeven door:

$$\vec{F}_{12} = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_r r^2} \vec{e}_r; \quad \vec{E} = \frac{\vec{F}}{Q}$$

De Lorentzkracht, die een geladen deeltje dat beweegt in een magnetisch veld ondervindt, is de relativistische transformatie van de Coulombkracht:  $\vec{F}_L = Q(\vec{v} \times \vec{B}) = l(\vec{I} \times \vec{B})$ .

Het magnetische veld in punt  $P$  dat ten gevolge van een elektrische stroom ontstaat wordt gegeven door de *wet van Biot-Savart*, ook wel de wet van Laplace genoemd. Hierin is  $d\vec{l} \parallel \vec{I}$  en  $\vec{r}$  loopt van  $d\vec{l}$  naar  $P$ :

$$d\vec{B}_P = \frac{\mu_0 I}{4\pi r^2} d\vec{l} \times \vec{e}_r$$

Indien de stroom tijdafhankelijk is dient men rekening te houden met *retardatie*: men dient de substitutie  $I(t) \rightarrow I(t - r/c)$  toe te passen.

De potentialen worden gegeven door:  $V_{12} = -\int_1^2 \vec{E} \cdot d\vec{s}$  en  $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$ .

Hierbij blijft de vrijheid over om een *ijktransformatie* uit te voeren. De velden volgen uit de potentialen via:

$$\vec{E} = -\nabla V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Verder geldt nog het verband:  $c^2 \vec{B} = \vec{v} \times \vec{E}$ .

## 2.3 IJKtransformaties

Onder een ijktransformatie transformeren de potentialen van het EM veld volgens:

$$\begin{cases} \vec{A}' = \vec{A} - \nabla f \\ V' = V + \frac{\partial f}{\partial t} \end{cases}$$

zodat de velden  $\vec{E}$  en  $\vec{B}$  niet veranderen. Dit geeft een canonieke transformatie van de Hamiltoniaan. Men kan dan tevens nog een beperkende voorwaarde opleggen. Twee gebruikelijke keuzes zijn:

1. Lorentz-ijk:  $\nabla \cdot \vec{A}' + \frac{1}{c^2} \frac{\partial V'}{\partial t} = 0$ . Hierdoor ontkoppelen de DV's voor  $\vec{A}'$  en  $V'$ :  $\square V' = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$ ,  $\square \vec{A}' = -\mu_0 \vec{J}$ .
2. Coulomb ijk:  $\nabla \cdot \vec{A}' = 0$ . Als  $\rho = 0$  en  $\vec{J} = 0$  geldt  $V' = 0$  en voldoet  $\vec{A}'$  aan  $\square \vec{A}' = 0$ .

## 2.4 Energie van het elektromagnetische veld

De energiedichtheid van het EM veld is:

$$\frac{dW}{dVol} = w = \int H dB + \int E dD$$

Uitgedrukt in stromen en potentialen zijn de energiedichtheden;

$$w_{\text{mag}} = \frac{1}{2} \int \vec{J} \cdot \vec{A} d^3x, \quad w_{\text{el}} = \frac{1}{2} \int \rho V d^3x$$

## 2.5 Elektromagnetische golven

### 2.5.1 Elektromagnetische golven in vacuüm

De golfvergelijking  $\square \Psi(\vec{r}, t) = -f(\vec{r}, t)$  heeft als oplossingen, met  $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$ :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int \frac{f(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|/c)}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r'$$

Indien dit geschreven wordt als:  $\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}(\vec{r}) \exp(-i\omega t)$  en  $\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}) \exp(-i\omega t)$  met:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu}{4\pi} \int \vec{J}(\vec{r}') \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r', \quad V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \int \rho(\vec{r}') \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r'$$

is via een multipoolontwikkeling af te leiden dat voor de uitgestraalde energie geldt, als  $d, \lambda \gg r$ :

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{k^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c} \left| \int J_{\perp}(\vec{r}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r' \right|^2$$

De energiedichtheid van de EM golf van een trillende dipool op grote afstand is:

$$w = \epsilon_0 E^2 = \frac{p_0^2 \sin^2(\theta) \omega^4}{16\pi^2 \epsilon_0 r^2 c^4} \sin^2(kr - \omega t), \quad \langle w \rangle_t = \frac{p_0^2 \sin^2(\theta) \omega^4}{32\pi^2 \epsilon_0 r^2 c^4}, \quad P = \frac{ck^4 |\vec{p}|^2}{12\pi \epsilon_0}$$

De uitgestraalde energie volgt uit de *Poynting vector*  $\vec{S}$ :  $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} = cW \vec{e}_v$ . De *irradiantie* is het tijdgemiddelde van de Poynting vector:  $I = \langle |\vec{S}| \rangle_t$ . De stralingsdruk  $p_s$  is gegeven door  $p_s = (1 + R)|\vec{S}|/c$ , waarin  $R$  de reflectiecoëfficiënt is.

## 2.5.2 Elektromagnetische golven in materie

De golfvergelijkingen in materie, met  $c_{\text{mat}} = (\varepsilon\mu)^{-1/2}$  de lichtsnelheid in materie, zijn:

$$\left(\nabla^2 - \varepsilon\mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial t}\right) \vec{E} = 0, \quad \left(\nabla^2 - \varepsilon\mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial t}\right) \vec{B} = 0$$

geven, na substitutie van de monochromatische vlakke golfoplossingen  $\vec{E} = E \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$  en  $\vec{B} = B \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$  de dispersierelatie:

$$k^2 = \varepsilon\mu\omega^2 + \frac{i\mu\omega}{\rho}$$

De 1e term komt van de verplaatsingsstroom, de 2e van de geleidingsstroom. Als  $k$  geschreven wordt als  $k := k' + ik''$  volgt:

$$k' = \omega \sqrt{\frac{1}{2}\varepsilon\mu} \sqrt{1 + \sqrt{1 + \frac{1}{(\rho\varepsilon\omega)^2}}} \quad \text{en} \quad k'' = \omega \sqrt{\frac{1}{2}\varepsilon\mu} \sqrt{-1 + \sqrt{1 + \frac{1}{(\rho\varepsilon\omega)^2}}}$$

De golf is dus gedempt:  $\vec{E} = E \exp(-k''\vec{n} \cdot \vec{r}) \exp(i(k'\vec{n} \cdot \vec{r} - \omega t))$ . Als er sprake is van een goede geleider dempt de golf uit op een afstand van ongeveer de golflengte,  $k = (1 + i) \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\rho}}$ .

## 2.6 Multipolen

Omdat  $\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{r} \sum_0^\infty \left(\frac{r'}{r}\right)^l P_l(\cos\theta)$  is de potentiaal te schrijven als:  $V = \frac{Q}{4\pi\varepsilon} \sum_n \frac{k_n}{r^n}$

Voor de laagste orde termen geldt:

- Monopool:  $l = 0, k_0 = \int \rho dV$
- Dipool:  $l = 1, k_1 = \int r \cos(\theta) \rho dV$
- Quadrupool:  $l = 2, k_2 = \frac{1}{2} \sum_i (3z_i^2 - r_i^2)$

1. De elektrische dipool: dipoolmoment:  $\vec{p} = Ql\vec{e}$ , waarin  $\vec{e}$  loopt van  $\oplus$  naar  $\ominus$ , en  $\vec{F} = (\vec{p} \cdot \nabla) \vec{E}_{\text{uitw}}$ , en  $W = -\vec{p} \cdot \vec{E}_{\text{uitw}}$ .

Elektrisch veld:  $\vec{E} \approx \frac{Q}{4\pi\varepsilon r^3} \left(\frac{3\vec{p} \cdot \vec{r}}{r^2} - \vec{p}\right)$ . Het moment is:  $\vec{\tau} = \vec{p} \times \vec{E}_{\text{uitw}}$

2. De magnetische dipool: dipoolmoment: als  $r \gg \sqrt{A}$ :  $\vec{\mu} = \vec{I} \times (A\vec{e}_\perp)$ ,  $\vec{F} = (\vec{\mu} \cdot \nabla) \vec{B}_{\text{uitw}}$

$|\mu| = \frac{mv_1^2}{2B}$ ,  $W = -\vec{\mu} \times \vec{B}_{\text{uitw}}$

Magnetisch veld:  $\vec{B} = \frac{-\mu}{4\pi r^3} \left(\frac{3\vec{\mu} \cdot \vec{r}}{r^2} - \vec{\mu}\right)$ . Het moment is:  $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}_{\text{uitw}}$

## 2.7 Elektrische stromen

De continuïteitsvergelijking voor lading luidt:  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$ . De elektrische stroomsterkte is gegeven door:

$$I = \frac{dQ}{dt} = \iint (\vec{J} \cdot \vec{n}) d^2A$$

In het algemeen geldt in een geleider:  $\vec{J} = \vec{E}/\rho$ , met  $\rho$  de soortelijke weerstand.

Een verandering van de flux die door een geleider omsloten wordt geeft aanleiding tot een *inductiespanning*  $V_{\text{ind}} = -N \frac{d\Phi}{dt}$ . Een verandering van de stroom die door een geleider gaat geeft aanleiding tot een zelfinductiespanning die deze verandering tegen gaat:  $V_{\text{zelfind}} = -L \frac{dI}{dt}$ . Indien een bepaalde stroomkring een flux  $\Phi$  omsluit geldt:  $\Phi = LI$ .

De magnetische fluxdichtheid binnen een spoel wordt bij benadering gegeven door:  $B = \frac{\mu NI}{\sqrt{l^2 + 4R^2}}$  met  $l$  de lengte,  $R$  de straal en  $N$  het aantal windingen van de spoel. De energie in een spoel wordt gegeven door  $W = \frac{1}{2}LI^2$  en  $L = \mu N^2 A/l$ .

De *Capaciteit* is gedefinieerd als:  $C = Q/V$ . In een condensator geldt:  $C = \varepsilon_0 \varepsilon_r A/d$  met  $d$  de afstand tussen de platen en  $A$  de oppervlakte van één plaat. De elektrische veldsterkte tussen de platen is  $E = \sigma/\varepsilon_0 = Q/\varepsilon_0 A$  met  $\sigma$  de oppervlaktelading. De opgeslagen energie is gelijk aan  $W = \frac{1}{2}CV^2$ . De stroom door een capaciteit is  $I = -C \frac{dV}{dt}$ .

Voor de meeste, PTC weerstanden geldt in goede benadering:  $R = R_0(1 + \alpha T)$ , met  $R_0 = \rho l/A$ . Voor een NTC geldt:  $R(T) = C \exp(-B/T)$  met  $B$  en  $C$  materiaalconstanten.

Indien men door 2 verschillende, elkaar rakende geleiders  $x$  en  $y$  een stroom stuurt zal het contactoppervlak opwarmen of afkoelen, afhankelijk van de stroomrichting. Dit is het *Peltiereffect*. De vrijkomende c.q. onttrokken warmte volgt uit:  $W = \Pi_{xy} It$ . Met halfgeleiders is dit effect verder te versterken.

De *thermospanning* tussen 2 metalen wordt gegeven door:  $V = \gamma(T - T_0)$ . Voor een Cu-Konstantaan verbinding geldt:  $\gamma \approx 0,2 - 0,7$  mV/K.

In een netwerk waarin slechts stationaire stromen lopen gelden de *wetten van Kirchhoff*: voor een knooppunt geldt:  $\sum I_n = 0$ , en langs een gesloten baan geldt:  $\sum V_n = \sum I_n R_n = 0$ .

## 2.8 Ontpolariserend veld

Plaatst men een diëlektricum in een elektrisch of magnetisch veld, dan zal de veldsterkte zowel binnen als buiten het diëlektricum anders zijn dan eerst omdat het diëlektricum wordt gepolariseerd c.q. gemagnetiseerd. Als het diëlektricum de vorm heeft van een ellipsoïde waarvan één der hoofdassen in de richting van het externe veld  $\vec{E}_0$  c.q.  $\vec{B}_0$  staat is het ontpolariserende veld homogeen.

$$\begin{aligned}\vec{E}_{\text{ont}} &= \vec{E}_{\text{mat}} - \vec{E}_0 = -\frac{\mathcal{N}\vec{P}}{\varepsilon_0} \\ \vec{H}_{\text{ont}} &= \vec{H}_{\text{mat}} - \vec{H}_0 = -\mathcal{N}\vec{M}\end{aligned}$$

$\mathcal{N}$  is een constante die slechts van de vorm van het object in het veld afhangt. In het algemeen geldt  $0 \leq \mathcal{N} \leq 1$ . Voor enkele limietgevallen van een ellipsoïde geldt: een dunne, vlakke plaat:  $\mathcal{N} = 1$ , een lange, dunne staaf:  $\mathcal{N} = 0$  en voor een bol geldt:  $\mathcal{N} = \frac{1}{3}$ .

## 2.9 Mengsels van materialen

De gemiddelde diëlektrische verschuiving in een materiaal dat op mesoscopische schaal inhomogeen is, is:  $\langle D \rangle = \langle \varepsilon E \rangle = \varepsilon^* \langle E \rangle$  met  $\varepsilon^* = \varepsilon_1 \left( 1 - \frac{\phi_2(1-x)}{\Phi(\varepsilon^*/\varepsilon_2)} \right)^{-1}$  waarin  $x = \varepsilon_1/\varepsilon_2$  en voor een bol geldt:  $\Phi = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}x$ . Verder geldt:

$$\left( \sum_i \frac{\phi_i}{\varepsilon_i} \right)^{-1} \leq \varepsilon^* \leq \sum_i \phi_i \varepsilon_i$$

# Hoofdstuk 3

## Relativiteitstheorie

### 3.1 De speciale relativiteitstheorie

#### 3.1.1 De Lorentztransformatie

De Lorentztransformatie  $(\vec{x}', t') = (\vec{x}'(\vec{x}, t), t'(\vec{x}, t))$  laat de golfvergelijking gelijkvormig als  $c$  invariant is:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} = \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t'^2}$$

en kan ook gevonden worden uit de eis  $ds^2 = ds'^2$ . De algemene vorm van de Lorentztransformatie is:

$$\vec{x}' = \vec{x} + \frac{(\gamma - 1)(\vec{x} \cdot \vec{v})\vec{v}}{|\vec{v}|^2} - \gamma \vec{v}t, \quad t' = \gamma \left( t - \frac{\vec{x} \cdot \vec{v}}{c^2} \right)$$

met

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

De verschill snelheid  $\vec{v}'$  tussen twee waarnemers transformeert volgens:

$$\vec{v}' = \left( \gamma \left( 1 - \frac{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2}{c^2} \right) \right)^{-1} \left( \vec{v}_2 + (\gamma - 1) \frac{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2}{v_1^2} \vec{v}_1 - \gamma \vec{v}_1 \right)$$

Als de snelheid in de  $x$ -richting is, wordt dit  $y' = y, z' = z$  en:

$$x' = \gamma(x - vt), \quad x = \gamma(x' + vt')$$
$$t' = \gamma \left( t - \frac{xv}{c^2} \right), \quad t = \gamma \left( t' + \frac{x'v}{c^2} \right), \quad v' = \frac{v_2 - v_1}{1 - \frac{v_1 v_2}{c^2}}$$

Als  $\vec{v} = v\vec{e}_x$  geldt:

$$p'_x = \gamma \left( p_x - \frac{\beta W}{c} \right), \quad W' = \gamma(W - vp_x)$$

Met  $\beta = v/c$  wordt het elektrische veld van een bewegende lading gegeven door:

$$\vec{E} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r^2} \frac{(1 - \beta^2)\vec{e}_r}{(1 - \beta^2 \sin^2(\theta))^{3/2}}$$

Het elektromagnetische veld transformeert volgens:

$$\vec{E}' = \gamma(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}), \quad \vec{B}' = \gamma \left( \vec{B} - \frac{\vec{v} \times \vec{E}}{c^2} \right)$$

Lengte, massa en tijd transformeren volgens:  $\Delta t_r = \gamma \Delta t_0, m_r = \gamma m_0, l_r = l_0/\gamma$ , met  $_0$  de grootheden in een met het object meebewegend stelsel en  $_r$  de grootheden in een stelsel dat met snelheid  $v$  beweegt t.o.v. dat stelsel. De eigentijd  $\tau$  is gedefinieerd als:  $d\tau^2 = ds^2/c^2$ , dus  $\Delta\tau = \Delta t/\gamma$ . Voor energie en impuls geldt:  $W = m_r c^2 = \gamma W_0, W^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2, p = m_r v = \gamma m_0 v = Wv/c^2$ , en  $pc = W\beta$  met  $\beta = v/c$ . De kracht is gedefinieerd door  $\vec{F} = d\vec{p}/dt$ .

4-vectoren hebben de eigenschap dat hun absolute waarde onafhankelijk is van de waarnemer: hun componenten kunnen wél veranderen bij een coördinatentransformatie, maar hun lengte niet. Het verschil van twee 4-vectoren transformeert óók als een 4-vector. De 4-vector voor de snelheid wordt gegeven door  $U^\alpha = \frac{dx^\alpha}{d\tau}$ . Het verband met de “gewone” snelheid  $u^i := dx^i/dt$  is:  $U^\alpha = (\gamma u^i, i c \gamma)$ . Voor een deeltje met rustmassa  $> 0$  geldt:  $U^\alpha U_\alpha = -c^2$ , voor een deeltje zonder rustmassa (dus met  $v = c$ ) geldt:  $U^\alpha U_\alpha = 0$ . De 4-vector voor energie en impuls wordt gegeven door:  $p^\alpha = m_0 U^\alpha = (\gamma p^i, i W/c)$ . Dus:  $p_\alpha p^\alpha = -m_0^2 c^2 = p^2 - W^2/c^2$ .

### 3.1.2 Rood en blauw verschuiving

Er zijn 3 oorzaken van rood c.q. blauwverschuiving:

1. Beweging: met  $\vec{e}_v \cdot \vec{e}_r = \cos(\varphi)$  volgt:  $\frac{f'}{f} = \gamma \left( 1 - \frac{v \cos(\varphi)}{c} \right)$ .  
Dit kan zowel rood- als blauwverschuiving geven, ook  $\perp$  op de bewegingsrichting.
2. Gravitationele roodverschuiving:  $\frac{\Delta f}{f} = \frac{\kappa M}{rc^2}$ .
3. Roodverschuiving door de uitzetting van het heelal, resulterend in o.a. de achtergrondstraling:  $\frac{\lambda_0}{\lambda_1} = \frac{R_0}{R_1}$ .

### 3.1.3 De energie-impuls tensor en de veldtensor

De energie-impuls tensor wordt gegeven door:

$$T_{\mu\nu} = (\rho c^2 + p)u_\mu u_\nu + p g_{\mu\nu} + \frac{1}{c^2} (F_{\mu\alpha} F_\nu^\alpha + \frac{1}{4} g_{\mu\nu} F^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta})$$

De behoudswetten zijn dan te schrijven als:  $\nabla_\nu T^{\mu\nu} = 0$ . De elektromagnetische veldtensor wordt gegeven door:

$$F_{\alpha\beta} = \frac{\partial A_\beta}{\partial x^\alpha} - \frac{\partial A_\alpha}{\partial x^\beta}$$

met  $A_\mu := (\vec{A}, iV/c)$  en  $J_\mu := (\vec{J}, ic\rho)$ . De Maxwellvergelijkingen kunnen dan geschreven worden in de vorm:

$$\partial_\nu F^{\mu\nu} = \mu_0 J^\mu, \quad \partial_\lambda F_{\mu\nu} + \partial_\mu F_{\nu\lambda} + \partial_\nu F_{\lambda\mu} = 0$$

De bewegingsvergelijking voor een geladen deeltje in een EM veld is met de veldtensor:

$$\frac{dp_\alpha}{d\tau} = q F_{\alpha\beta} u^\beta$$

## 3.2 De algemene relativiteitstheorie

### 3.2.1 Riemannse meetkunde, de Einstein tensor

De uitgangspunten van de ART zijn:

1. Het *geodetenpostulaat*: vrij vallende deeltjes bewegen zich langs geodeten van de ruimte-tijd, met als parameter de eigentijd  $\tau$  of de booglengte  $s$  ( $ds = cd\tau$ ). Voor fotonen moet men een vrije parameter gebruiken omdat voor hen  $ds = 0$ . Uit  $\delta \int ds = 0$  volgt dan de bewegingsvergelijking:

$$\frac{d^2 x^\alpha}{ds^2} + \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \frac{dx^\beta}{ds} \frac{dx^\gamma}{ds} = 0$$

2. Het *equivalentieprincipe*: trage massa  $\equiv$  zware massa  $\Rightarrow$  de zwaartekracht is equivalent aan een gekromde ruimte waarin deeltjes langs geodeten bewegen.

3. Door een geschikte keuze van het coördinatenstelsel kan men in elk punt  $x_i$  de metriek lokaal vlak maken:  $g_{\alpha\beta}(x_i) = \eta_{\alpha\beta} := \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$ .

De *Riemann tensor* is gedefinieerd als:  $R^\mu_{\nu\alpha\beta} T^\nu := \nabla_\alpha \nabla_\beta T^\mu - \nabla_\beta \nabla_\alpha T^\mu$ , waarin de covariante afgeleide gegeven is door  $\nabla_j a^i = \partial_j a^i + \Gamma^i_{jk} a^k$  en  $\nabla_j a_i = \partial_j a_i - \Gamma^k_{ij} a_k$ . Hierin is

$$\Gamma^i_{jk} = \frac{g^{il}}{2} \left( \frac{\partial g_{lj}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{lk}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \right), \text{ voor Euclidische ruimtes reduceert dit tot: } \Gamma^i_{jk} = \frac{\partial^2 \bar{x}^l}{\partial x^j \partial x^k} \frac{\partial x^i}{\partial \bar{x}^l},$$

het *Christoffelsymbol* of affiniteit. Voor een 2e orde tensor geldt:  $[\nabla_\alpha, \nabla_\beta] T^\mu_\nu = R^\mu_{\sigma\alpha\beta} T^\sigma_\nu + R^\sigma_{\nu\alpha\beta} T^\mu_\sigma$ ,  $\nabla_k a^i_j = \partial_k a^i_j - \Gamma^l_{kj} a^i_l + \Gamma^i_{kl} a^l_j$ ,  $\nabla_k a_{ij} = \partial_k a_{ij} - \Gamma^l_{ki} a_{lj} - \Gamma^l_{kj} a_{il}$  en  $\nabla_k a^{ij} = \partial_k a^{ij} + \Gamma^i_{kl} a^{lj} + \Gamma^j_{kl} a^{il}$ . Er geldt:  $R^\alpha_{\beta\mu\nu} = \partial_\mu \Gamma^\alpha_{\beta\nu} - \partial_\nu \Gamma^\alpha_{\beta\mu} + \Gamma^\alpha_{\sigma\mu} \Gamma^\sigma_{\beta\nu} - \Gamma^\alpha_{\sigma\nu} \Gamma^\sigma_{\beta\mu}$ .

De *Ricci tensor* is een contractie van de Riemann tensor:  $R_{\alpha\beta} := R^\mu_{\alpha\mu\beta}$ , en is symmetrisch:  $R_{\alpha\beta} = R_{\beta\alpha}$ . De *Bianchi identiteiten* luiden:  $\nabla_\lambda R_{\alpha\beta\mu\nu} + \nabla_\nu R_{\alpha\beta\lambda\mu} + \nabla_\mu R_{\alpha\beta\nu\lambda} = 0$ .

De *Einstein tensor* is gegeven door:  $G^{\alpha\beta} := R^{\alpha\beta} - \frac{1}{2} g^{\alpha\beta} R$ , waarin  $R := R^\alpha_\alpha$  de *Ricci scalar* is. Hiervoor geldt:  $\nabla_\beta G^{\alpha\beta} = 0$ . Uit het variatieprincipe  $\delta \int (\mathcal{L}(g_{\mu\nu}) - R c^2 / 16\pi\kappa) \sqrt{|g|} d^4x = 0$  voor variaties  $g_{\mu\nu} \rightarrow g_{\mu\nu} + \delta g_{\mu\nu}$  volgen de *veldvergelijkingen van Einstein*:

$$\boxed{G_{\alpha\beta} = \frac{8\pi\kappa}{c^2} T_{\alpha\beta}}, \text{ ook te schrijven als } R_{\alpha\beta} = \frac{8\pi\kappa}{c^2} (T_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} g_{\alpha\beta} T^\mu_\mu)$$

Voor de lege ruimte is dit dus gelijkwaardig met  $R_{\alpha\beta} = 0$ . De vergelijking  $R_{\alpha\beta\mu\nu} = 0$  heeft alleen de vlakke ruimte als oplossing.

De Einsteinvergelijkingen bestaan uit 10 onafhankelijke componenten, die 2e orde zijn in  $g_{\mu\nu}$ . Hieruit kan men de Laplacevergelijking van de Newtonse gravitatie verkrijgen door te stellen:  $g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu}$ , met  $|h| \ll 1$ . Dit geeft in het stationaire geval:  $\nabla^2 h_{00} = 8\pi\kappa \rho / c^2$ .

De meest algemene vorm van de veldvergelijkingen is:  $R_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} g_{\alpha\beta} R + \Lambda g_{\alpha\beta} = \frac{8\pi\kappa}{c^2} T_{\alpha\beta}$

waarin  $\Lambda$  de *kosmologische constante* is. Deze speelt o.a. een rol in het inflatiemodel.

### 3.2.2 Het lijnelement

De *metrische tensor* in een Euclidische ruimte wordt gegeven door:  $g_{ij} = \sum_k \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^i} \frac{\partial \bar{x}^k}{\partial x^j}$ .

In het algemeen geldt:  $ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$ , in de SRT gaat dit over in  $ds^2 = -c^2 dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2$ . Deze metriek,  $\eta_{\mu\nu} := \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$ , heet de *Minkowski metriek*.

De *externe Schwarzschild metriek* geldt in vacuüm buiten een sferische massaverdeling, en is gegeven door:

$$ds^2 = \left( -1 + \frac{2m}{r} \right) c^2 dt^2 + \left( 1 - \frac{2m}{r} \right)^{-1} dr^2 + r^2 d\Omega^2$$

Hierin is  $m := M\kappa/c^2$  de *geometrische massa* van een object met massa  $M$ , en  $d\Omega^2 = d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2$ . Deze metriek is singulier bij  $r = 2m = 2\kappa M/c^2$ . Als een object kleiner is dan zijn waarnemingshorizon,  $2m$ , dan is de ontsnappingssnelheid  $> c$ , heet het een *zwart gat*. De Newtonse limiet van deze metriek is gegeven door:

$$ds^2 = -(1 + 2V)c^2 dt^2 + (1 - 2V)(dx^2 + dy^2 + dz^2)$$

waarin  $V = -\kappa M/r$  de Newtonse gravitatiepotentiaal is. In de ART worden de componenten van  $g_{\mu\nu}$  dus geassocieerd met de potentialen en de afgeleiden van  $g_{\mu\nu}$  met de veldsterkte.

De Kruskal-Szekeres coördinaten worden gebruikt om bepaalde problemen met de Schwarzschild metriek rond  $r = 2m$  op te lossen. Ze worden gegeven door:

- $r > 2m$ :

$$\begin{cases} u = \sqrt{\frac{r}{2m} - 1} \exp\left(\frac{r}{4m}\right) \cosh\left(\frac{t}{4m}\right) \\ v = \sqrt{\frac{r}{2m} - 1} \exp\left(\frac{r}{4m}\right) \sinh\left(\frac{t}{4m}\right) \end{cases}$$

- $r < 2m$ :

$$\begin{cases} u = \sqrt{1 - \frac{r}{2m}} \exp\left(\frac{r}{4m}\right) \sinh\left(\frac{t}{4m}\right) \\ v = \sqrt{1 - \frac{r}{2m}} \exp\left(\frac{r}{4m}\right) \cosh\left(\frac{t}{4m}\right) \end{cases}$$

- $r = 2m$ : hier zijn de Kruskal coördinaten singulier. Dit is noodzakelijk om de singulariteit van de coördinaten te elimineren.

Het lijnelement is in deze coördinaten gegeven door:

$$ds^2 = -\frac{32m^3}{r} e^{-r/2m} (dv^2 - du^2) + r^2 d\Omega^2$$

De lijn  $r = 2m$  komt overeen met  $u = v = 0$ , de limiet  $x^0 \rightarrow \infty$  met  $u = v$  en  $x^0 \rightarrow -\infty$  met  $u = -v$ . De Kruskal coördinaten zijn slechts singulier op de hyperbool  $v^2 - u^2 = 1$ , dit komt overeen met  $r = 0$ . Op de lijn  $dv = \pm du$  geldt  $d\theta = d\varphi = ds = 0$ .

Voor de metriek buiten een roterend, geladen sferisch lichaam geldt de Newman metriek:

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2mr - e^2}{r^2 + a^2 \cos^2 \theta}\right) c^2 dt^2 + \left(\frac{r^2 + a^2 \cos^2 \theta}{r^2 - 2mr + a^2 - e^2}\right) dr^2 + (r^2 + a^2 \cos^2 \theta) d\theta^2 + \left(r^2 + a^2 + \frac{(2mr - e^2)a^2 \sin^2 \theta}{r^2 + a^2 \cos^2 \theta}\right) \sin^2 \theta d\varphi^2 - \left(\frac{2a(2mr - e^2)}{r^2 + a^2 \cos^2 \theta}\right) \sin^2 \theta (d\varphi)(cdt)$$

met  $m = \kappa M/c^2$ ,  $a = L/Mc$  en  $e = \kappa Q/\varepsilon_0 c^2$ .

Een roterend geladen zwart gat heeft een waarnemingshorizon met  $R_S = m + \sqrt{m^2 - a^2 - e^2}$ .

Bij roterende zwarte gaten treedt frame dragging op omdat  $g_{t\varphi} \neq 0$ . In de Kerr-metriek ( $e = 0$ ,  $a \neq 0$ ) volgt dan dat binnen het oppervlak  $R_E = m + \sqrt{m^2 - a^2 \cos^2 \theta}$  (de ergosfeer) geen stilstand mogelijk is.

### 3.2.3 Planeetbanen en de periheliumverschuiving

Om een planeetbaan te vinden moet het variatieprobleem  $\delta \int ds = 0$  worden opgelost, hetgeen gelijkwaardig is met  $\delta \int ds^2 = \delta \int g_{ij} dx^i dx^j = 0$ . Invullen van de externe Schwarzschild metriek geeft voor de planeetbaan:

$$\frac{du}{d\varphi} \left( \frac{d^2 u}{d\varphi^2} + u \right) = \frac{du}{d\varphi} \left( 3mu + \frac{m}{h^2} \right)$$

waarin  $u := 1/r$  en  $h = r^2 \dot{\varphi} = \text{constant}$ . De term  $3mu$  ontbreekt in de klassieke oplossing. Deze term is in het klassieke geval ook te vinden met een potentiaal  $V(r) = -\frac{\kappa M}{r} \left( 1 + \frac{h^2}{r^2} \right)$ .

De baanvergelijking heeft als oplossing óf  $r = \text{constant}$ , óf kan, na uitdelen van  $du/d\varphi$ , worden opgelost met storingsrekening. In 0e orde geeft dit een ellipsbaan:  $u_0(\varphi) = A + B \cos(\varphi)$  met  $A = m/h^2$  en  $B$  een willekeurige constante. In 1e orde geeft dit:

$$u_1(\varphi) = A + B \cos(\varphi - \varepsilon\varphi) + \varepsilon \left( A + \frac{B^2}{2A} - \frac{B^2}{6A} \cos(2\varphi) \right)$$

waarin  $\varepsilon = 3m^2/h^2$  klein is. Het perihelium van een planeet is het punt waarvoor  $r$  minimaal is, ofwel  $u$  maximaal is. Dit is het geval als  $\cos(\varphi - \varepsilon\varphi) = 0 \Rightarrow \varphi \approx 2\pi n(1 + \varepsilon)$ . Voor de periheliumverschuiving volgt dan:  $\Delta\varphi = 2\pi\varepsilon = 6\pi m^2/h^2$  per omwenteling.



### 3.2.4 De baan van een foton

Voor de baan van een foton (en elk ander deeltje met rustmassa 0) geldt:  $ds^2 = 0$ . Invullen van de externe Schwarzschild metriek geeft voor de baanvergelijking:

$$\frac{du}{d\varphi} \left( \frac{d^2u}{d\varphi^2} + u - 3mu \right) = 0$$

### 3.2.5 Gravitatiegolven

Uitgaande van de benadering  $g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu}$  voor zwakke gravitatievelden, en de definitie  $h'_{\mu\nu} = h_{\mu\nu} - \frac{1}{2}\eta_{\mu\nu}h^\alpha_\alpha$ , volgt dat  $\square h'_{\mu\nu} = 0$  als voldaan is aan de ijkconditie  $\partial h'_{\mu\nu}/\partial x^\nu = 0$ . Hieruit volgt dat het energieverlies van een mechanisch systeem, als de erin optredende snelheden  $\ll c$  zijn en voor golf lengten  $\gg$  de afmetingen v.h. systeem, gegeven is door

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{G}{5c^5} \sum_{i,j} \left( \frac{d^3Q_{ij}}{dt^3} \right)^2$$

waarin  $Q_{ij} = \int \rho(x_i x_j - \frac{1}{3}\delta_{ij}r^2)d^3x$  het massaquadrupoolmoment is.

### 3.2.6 Kosmologie

Als voor het heelal als geheel aangenomen wordt:

1. Er bestaat een globale tijdcoördinaat die als  $x^0$  van een Gaussisch coördinatenstelsel fungeert,
2. De 3-dimensionale ruimtes zijn isotroop bij een zekere waarde van  $x^0$ ,
3. Elk punt is equivalent aan elk ander punt bij een vaste  $x^0$ .

dan volgt voor het lijnelement de *Robertson-Walker metriek*:

$$ds^2 = -c^2 dt^2 + \frac{R^2(t)}{r_0^2 \left(1 - \frac{kr^2}{4r_0^2}\right)} (dr^2 + r^2 d\Omega^2)$$

Voor de *schaalfactor*  $R(t)$  zijn de volgende vergelijkingen af te leiden:

$$\frac{2\ddot{R}}{R} + \frac{\dot{R}^2 + kc^2}{R^2} = -\frac{8\pi\kappa p}{c^2} + \Lambda \quad \text{en} \quad \frac{\dot{R}^2 + kc^2}{R^2} = \frac{8\pi\kappa\rho}{3} + \frac{\Lambda}{3}$$

met  $p$  de druk en  $\rho$  de dichtheid van het heelal. Als  $\Lambda = 0$  volgt dan voor de *vertragingparameter*  $q$ :

$$q = -\frac{\ddot{R}R}{\dot{R}^2} = \frac{4\pi\kappa\rho}{3H^2}$$

met  $H = \dot{R}/R$  de *Hubble constante*. Deze geeft aan hoe snel ver verwijderde sterrenstelsels zich van elkaar af bewegen, en heeft de waarde  $\approx (75 \pm 25) \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{Mpc}^{-1}$ . Er zijn nu 3 mogelijke toestanden waarin het heelal zich kan bevinden (met  $W$  de totale energie in het heelal):

1. **Parabolisch heelal:**  $k = 0$ ,  $W = 0$ ,  $q = \frac{1}{2}$ . De expansiesnelheid van het heelal  $\rightarrow 0$  als  $t \rightarrow \infty$ . De hierbij horende *kritische dichtheid* is  $\rho_c = 3H^2/8\pi\kappa$ .
2. **Hyperbolisch heelal:**  $k = -1$ ,  $W < 0$ ,  $q < \frac{1}{2}$ . De expansiesnelheid van het heelal blijft altijd positief.
3. **Elliptisch heelal:**  $k = 1$ ,  $W > 0$ ,  $q > \frac{1}{2}$ . De expansiesnelheid van het heelal wordt na verloop van tijd negatief: het heelal gaat dan weer inkrimpen.

# Hoofdstuk 4

## Trillingen

### 4.1 Harmonische trillingen

De algemene vorm van een harmonische trilling is:  $\Psi(t) = \hat{\Psi}e^{i(\omega t \pm \varphi)} \equiv \hat{\Psi} \cos(\omega t \pm \varphi)$ ,

waarin  $\hat{\Psi}$  de *amplitude* is. Indien meerdere harmonische trillingen met dezelfde frequentie gesuperponeerd worden is de resultante weer een harmonische trilling:

$$\sum_i \hat{\Psi}_i \cos(\alpha_i \pm \omega t) = \hat{\Phi} \cos(\beta \pm \omega t)$$

met:

$$\tan(\beta) = \frac{\sum_i \hat{\Psi}_i \sin(\alpha_i)}{\sum_i \hat{\Psi}_i \cos(\alpha_i)} \quad \text{en} \quad \hat{\Phi}^2 = \sum_i \hat{\Psi}_i^2 + 2 \sum_{j>i} \sum_i \hat{\Psi}_i \hat{\Psi}_j \cos(\alpha_i - \alpha_j)$$

Voor harmonische trillingen geldt:  $\int x(t)dt = \frac{x(t)}{i\omega}$  en  $\frac{d^n x(t)}{dt^n} = (i\omega)^n x(t)$ .

### 4.2 Mechanische trillingen

Voor een parallel geschakelde veer met veerconstante  $C$  en demping  $k$  waaraan een massa  $M$  bevestigd is waarop een periodieke kracht  $F(t) = \hat{F} \cos(\omega t)$  uitgeoefend wordt, geldt de bewegingsvergelijking  $m\ddot{x} = F(t) - k\dot{x} - Cx$ . In complexe amplitude is dit:  $-m\omega^2 x = F - Cx - ik\omega x$ . Met  $\omega_0^2 = C/m$  volgt:

$$x = \frac{F}{m(\omega_0^2 - \omega^2) + ik\omega}, \quad \text{en voor de snelheid geldt: } \dot{x} = \frac{F}{i\sqrt{Cm}\delta + k}$$

met  $\delta = \frac{\omega}{\omega_0} - \frac{\omega_0}{\omega}$  de *verstemming*. De grootheid  $Z = F/\dot{x}$  noemt men de *impedantie* van het systeem. De

*kwaliteit* van het systeem wordt gegeven door  $Q = \frac{\sqrt{Cm}}{k}$ .

De frequentie waarvoor  $|Z|$  minimaal is heet de *snelheidsresonantiefrequentie*. Deze is gelijk aan  $\omega_0$ . In de *resonantiekromme* is  $|Z|/\sqrt{Cm}$  uitgezet tegen  $\omega/\omega_0$ . De breedte van deze kromme is gekarakteriseerd door de punten waarbij  $|Z(\omega)| = |Z(\omega_0)|\sqrt{2}$ . In deze punten geldt:  $R = X$  en  $\delta = \pm Q^{-1}$ , en de breedte ervan is  $2\Delta\omega_B = \omega_0/Q$ .

De *stijfheid* van een trillend systeem is gegeven door  $F/x$ . De *amplituderesonantiefrequentie*  $\omega_A$  is de frequentie waarbij  $i\omega Z$  minimaal is. Dit is het geval bij  $\omega_A = \omega_0\sqrt{1 - \frac{1}{2}Q^2}$ .

De *dempingsfrequentie*  $\omega_D$  is een maat voor de snelheid waarmee een trillend systeem tot stilstand komt. Deze wordt gegeven door  $\omega_D = \omega_0\sqrt{1 - \frac{1}{4Q^2}}$ . Een zwak gedempte trilling ( $k^2 < 4mC$ ) sterft uit na  $T_D = 2\pi/\omega_D$ .

Voor een *kritisch gedempte* trilling ( $k^2 = 4mC$ ) geldt  $\omega_D = 0$ . Een sterk gedempte trilling ( $k^2 > 4mC$ ) valt af met (als  $k^2 \gg 4mC$ )  $x(t) \approx x_0 \exp(-t/\tau)$ .

### 4.3 Elektrische trillingen

De impedantie wordt gegeven door:  $Z = R + iX$ . Er geldt:  $\varphi := \arctan(X/R)$ . De impedantie van een weerstand is  $R$ , die van een capaciteit  $\frac{1}{i\omega C}$  en die van een zelfinductie  $i\omega L$ . De kwaliteit van een spoel is  $Q = \omega L/R$ . De totale impedantie in het geval van een aantal elementen is gegeven door:

1. Serieschakeling:  $V = IZ$ ,

$$Z_{\text{tot}} = \sum_i Z_i, \quad L_{\text{tot}} = \sum_i L_i, \quad \frac{1}{C_{\text{tot}}} = \sum_i \frac{1}{C_i}, \quad Q = \frac{Z_0}{R}, \quad Z = R(1 + iQ\delta)$$

2. parallelschakeling:  $V = IZ$ ,

$$\frac{1}{Z_{\text{tot}}} = \sum_i \frac{1}{Z_i}, \quad \frac{1}{L_{\text{tot}}} = \sum_i \frac{1}{L_i}, \quad C_{\text{tot}} = \sum_i C_i, \quad Q = \frac{R}{Z_0}, \quad Z = \frac{R}{1 + iQ\delta}$$

hierin is  $Z_0^2 = \frac{L}{C}$  en  $\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}}$ .

Het door een bron afgegeven vermogen is gegeven door  $P(t) = V(t) \cdot I(t)$ , dus  $\langle P \rangle_t = \hat{V}_{\text{eff}} \hat{I}_{\text{eff}} \cos(\Delta\phi) = \frac{1}{2} \hat{V} \hat{I} \cos(\phi_v - \phi_i) = \frac{1}{2} \hat{I}^2 \text{Re}(Z) = \frac{1}{2} \hat{V}^2 \text{Re}(1/Z)$ , waarin  $\cos(\Delta\phi)$  de arbeidsfactor is.

### 4.4 Golfgedrag in lange leidingen

Deze leidingen worden gebruikt voor signaaloverdracht, b.v. coaxkabels. Hier geldt  $Z_0 = \sqrt{\frac{dL}{dx} \frac{dx}{dC}}$ . De voortplantingssnelheid wordt gegeven door  $v = \sqrt{\frac{dx}{dL} \frac{dL}{dx}}$ .

### 4.5 Gekoppelde kringen en transformatoren

Voor 2 spoelen die een gedeelte van elkaars flux omvatten geldt: als  $\Phi_{12}$  het deel van de flux is die spoel 1 omvat en die afkomstig is van  $I_2$  door spoel 2, dan geldt  $\Phi_{12} = M_{12}I_2$ ,  $\Phi_{21} = M_{21}I_1$ . Voor de *coëfficiënten van wederkerige inductie*  $M_{ij}$  geldt:

$$M_{12} = M_{21} := M = k\sqrt{L_1 L_2} = \frac{N_1 \Phi_{12}}{I_2} = \frac{N_2 \Phi_{21}}{I_1} \sim N_1 N_2$$

met  $0 \leq k \leq 1$  de *koppelfactor*. Voor een transformator is  $k \approx 1$ . Bij volle belasting geldt:

$$\frac{V_1}{V_2} = \frac{I_2}{I_1} = -\frac{i\omega M}{i\omega L_2 + R_{\text{belasting}}} \approx -\sqrt{\frac{L_1}{L_2}} = -\frac{N_1}{N_2}$$

### 4.6 Slingers

De trillingstijd  $T = 1/f$ , en is voor verschillende typen slingers gegeven door:

- Trillende veer:  $T = 2\pi\sqrt{\frac{m}{C}}$  als de veerkracht gegeven is door  $F = C \cdot \Delta l$ .
- Fysische slinger:  $T = 2\pi\sqrt{\frac{I}{\tau}}$  met  $\tau$  het krachtmoment en  $I$  het traagheidsmoment.
- Torsieslinger:  $T = 2\pi\sqrt{\frac{I}{\kappa}}$  met  $\kappa = \frac{2lm}{\pi r^4 \Delta\varphi}$  de torsieconstante en  $I$  het traagheidsmoment.
- Mathematische slinger:  $T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$  met  $g$  de valversnelling en  $l$  de lengte van de slinger.

# Hoofdstuk 5

## Golven

### 5.1 De golfvergelijking

De algemene vorm van de homogene golfvergelijking is:  $\square u = 0$ , ofwel:

$$\nabla^2 u - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$$

met  $u$  de uitwijking en  $v$  de voortplantingssnelheid. Verder geldt in het algemeen:  $v = f\lambda$ . Per definitie geldt:  $k\lambda = 2\pi$  en  $\omega = 2\pi f$ .

Er zijn in principe 2 soorten golven:

1. Longitudinale golven: hiervoor geldt  $\vec{k} \parallel \vec{v} \parallel \vec{u}$ .
2. Transversale golven: hiervoor geldt  $\vec{k} \parallel \vec{v} \perp \vec{u}$ .

De fasesnelheid wordt gegeven door:  $v_f = \omega/k$ . De groepssnelheid wordt gegeven door:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = v_f + k \frac{dv_f}{dk} = v_f \left( 1 - \frac{k}{n} \frac{dn}{dk} \right)$$

waarin  $n$  de brekingsindex van het medium is. Als  $v_f$  niet afhangt van  $\omega$  geldt:  $v_f = v_g$ . In een dispergerend medium kan  $v_g > v_f$  of  $v_g < v_f$ , en  $v_g \cdot v_f = c^2$ . Als men informatie wil overbrengen met een golf, b.v. door modulatie van een EM golf, verplaatst de informatie zich met de snelheid waarmee een verandering in het EM veld zich voortplant. Deze is vaak vrijwel gelijk aan de groepssnelheid.

Voor verschillende media is de voortplantingssnelheid gegeven door:

- Drukgolven in een vloeistof of gas:  $v = \sqrt{\kappa/\rho}$ , met  $\kappa$  de compressiemodulus.
- Voor drukgolven in een gas geldt ook:  $v = \sqrt{\gamma p/\rho} = \sqrt{\gamma RT/M}$ .
- Drukgolven in een dunne vaste staaf als de diameter  $\ll \lambda$ :  $v = \sqrt{E/\rho}$
- Golven in een snaar:  $v = \sqrt{F_{\text{span}}/m}$
- Oppervlaktegolven op een vloeistof:  $v = \sqrt{\left( \frac{g\lambda}{2\pi} + \frac{2\pi\gamma}{\rho\lambda} \right) \tanh\left( \frac{2\pi h}{\lambda} \right)}$   
met  $h$  de diepte van de vloeistof en  $\gamma$  de oppervlaktetension. Als  $h \ll \lambda$  geldt:  $v \approx \sqrt{gh}$ .

### 5.2 Oplossingen van de golfvergelijking

#### 5.2.1 Vlakke golven

In  $n$  dimensies luidt de vergelijking voor een harmonische vlakke, staande golf:

$$u(\vec{x}, t) = 2^n \hat{u} \cos(\omega t) \sum_{i=1}^n \sin(k_i x_i)$$

De vergelijking van een harmonische lopende vlakke golf is:  $u(\vec{x}, t) = \hat{u} \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} \pm \omega t + \varphi)$

Als golven aan een uiteinde van een snaar reflecteren geeft een vast uiteinde een faseverandering aan de gereflecteerde golf van  $\pi/2$ , en er geldt als randvoorwaarde  $u(l) = 0$ . Een los uiteinde geeft geen faseverandering aan de gereflecteerde golf, en heeft als randvoorwaarde  $(\partial u / \partial x)_l = 0$ .

Als de waarnemer zich verplaatst t.o.v. de golf met een snelheid  $v_{\text{waarnemer}}$  zal de frequentie veranderen: het *Dopplereffect*. Hiervoor geldt:  $\frac{f}{f_0} = \frac{v_f - v_{\text{waarnemer}}}{v_f}$ .

### 5.2.2 Sferische golven

In het geval van sferische symmetrie is de homogene golfvergelijking:

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 (ru)}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 (ru)}{\partial r^2} = 0$$

met als algemene oplossing:

$$u(r, t) = C_1 \frac{f(r - vt)}{r} + C_2 \frac{g(r + vt)}{r}$$

### 5.2.3 Cylindrische golven

In het geval van cilindrische symmetrie is de homogene golfvergelijking:

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) = 0$$

Dit is een Besselvergelijking, met oplossingen die geschreven kunnen worden als Hankelfuncties. Voor voldoende grote waarden van  $r$  volgt hieruit:

$$u(r, t) = \frac{\hat{u}}{\sqrt{r}} \cos(k(r \pm vt))$$

### 5.2.4 De algemene oplossing in 1 dimensie

Uitgegaan wordt van de vergelijking

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = \sum_{m=0}^N \left( b_m \frac{\partial^m}{\partial x^m} \right) u(x, t)$$

met  $b_m \in \mathbb{R}$ . Er wordt  $u(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$  gesubstitueerd. Dit geeft twee oplossingen  $\omega_j = \omega_j(k)$  als dispersierelaties. De algemene oplossing wordt nu gegeven door:

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left( a(k) e^{i(kx - \omega_1(k)t)} + b(k) e^{i(kx - \omega_2(k)t)} \right) dk$$

Omdat in het algemeen de frequenties  $\omega_j$  niet lineair zijn in  $k$  is er dispersie en is de oplossing nu niet te schrijven als een som van functies die alleen afhangen van  $x \pm vt$ : het golffront vervormt.

## 5.3 De stationaire fasemethode

De Fourierintegralen van de vorige sectie zijn in het algemeen niet exact te berekenen. Als  $\omega_j(k) \in \mathbb{R}$  kan men dan de stationaire fasemethode toepassen. Men stelt dat als  $a(k)$  een langzaam veranderende functie van  $k$  is, de gedeelten van de  $k$ -as waar de fase  $kx - \omega(k)t$  snel verandert geen bijdragen tot de integraal leveren omdat de  $e$ -macht daar snel oscilleert. De enige gebieden die een bijdrage tot de integraal leveren is de omgeving van punten met een stationaire fase, bepaald door  $\frac{d}{dk}(kx - \omega(k)t) = 0$ . Nu volgt de benadering

$$\int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \approx \sum_{i=1}^N \sqrt{\frac{2\pi}{\frac{d^2 \omega(k_i)}{dk_i^2}}} \exp \left[ -i \frac{1}{4} \pi + i(k_i x - \omega(k_i)t) \right]$$

## 5.4 Greense functies voor het beginwaardenprobleem

Deze methode verdient de voorkeur als de gezochte oplossingen sterk afwijken van de stationaire oplossingen, zoals pulsformige excitaties. Uitgaande van de golfvergelijking in 1 dimensie, met  $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2$  geldt: zij  $Q(x, x', t)$  de oplossing met als beginvoorwaarden  $Q(x, x', 0) = \delta(x - x')$  en  $\frac{\partial Q(x, x', 0)}{\partial t} = 0$ , en  $P(x, x', t)$  de oplossing met als beginvoorwaarden  $P(x, x', 0) = 0$  en  $\frac{\partial P(x, x', 0)}{\partial t} = \delta(x - x')$ , dan is de oplossing van de golfvergelijking met willekeurige beginvoorwaarden  $f(x) = u(x, 0)$  en  $g(x) = \frac{\partial u(x, 0)}{\partial t}$  gegeven door:

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x')Q(x, x', t)dx' + \int_{-\infty}^{\infty} g(x')P(x, x', t)dx'$$

$P$  en  $Q$  worden ook wel de *propagatoren* genoemd. Ze worden gegeven door:

$$Q(x, x', t) = \frac{1}{2}[\delta(x - x' - vt) + \delta(x - x' + vt)]$$

$$P(x, x', t) = \begin{cases} \frac{1}{2v} & \text{als } |x - x'| < vt \\ 0 & \text{als } |x - x'| > vt \end{cases}$$

Verder geldt het verband:  $Q(x, x', t) = \frac{\partial P(x, x', t)}{\partial t}$

## 5.5 Golfpijpen en trilholtten

Uit de Maxwellvergelijkingen volgen de randvoorwaarden aan een perfecte geleider. Zij  $\vec{n}$  een eenheidsvector  $\perp$  het oppervlak, gericht van 1 naar 2, en  $\vec{K}$  een oppervlakte stroomdichtheid. Dan geldt:

$$\vec{n} \cdot (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) = \sigma \quad \vec{n} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) = 0$$

$$\vec{n} \cdot (\vec{B}_2 - \vec{B}_1) = 0 \quad \vec{n} \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) = \vec{K}$$

In een golfpijp geldt, vanwege de cilindrische symmetrie:  $\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{\mathcal{E}}(x, y)e^{i(kz - \omega t)}$  en  $\vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{\mathcal{B}}(x, y)e^{i(kz - \omega t)}$ . Men kan nu afleiden, als  $\mathcal{B}_z$  en  $\mathcal{E}_z$  niet  $\equiv 0$  zijn:

$$\mathcal{B}_x = \frac{i}{\varepsilon\mu\omega^2 - k^2} \left( k \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial x} - \varepsilon\mu\omega \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial y} \right) \quad \mathcal{B}_y = \frac{i}{\varepsilon\mu\omega^2 - k^2} \left( k \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial y} + \varepsilon\mu\omega \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial x} \right)$$

$$\mathcal{E}_x = \frac{i}{\varepsilon\mu\omega^2 - k^2} \left( k \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial x} + \varepsilon\mu\omega \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial y} \right) \quad \mathcal{E}_y = \frac{i}{\varepsilon\mu\omega^2 - k^2} \left( k \frac{\partial \mathcal{E}_z}{\partial y} - \varepsilon\mu\omega \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial x} \right)$$

Er zijn nu 3 situaties mogelijk:

1.  $\mathcal{B}_z \equiv 0$ : de Transversaal Magnetische modes (TM). Randvoorwaarde:  $\mathcal{E}_z|_{\text{opp}} = 0$ .
2.  $\mathcal{E}_z \equiv 0$ : de Transversaal Elektrische modes (TE). Randvoorwaarde:  $\frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial n} \Big|_{\text{opp}} = 0$ .

Voor de TE en TM modes geeft dit een eigenwaardeprobleem voor  $\mathcal{E}_z$  resp.  $\mathcal{B}_z$  met de betreffende randvoorwaarden:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi = -\gamma^2 \psi \quad \text{met eigenwaarden } \gamma^2 := \varepsilon\mu\omega^2 - k^2$$

Dit geeft een discrete oplossing  $\psi_\ell$  bij eigenwaarde  $\gamma_\ell^2$ :  $k = \sqrt{\varepsilon\mu\omega^2 - \gamma_\ell^2}$ . Dit is te schrijven als:  $k = c\sqrt{\omega^2 - \omega_\ell^2}$ . Voor  $\omega < \omega_\ell$  is  $k$  imaginair en is de golf gedempt. Daarom wordt  $\omega_\ell$  de *afsnijfrequentie* genoemd. In rechthoekige geleiders vindt men voor de afsnijfgolflengte bij mode TE $_{m,n}$  of TM $_{m,n}$ :

$$\lambda_\ell = \frac{2}{\sqrt{(m/a)^2 + (n/b)^2}}$$

3.  $E_z$  en  $B_z$  zijn overal 0: de Transversaal elektromagnetische mode (TEM). Dan geldt:  $k = \pm\omega \sqrt{\varepsilon\mu}$  en  $v_f = v_g$ , net als zonder golfgeleider. Verder is  $k \in \mathbb{R}$ , zodat er geen afsnijfrequenties bestaan.

In een rechthoekige, 3 dimensionale trilholtte met ribben  $a$ ,  $b$  en  $c$  zijn de mogelijke golfgetallen gegeven door:  $k_x = \frac{n_1\pi}{a}$ ,  $k_y = \frac{n_2\pi}{b}$ ,  $k_z = \frac{n_3\pi}{c}$ . Dit geeft voor de mogelijke frequenties  $f = vk/2\pi$  in de trilholtte:

$$f = \frac{v}{2} \sqrt{\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}}$$

Voor een kubische trilholtte, met  $a = b = c$ , vindt men voor het aantal mogelijke trilwijzen (modes)  $N_L$  voor longitudinale golven:

$$N_L = \frac{4\pi a^3 f^3}{3v^3}$$

Omdat transversale golven 2 polarisatietoestanden hebben geldt hiervoor:  $N_T = 2N_L$ .

## 5.6 Niet-lineaire golfvergelijkingen

De *Van der Pol* vergelijking is:

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \varepsilon\omega_0(1 - \beta x^2)\frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = 0$$

voor zeer kleine amplitudes kan men  $\beta x^2$  verwaarlozen. Substitutie van  $x \sim e^{i\omega t}$  geeft:  $\omega = \frac{1}{2}\omega_0(i\varepsilon \pm 2\sqrt{1 - \frac{1}{2}\varepsilon^2})$ . De laagste orde instabiliteiten groeien echter aan met  $\frac{1}{2}\varepsilon\omega_0$ . Met het groeien van  $x$  wordt de 2e term echter weer groter en deze remt de groei. Er kunnen oscillaties optreden op een tijdschaal  $\sim \omega_0^{-1}$ . Als  $x$  ontwikkeld wordt volgens  $x = x^{(0)} + \varepsilon x^{(1)} + \varepsilon^2 x^{(2)} + \dots$  en men dit substitueert, geeft dit, naast periodieke, ook *seculiere termen*  $\sim \varepsilon t$ . Aangenomen dat er een aantal tijdschalen  $\tau_n$ ,  $0 \leq \tau \leq N$  bestaat zo dat  $\partial\tau_n/\partial t = \varepsilon^n$  en als de seculiere termen 0 gesteld worden geeft dit:

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega_0^2 x^2 \right\} = \varepsilon\omega_0(1 - \beta x^2) \left( \frac{dx}{dt} \right)^2$$

Dit is een energievergelijking. Er is energiebehoud als het linkerlid 0 is. Als  $x^2 > 1/\beta$  verandert het rechterlid van teken en wordt een energietoename omgezet in een energieafname. Dit beperkt de groei van oscillaties.

De *Korteweg-De Vries* vergelijking is:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \underbrace{au \frac{\partial u}{\partial x}}_{\text{niet-lin}} + \underbrace{b^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}}_{\text{dispersief}} = 0$$

Deze vergelijking is b.v. een model voor ionen-akoustische golven in een plasma. Er bestaan soliton oplossingen voor deze vergelijking van de vorm:

$$u(x - ct) = \frac{-d}{\cosh^2(e(x - ct))}$$

met  $c = 1 + \frac{1}{3}ad$  en  $e^2 = ad/(12b^2)$ .

# Hoofdstuk 6

## Optica

### 6.1 Lichtbreking

Voor de breking aan een oppervlak geldt:  $n_i \sin(\theta_i) = n_t \sin(\theta_t)$  waarin  $n$  de *brekingsindex* van het materiaal is. Er geldt de wet van Snellius:

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{v_1}{v_2}$$

Indien  $\Delta n \leq 1$  is de faseverandering van de lichtstraal  $\Delta\varphi = 0$ , indien  $\Delta n > 1$  geldt:  $\Delta\varphi = \pi$ . De breking van licht in een materiaal wordt veroorzaakt door verstrooiing aan atomen. Men kan stellen dat

$$n^2 = 1 + \frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m} \sum_j \frac{f_j}{\omega_{0,j}^2 - \omega^2 - i\delta\omega}$$

met  $n_e$  de elektronendichtheid en  $f_j$  de *oscillator sterkte*, waarvoor geldt:  $\sum_j f_j = 1$ . Hieruit volgt dat  $v_g = c/(1 + (n_e e^2/2\epsilon_0 m \omega^2))$ . Hieruit volgt de formule van Cauchy:  $n = a_0 + a_1/\lambda^2$ . Algemeener kan men  $n$  ontwikkelen als:  $n = \sum_{k=0}^n \frac{a_k}{\lambda^{2k}}$ .

Voor een elektromagnetische golf geldt in het algemeen:  $n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r}$ .

De weg die een lichtstraal in een materiaal aflegt kan men ook vinden via het *principe van Fermat*:

$$\delta \int_1^2 dt = \delta \int_1^2 \frac{n(s)}{c} ds = 0 \Rightarrow \delta \int_1^2 n(s) ds = 0$$

### 6.2 Paraxiale geometrische optica

#### 6.2.1 Lenzen

De lenzenformule is af te leiden uit het principe van Fermat met de benaderingen  $\cos \varphi = 1$  en  $\sin \varphi = \varphi$ . Voor de breking aan een boloppervlak met straal  $R$  geldt:

$$\frac{n_1}{v} - \frac{n_2}{b} = \frac{n_1 - n_2}{R}$$

met  $|v|$  de voorwerpsafstand en  $|b|$  de beeldafstand. Door dit 2 maal toe te passen krijgt men:

$$\frac{1}{f} = (n_1 - 1) \left( \frac{1}{R_2} - \frac{1}{R_1} \right)$$

met  $n_1$  de brekingsindex van de lens,  $f$  de brandpuntsafstand en  $R_1$  en  $R_2$  de kromtestralen van de beide oppervlakken. Voor een dubbel bolle lens is  $R_1 < 0$ ,  $R_2 > 0$ , voor een dubbelholle lens is  $R_1 > 0$  en  $R_2 < 0$ . Verder geldt ook:

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{v} - \frac{1}{b}$$



$D := 1/f$  noemt men ook de sterkte van de lens. Voor een lens met dikte  $d$  en diameter  $D$  geldt in goede benadering:  $1/f = 8(n-1)d/D^2$ . Voor 2 lenzen achter elkaar met onderlinge afstand  $d$  geldt:

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{f_1} + \frac{1}{f_2} - \frac{d}{f_1 f_2}$$

In deze formules zijn de volgende tekenafspraken gebruikt voor breking aan een bolvormig oppervlak, zoals gezien door de invallende lichtstraal:

Grootheid	+	-
$R$	Hol oppervlak	Bol oppervlak
$f$	Convergerende lens	Divergerende lens
$v$	Reëel voorwerp	Virtueel voorwerp
$b$	Virtueel beeld	Reëel beeld

## 6.2.2 Spiegels

Voor beeldvorming aan een spiegel geldt:

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{v} + \frac{1}{b} = \frac{2}{R} + \frac{h^2}{2} \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{v} \right)^2$$

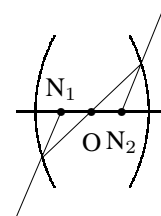
met  $h$  de loodrechte afstand van het punt van inval op de spiegel tot de optische as. Sferische aberratie kan men verminderen door geen bolvormige spiegels te gebruiken. Een parabolische spiegel heeft geen sferische aberratie voor stralen die evenwijdig aan de optische as invallen en wordt daarom veel voor telescopen gebruikt. De gebruikte tekenafspraken zijn:

Grootheid	+	-
$R$	Holle spiegel	Bolle spiegel
$f$	Holle spiegel	Bolle spiegel
$v$	Reëel voorwerp	Virtueel voorwerp
$b$	Reëel beeld	Virtueel beeld

## 6.2.3 Hoofdvlakken

De *nodale punten*  $N$  van een lens worden gedefinieerd door de figuur hiernaast. Als de lens aan beide kanten door hetzelfde medium omringd wordt vallen de nodale punten samen met de hoofdpunten  $H$ . Het vlak  $\perp$  op de optische as en door de hoofdpunten is het hoofdvlak. Als de lens beschreven wordt door de matrix  $m_{ij}$  geldt voor de afstanden van  $h_1$  en  $h_2$  tot de rand van de lens:

$$h_1 = n \frac{m_{11} - 1}{m_{12}}, \quad h_2 = n \frac{m_{22} - 1}{m_{12}}$$



## 6.2.4 Vergroting

De *lineaire vergroting* is gedefinieerd door:  $N = -\frac{b}{v}$

De *hoekvergroting* is gedefinieerd door:  $N_\alpha = -\frac{\alpha_{\text{met}}}{\alpha_{\text{zond}}}$

met  $\alpha_{\text{met}}$  de gezichtshoek met het optisch systeem en  $\alpha_{\text{zond}}$  de gezichtshoek zonder. Verder geldt:  $N \cdot N_\alpha = 1$ . Voor een telescoop geldt:  $N = f_{\text{objectief}}/f_{\text{oculair}}$ . De *openingsverhouding* is gedefinieerd door  $f/D_{\text{objectief}}$ .

### 6.3 Matrixmethoden

Men kan de verandering van de toestandsvector die een lichtstraal beschrijft, met componenten  $(n\alpha, y)$  berekenen door ze met een matrix te vermenigvuldigen.  $\alpha$  is de hoek die de lichtstraal maakt met de optische as en  $y$  de hoogte van de lichtstraal boven de optische as. De vergelijking is:

$$\begin{pmatrix} n_2\alpha_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} n_1\alpha_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$$

met  $\text{Tr}(M) = 1$ .  $M$  is het product van elementaire matrices. Deze zijn:

1. Voor een drifruimte van lengte  $l$ :  $M_R = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ l/n & 1 \end{pmatrix}$
2. Voor een brekend oppervlak met sterkte  $D$ :  $M_T = \begin{pmatrix} 1 & -D \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

### 6.4 Afbeeldingsfouten

Lenzen geven meestal geen perfect beeld. Enkele oorzaken hiervoor zijn:

1. Chromatische aberratie: dit wordt veroorzaakt door het feit dat  $n = n(\lambda)$ . Men kan dit (gedeeltelijk) compenseren met een lens die opgebouwd is uit meerdere lenzen met verschillende functies  $n_i(\lambda)$ . Met  $N$  lenzen kan men  $f$  voor  $N$  golflengten gelijk maken.
2. Sferische aberratie: dit wordt veroorzaakt door 2e orde effecten die meestal verwaarloosd worden: een boloppervlak geeft geen perfecte lens. Stralen die ver van de optische as invallen worden dan sterker gebroken.
3. Coma: dit wordt veroorzaakt door het feit dat de hoofdvlakken van een lens slechts vlak zijn dichtbij de optische as. Verder weg zijn ze gekromd. Er kan sprake zijn van positieve of negatieve coma.
4. Astigmatisme: van een object dat niet op de optische as ligt wordt een punt afgebeeld op een ellips vanwege het feit dat de lens niet overal even dik is.
5. Veldkromming: het oog kan hiervoor compenseren.
6. Distorsie: dit geeft vertekeningen aan de randen. Dit is met een combinatie van positieve en negatieve lenzen op te heffen.

### 6.5 Reflectie en transmissie

Indien een elektromagnetische golf op een doorzichtig medium valt zal een deel van de golf reflecteren onder dezelfde hoek als de hoek van inval en zal een deel van de golf getransmitteerd worden onder een hoek die uit de wet van Snellius volgt. Bovendien maakt het nog verschil of het  $\vec{E}$  veld van de golf  $\perp$  of  $\parallel$  aan het oppervlak staat. Definieer de reflectiecoëfficiënten  $r$  en de transmissiecoëfficiënten  $t$  als:

$$r_{\parallel} \equiv \left( \frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)_{\parallel}, \quad r_{\perp} \equiv \left( \frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)_{\perp}, \quad t_{\parallel} \equiv \left( \frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right)_{\parallel}, \quad t_{\perp} \equiv \left( \frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right)_{\perp}$$

waarin  $E_{0r}$  de gereflecteerde amplitude is en  $E_{0t}$  de getransmitteerde amplitude. Dan luiden de vergelijkingen van Fresnel:

$$r_{\parallel} = \frac{\tan(\theta_i - \theta_t)}{\tan(\theta_i + \theta_t)}, \quad r_{\perp} = \frac{\sin(\theta_t - \theta_i)}{\sin(\theta_t + \theta_i)}$$

$$t_{\parallel} = \frac{2 \sin(\theta_t) \cos(\theta_i)}{\sin(\theta_t + \theta_i) \cos(\theta_t - \theta_i)}, \quad t_{\perp} = \frac{2 \sin(\theta_t) \cos(\theta_i)}{\sin(\theta_t + \theta_i)}$$

Er geldt:  $t_{\perp} - r_{\perp} = 1$  en  $t_{\parallel} + r_{\parallel} = 1$ . Wanneer de reflectiecoëfficiënt  $R$  en de transmissiecoëfficiënt  $T$  gedefinieerd worden als (met  $\theta_i = \theta_r$ ):

$$R \equiv \frac{I_r}{I_i} \quad \text{en} \quad T \equiv \frac{I_t \cos(\theta_t)}{I_i \cos(\theta_i)}$$

met  $I = \langle |\vec{S}| \rangle$  volgt:  $R+T = 1$ . Een bijzonder geval treedt op als  $r_{\parallel} = 0$ . Dit is het geval als de gereflecteerde en de getransmitteerde stralen  $\perp$  op elkaar staan. Uit de wet van Snellius volgt dan:  $\tan(\theta_i) = n$ . Deze hoek heet de *Brewster hoek*. De situatie waarin  $r_{\perp} = 0$  kan niet voorkomen.

## 6.6 Polarisatie

De polarisatie is gedefinieerd als:  $P = \frac{I_p}{I_p + I_u} = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}}$

waarin  $I_p$  de intensiteit van het gepolariseerde licht is en  $I_u$  de intensiteit van het onpolariseerde licht.  $I_{\max}$  en  $I_{\min}$  zijn de maximum en minimum intensiteiten wanneer men het licht door een polarisator laat vallen. Indien een bundel gepolariseerd licht door een polarisator valt geldt de *wet van Malus*:  $I(\theta) = I(0) \cos^2(\theta)$  waarin  $\theta$  de polarisatorhoek is.

De toestand van een lichtstraal is aan te geven met de *Stokes-parameters*: uitgaande van 4 filters die elk de helft van de intensiteit doorlaten, waarbij het 1e onafhankelijk van de polarisatie is, het 2e en 3e lineaire polarisatoren met transmissieassen horizontaal en onder  $+45^\circ$ , terwijl het 4e een circulaire polarisator is die ondoorzichtig is voor  $L$ -toestanden. Dan geldt  $S_1 = 2I_1$ ,  $S_2 = 2I_2 - 2I_1$ ,  $S_3 = 2I_3 - 2I_1$  en  $S_4 = 2I_4 - 2I_1$ .

De toestand van een *gepolariseerde* lichtstraal is ook aan te geven met de *Jones vector*:

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} E_{0x} e^{i\varphi_x} \\ E_{0y} e^{i\varphi_y} \end{pmatrix}$$

Voor de horizontale  $P$ -toestand geldt:  $\vec{E} = (1, 0)$ , voor de verticale  $P$ -toestand  $\vec{E} = (0, 1)$ , de  $R$ -toestand is gegeven door  $\vec{E} = \frac{1}{2}\sqrt{2}(1, -i)$  en de  $L$ -toestand door  $\vec{E} = \frac{1}{2}\sqrt{2}(1, i)$ . De verandering in de toestand van de lichtstraal na het passeren van een optisch instrument is weer te geven als:  $\vec{E}_2 = M \cdot \vec{E}_1$ . De Jones matrix  $M$  is voor verschillende optische instrumenten gegeven door:

Horizontale lineaire polarisator:  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

Verticale lineaire polarisator:  $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Lineaire polarisator onder  $+45^\circ$ :  $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

Lineaire polarisator onder  $-45^\circ$ :  $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$

$\frac{1}{4}$ - $\lambda$  plaatje, snelle as vertikaal:  $e^{i\pi/4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$

$\frac{1}{4}$ - $\lambda$  plaatje, snelle as horizontaal:  $e^{i\pi/4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$

Homogene circulaire polarisator rechtsom:  $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$

Homogene circulaire polarisator linksom:  $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}$

## 6.7 Prisma's en dispersie

Een lichtstraal die door een prisma gaat wordt 2 maal gebroken en krijgt een deviatie  $\delta = \theta_i + \theta_{i'} + \alpha$  t.o.v. de invalrichting, waarin  $\alpha$  de tophoek van het prisma is,  $\theta_i$  de hoek die de invallende lichtstraal met de normaal op het oppervlak maakt en  $\theta_{i'}$  de hoek die de uitredende lichtstraal met de normaal op het uitreeppervlak maakt. Wanneer men  $\theta_i$  laat variëren is er een hoek waarvoor  $\delta$  een minimum bereikt. Voor de brekingsindex van het prisma volgt nu:

$$n = \frac{\sin(\frac{1}{2}(\delta_{\min} + \alpha))}{\sin(\frac{1}{2}\alpha)}$$

De dispersie van een prisma is gedefinieerd door:

$$D = \frac{d\delta}{d\lambda} = \frac{d\delta}{dn} \frac{dn}{d\lambda}$$

waarin de 1e factor van de vorm en de 2e van het materiaal van het prisma afhangt. Er geldt:

$$\frac{d\delta}{dn} = \frac{2 \sin(\frac{1}{2}\alpha)}{\cos(\frac{1}{2}(\delta_{\min} + \alpha))}$$

Voor licht geldt meestal dat  $dn/d\lambda < 0$ : kortgolvig licht wordt sterker gebroken dan langgolvig. Men kan  $n$  in dit gebied meestal goed benaderen met de formule van Cauchy.

## 6.8 Diffractie

Fraunhofer diffractie vind plaats ver van de bron(nen). De Fraunhofer diffractie van licht dat door een tralie valt wordt beschreven door:

$$\frac{I(\theta)}{I_0} = \left( \frac{\sin(u)}{u} \right)^2 \cdot \left( \frac{\sin(Nv)}{\sin(v)} \right)^2$$

waarin  $u = \pi b \sin(\theta)/\lambda$ ,  $v = \pi d \sin(\theta)/\lambda$ .  $N$  is het aantal spleten,  $b$  is de breedte van een spleet en  $d$  de afstand tussen de spleten. De maxima in intensiteit voldoen aan:  $d \sin(\theta) = k\lambda$ .

De diffractie door een cirkelvormige apertuur met straal  $a$  wordt beschreven door:

$$\frac{I(\theta)}{I_0} = \left( \frac{J_1(ka \sin(\theta))}{ka \sin(\theta)} \right)^2$$

Het diffractiepatroon door een rechthoekige apertuur op een afstand  $R$  met zijden  $a$  in de  $x$ -richting en  $b$  in de  $y$ -richting wordt beschreven door:

$$\frac{I(x, y)}{I_0} = \left( \frac{\sin(\alpha')}{\alpha'} \right)^2 \left( \frac{\sin(\beta')}{\beta'} \right)^2$$

met  $\alpha' = kax/2R$  en  $\beta' = kby/2R$ .

Wanneer men Röntgenstralen laat verstrooien aan een kristal geldt voor de positie van de intensiteitsmaxima de relatie van Bragg:  $2d \sin(\theta) = n\lambda$  waarin  $d$  de afstand is tussen de kristalvlakken.

Dichtbij de bron is het Fraunhofermodel niet meer bruikbaar omdat het de hoekafhankelijkheden van de teruggekaatste golven verwaarloost. Dit komt tot uitdrukking in de *inclinatiefactor* die de richtingsafhankelijkheid van de 2e orde emissies beschrijft:  $E(\theta) = \frac{1}{2}E_0(1 + \cos(\theta))$  waarin  $\theta$  de hoek met de optische as is.

Diffractie geeft een uiterste grens aan het *scheidend vermogen* van een systeem. Dit is de minimum hoek  $\Delta\theta_{\min}$  tussen 2 invallende golven komende van verre punten waarbij hun buigingspatronen nog gescheiden waar te nemen zijn. Voor een cirkelvormige spleet geldt:  $\Delta\theta_{\min} = 1,22\lambda/D$  waarin  $D$  de diameter van de opening is.

Voor een grating geldt:  $\Delta\theta_{\min} = 2\lambda/(Na \cos(\theta_m))$  met  $a$  de afstand tussen de pieken,  $N$  het aantal pieken. Voor een tralie is het minimale verschil tussen 2 golflengtes dat nog een gescheiden diffractiepatroon geeft:  $\Delta\lambda/\lambda = nN$  met  $N$  het aantal lijnen en  $n$  de orde van het diffractiepatroon.

## 6.9 Bijzondere optische effecten

- **Dubbele breking en dichroïsme.** Als de polariseerbaarheid  $\vec{P}$  van een materiaal niet in alle richtingen gelijk is, is  $\vec{D}$  niet meer parallel aan  $\vec{E}$ . Er zijn tenminste 3 richtingen, de *hoofdassen*, waarin ze wel parallel zijn. Dit geeft 3 brekingsindices  $n_i$ , waarmee de ellipsoïde van Fresnel te construeren is. Voor het geval  $n_2 = n_3 \neq n_1$ , dat o.a. optreedt bij trigonale, hexagonale en tetragonale kristalstelsels is er sprake van 1 optische as, behorend bij de richting van  $n_1$ . Invallend licht is nu te splitsen in 2 componenten: de *gewone golf* is lineair gepolariseerd  $\perp$  het vlak door de voortplantingsrichting en de optische as. De *buitengewone golf* is lineair gepolariseerd in het vlak door de voortplantingsrichting en de optische as. *Dichroïsme* wordt veroorzaakt doordat sommige materialen de gewone en buitengewone golven zeer verschillend absorberen. *Dubbele breking* ontstaat als de invallende lichtstraal een hoek maakt met de optische as: de buitengewone golf zal breken, de gewone niet.
- **Retarders: golfplaten en compensatoren.** Als men een 1-assig kristal slijpt z.d.d. de optische as  $\parallel$  staat aan het voor- en achtervlak zal opvallend licht een faseverandering ondergaan van  $\Delta\varphi = 2\pi d(|n_o - n_e|)/\lambda_0$  met  $\lambda_0$  de golflengte in vacuüm en  $n_o$  en  $n_e$  de brekingsindices voor de gewone en de buitengewone golf. Voor een  $\frac{1}{4}$ - $\lambda$  plaat geldt:  $\Delta\varphi = \pi/2$ .
- **Het Kerr-effect:** Een isotrope transparante stof kan dubbelbrekend worden als ze geplaatst wordt in een elektrisch veld. De optische as is in dat geval  $\parallel$  aan die van  $\vec{E}$ . Het verschil in brekingsindex in de 2 richtingen is gegeven door:  $\Delta n = \lambda_0 K E^2$  met  $K$  de Kerr constante van het materiaal. Als  $\ell$  de effectieve lengte van de elektroden is, die op een onderlinge afstand  $d$  staan onder een spanning  $V$  volgt:  $\Delta\varphi = 2\pi K \ell V^2 / d^2$ .
- **Het Pockels** of lineair elektro-optische effect kan in de 20 (van de in totaal 32) kristal-symmetriegroepen, nl. degene zonder symmetriecentrum, voorkomen. Deze kristallen zijn tevens *piezo-elektrisch*: een aangebrachte druk verandert de polarisatie, een elektrische spanning verandert de elastische spanning:  $\vec{P} = dp\vec{e}_p + \varepsilon_0\chi\vec{E}$ . De retardatie in een Pockels cel is  $\Delta\varphi = 2\pi n_0^3 r_{63} V / \lambda_0$  waarin  $r_{63}$  het 6-3 element van de elektro-optische tensor is.
- **Het Faraday effect:** de polarisatierichting van lineair gepolariseerd licht dat op een materiaal valt met lengte  $d$  waarop een  $\vec{B}$  veld staat in de voortplantingsrichting draait met een hoek  $\beta = \mathcal{V} B d$  waarin  $\mathcal{V}$  de *constante van Verdet* is.
- **Čerenkov straling** ontstaat wanneer een geladen deeltje met  $v_q > v_f$  binnenkomt. De straling wordt uitgezonden in een kegel met tophoek  $\alpha$ , en  $\sin(\alpha) = c/c_{\text{medium}} = c/nv_q$ .

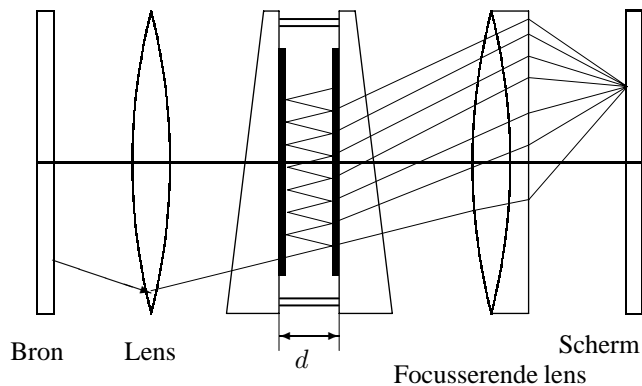
## 6.10 De Fabry-Perot interferometer

Voor een Fabry-Perot interferometer geldt in het algemeen:  $T + R + A = 1$  met  $T$  de transmissiefactor,  $R$  de reflectiefactor en  $A$  de absorptiefactor. Als  $F$  gegeven is door  $F = 4R/(1 - R)^2$  geldt voor de intensiteitsverdeling:

$$\frac{I_t}{I_i} = \left[1 - \frac{A}{1 - R}\right]^2 \frac{1}{1 + F \sin^2(\theta)}$$

Hierin is de term  $[1 + F \sin^2(\theta)]^{-1} := A(\theta)$  de *Airy functie*.

De breedte van de pieken op halve hoogte wordt gegeven door  $\gamma = 4/\sqrt{F}$ . De *finesse*  $\mathcal{F}$  is gedefinieerd als  $\mathcal{F} = \frac{1}{2}\pi\sqrt{F}$ . De minimaal oplosbare bandbreedte is  $\Delta f_{\min} = c/2nd\mathcal{F}$ .



# Hoofdstuk 7

## Statistische fysica

### 7.1 Vrijheidsgraden

Het aantal vrijheidsgraden  $s$  van een molecuul van  $n$  atomen is  $s = 3n$ . Het aantal vrijheidsgraden van beweging is 3, het aantal vrijheidsgraden van vibratie is voor een lijnvormig molecuul  $s = 3n - 5$ , voor een niet-lijnvormig molecuul geldt:  $s = 3n - 6$ . Het aantal rotatievrijheidsgraden voor een lijnvormig molecuul is 2, voor een niet-lijnvormig molecuul 3.

Omdat vrijheidsgraden voor vibratie dubbel tellen vanwege het feit dat deze zowel potentiële als kinetische energie vertegenwoordigen, geldt in totaal voor lijnvormige moleculen:  $s = 6n - 5$  en voor niet-lijnvormige moleculen:  $s = 6n - 6$ . De gemiddelde totale energie van een molecuul in thermisch evenwicht is  $\langle E_{\text{tot}} \rangle = \frac{1}{2}skT$ . Elke vrijheidsgraad van het molecuul heeft in principe evenveel energie. Dit heet het *equipartitiebeginsel*.

De rotationele en vibratoire energie van een molecuul zijn:

$$W_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) = Bl(l+1), \quad W_{\text{vib}} = (v + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$$

De vibratieniveaus zijn slechts aangeslagen als  $kT \approx \hbar\omega$ , de rotatieniveaus van een heteronucleair molecuul zijn slechts aangeslagen als  $kT \approx 2B$ . Voor homonucleaire moleculen gelden extra selectieregels waardoor de rotatieniveaus pas goed gekoppeld raken aan de translatieenergie als  $kT \approx 6B$ .

### 7.2 De energieverdelingsfunctie

De algemene vorm van de evenwichtssnelheidsverdelingsfunctie is

$P(v_x, v_y, v_z)dv_x dv_y dv_z = P(v_x)dv_x \cdot P(v_y)dv_y \cdot P(v_z)dv_z$  met

$$P(v_i)dv_i = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{v_i^2}{\alpha^2}\right) dv_i$$

met  $\alpha = \sqrt{2kT/m}$  de *meest waarschijnlijke snelheid* van een deeltje. De gemiddelde snelheid wordt gegeven door  $\langle v \rangle = 2\alpha/\sqrt{\pi}$ , en  $\langle v^2 \rangle = \frac{3}{2}\alpha^2$ . Als er alleen naar de absolute waarde van de snelheid gekeken wordt geldt in evenwicht de verdelingsfunctie:

$$\frac{dN}{dv} = \frac{4N}{\alpha^3\sqrt{\pi}} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)$$

De algemene vorm van de energieverdelingsfunctie in evenwicht wordt nu:

$$P(E)dE = \frac{c(s)}{kT} \left(\frac{E}{kT}\right)^{\frac{1}{2}s-1} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE$$

$c(s)$  is een normeringsconstante waarvoor geldt:

1. Even  $s$ :  $s = 2l$ :  $c(s) = \frac{1}{(l-1)!}$

2. Oneven  $s$ :  $s = 2l + 1$ :  $c(s) = \frac{2^l}{\sqrt{\pi}(2l-1)!!}$

### 7.3 Druk op een wand

Het aantal moleculen dat binnen een tijd  $\tau$  botst met een wand met oppervlakte  $A$  is gegeven door:

$$\iiint d^3N = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} nAv\tau \cos(\theta)P(v, \theta, \varphi)dv d\theta d\varphi$$

Dit geeft voor de deeltjesflux op de wand:  $\Phi = \frac{1}{4}n \langle v \rangle$ . Voor de druk op de wand geldt dan:

$$d^3p = \frac{2mv \cos(\theta)d^3N}{A\tau}, \quad \text{dit geeft } p = \frac{2}{3}n \langle E \rangle$$

### 7.4 De toestandsvergelijking

Voor gassen geldt in goede benadering als de intermoleculaire krachten en het eigen volume van de moleculen verwaarloosd kunnen worden: uit  $p = \frac{2}{3}n \langle E \rangle$  en  $\langle E \rangle = \frac{3}{2}kT$  volgt:

$$pV = n_s RT = \frac{1}{3}Nm \langle v^2 \rangle$$

Hierin is  $n_s$  het aantal *molen* deeltjes en  $N$  het totaal aantal deeltjes in volume  $V$ . Als het eigen volume en de intermoleculaire krachten niet verwaarloosd worden is de *Van der Waals vergelijking* af te leiden:

$$\left( p + \frac{an_s^2}{V^2} \right) (V - bn_s) = n_s RT$$

Er is een isotherm met een horizontaal buigpunt. Deze geeft in de Van der Waals vergelijking juist de *kritieke temperatuur*, *druk* en *volume* weer van het gas. Dit is de bovengrens van het coëxistentiegebied tussen vloeistof en damp. Hiervoor vindt men uit  $dp/dV = 0$  en  $d^2p/dV^2 = 0$ :

$$T_{\text{kr}} = \frac{8a}{27bR}, \quad p_{\text{kr}} = \frac{a}{27b^2}, \quad V_{\text{kr}} = 3bn_s$$

Voor het kritieke punt geldt:  $p_{\text{kr}}V_{m,\text{kr}}/RT_{\text{kr}} = \frac{3}{8}$ , verschillend van de algemene gaswet die 1 voorspelt.

Geschaald op de kritische grootheden, met  $p^* := p/p_{\text{kr}}$ ,  $T^* = T/T_{\text{kr}}$  en  $V_m^* = V_m/V_{m,\text{kr}}$  met  $V_m := V/n_s$  geldt:

$$\left( p^* + \frac{3}{(V_m^*)^2} \right) \left( V_m^* - \frac{1}{3} \right) = \frac{8}{3}T^*$$

Gassen hebben bij dezelfde waarde van de gereduceerde grootheden hetzelfde gedrag. Dit noemt men de *wet van de overeenstemmende toestanden*. Voor nauwkeuriger beschouwingen wordt een *viriaalontwikkeling* gebruikt:

$$p(T, V_m) = RT \left( \frac{1}{V_m} + \frac{B(T)}{V_m^2} + \frac{C(T)}{V_m^3} + \dots \right)$$

De *Boyletemperatuur*  $T_B$  is de temperatuur waarvoor de 2e viriaalcoëfficiënt 0 is. Dit is in het geval van een Van der Waals gas bij  $T_B = a/Rb$ . De *inversietemperatuur*  $T_i = 2T_B$ .

De toestandsvergelijking voor vaste stoffen en vloeistoffen wordt gegeven door:

$$\frac{V}{V_0} = 1 + \gamma_p \Delta T - \kappa_T \Delta p = 1 + \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \Delta T + \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \Delta p$$

## 7.5 Botsingen tussen moleculen

Indien een deeltje zich in een gas verplaatst over een afstand  $dx$ , is de kans dat het zal botsen gelijk aan  $n\sigma dx$ , waarin  $\sigma$  de *werkzame doorsnede* is. De gemiddelde vrije weglengte is  $\ell = \frac{v_1}{nu\sigma}$  met  $u = \sqrt{v_1^2 + v_2^2}$  de relatieve snelheid tussen de deeltjes. Als  $m_1 \ll m_2$  geldt:  $\frac{u}{v_1} = \sqrt{1 + \frac{m_1}{m_2}}$ , dus  $\ell = \frac{1}{n\sigma}$ . Als  $m_1 = m_2$  geldt:  $\ell = \frac{1}{n\sigma\sqrt{2}}$ . Dit betekent dat voor de gemiddelde tijd tussen 2 botsingen geldt:  $\tau = \frac{1}{n\sigma v}$ . Als men een harde bollen model voor moleculen aanneemt geeft dit voor de werkzame doorsnede:  $\sigma = \frac{1}{4}\pi(D_1^2 + D_2^2)$ . De gemiddelde afstand tussen de moleculen is  $0,55n^{-1/3}$ . Botsingen tussen moleculen en kleine deeltjes in oplossing geven aanleiding tot de *Brown beweging*. Voor de gemiddelde verplaatsing van een deeltje met straal  $R$  vindt men:  $\langle x_i^2 \rangle = \frac{1}{3}\langle r^2 \rangle = kTt/3\pi\eta R$ .

Men spreekt van een *Knudsen gas* als  $\ell \gg$  de afmetingen van de ruimte, een situatie die bij lage drukken gemakkelijk kan optreden. Voor een vat met een gat met oppervlakte  $A$  erin geldt als evenwichtsvoorwaarde, als  $\ell \gg \sqrt{A/\pi}$ :  $n_1\sqrt{T_1} = n_2\sqrt{T_2}$ . Met de algemene gaswet volgt hieruit:  $p_1/\sqrt{T_1} = p_2/\sqrt{T_2}$ .

In een situatie waarin men 2 platen met onderlinge afstand  $d$  over elkaar laat bewegen met snelheid  $w_x$  wordt de *viscositeit*  $\eta$  bepaald door:  $F_x = \eta \frac{Aw_x}{d}$ . Het snelheidsprofiel tussen de platen is dan  $w(z) = zw_x/d$ . Men kan afleiden dat  $\eta = \frac{1}{3}\rho\ell \langle v \rangle$  met  $v$  de *thermische snelheid*.

De warmtegeleiding in een stilstaand gas wordt beschreven door:  $\frac{dQ}{dt} = \kappa A \left( \frac{T_2 - T_1}{d} \right)$

hetgeen resulteert in een temperatuursverloop  $T(z) = T_1 + z(T_2 - T_1)/d$ . Men kan afleiden dat  $\kappa = \frac{1}{3}C_{mV}n\ell \langle v \rangle / N_A$ . Tevens geldt:  $\kappa = C_V\eta$ . Een betere uitdrukking voor  $\kappa$  krijgt men met de *Eucken correctie*:  $\kappa = (1 + 9R/4c_{mV})C_V \cdot \eta$  met een fout  $< 5\%$ .

## 7.6 Wisselwerking tussen moleculen

Voor dipoolwisselwerking tussen moleculen is af te leiden dat  $U \sim -1/r^6$ . Wanneer de afstand tussen 2 moleculen nadert tot de molecuuldiameter  $D$  gaat de afstotende kracht tussen de 2 elektronenwolken een rol spelen. Deze is te schrijven als:  $U_{\text{rep}} \sim \exp(-\gamma r)$  of  $V_{\text{rep}} = +C_s/r^s$  met  $12 \leq s \leq 20$ . Dit geeft dan voor de intermoleculaire krachten de *Lennard-Jones* potentiaal:

$$U_{\text{LJ}} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{D}{r} \right)^{12} - \left( \frac{D}{r} \right)^6 \right]$$

met een minimum  $\epsilon$  ter plaatse  $r = r_m$ . Er geldt:  $D \approx 0,89r_m$ . Voor de Van der Waals coëfficiënten  $a$  en  $b$  en de kritische grootheden geldt:  $a = 5,275N_A^2D^3\epsilon$ ,  $b = 1,3N_AD^3$ ,  $kT_{\text{kr}} = 1,2\epsilon$  en  $V_{m,\text{kr}} = 3,9N_AD^3$ .

Een eenvoudiger model voor de intermoleculaire wisselwerkingen gaat uit van een potentiaal:  $U(r) = \infty$  voor  $r < D$ ,  $U(r) = U_{\text{LJ}}$  voor  $D \leq r \leq 3D$  en  $U(r) = 0$  voor  $r \geq 3D$ . Hieruit volgt voor de potentiële energie

voor 1 molecuul:  $E_{\text{pot}} = \int_D^{3D} U(r)F(r)dr$ .

met  $F(r)$  de ruimtelijke verdelingsfunctie in bolcoördinaten, die voor een homogene verdeling gegeven wordt door:  $F(r)dr = 4n\pi r^2 dr$ .

Tenslotte nog enkele nuttige wiskundige relaties:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-x} dx = n! \quad , \quad \int_0^{\infty} x^{2n} e^{-x^2} dx = \frac{(2n)! \sqrt{\pi}}{n! 2^{2n+1}} \quad , \quad \int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-x^2} dx = \frac{1}{2}n!$$



# Hoofdstuk 8

## Thermodynamica

### 8.1 Mathematische inleiding

Als er tussen 3 variabelen een betrekking  $f(x, y, z) = 0$  bestaat kan men schrijven:  $x = x(y, z)$ ,  $y = y(x, z)$  en  $z = z(x, y)$ . De totale differentiaal  $dz$  van  $z$  is dan:

$$dz = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x dy$$

Door dit ook voor  $dx$  en  $dy$  op te schrijven kan men afleiden dat

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \cdot \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \cdot \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1$$

Omdat  $dz$  een totale differentiaal is geldt  $\oint dz = 0$ .

Een homogene functie van graad  $m$  voldoet aan:  $\varepsilon^m F(x, y, z) = F(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon z)$ . Hiervoor geldt de stelling van Euler:

$$mF(x, y, z) = x \frac{\partial F}{\partial x} + y \frac{\partial F}{\partial y} + z \frac{\partial F}{\partial z}$$

### 8.2 Definities

- De isochore drukcoëfficiënt:  $\beta_V = \frac{1}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$
- De isotherme compressibiliteit:  $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$
- De isobare volumecoëfficiënt:  $\gamma_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$
- De adiabatische compressibiliteit:  $\kappa_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S$

Voor een ideaal gas geldt:  $\gamma_p = 1/T$ ,  $\kappa_T = 1/p$  en  $\beta_V = -1/V$ .

### 8.3 Soortelijke warmte

- De soortelijke warmte bij constante  $X$  is:  $C_X = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_X$
- De soortelijke warmte bij constante druk:  $C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p$
- De soortelijke warmte bij constant volume:  $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$

Voor een ideaal gas geldt:  $C_{mp} - C_{mV} = R$ . Verder geldt, als de temperatuur voldoende hoog is om alle inwendige vibratie- en rotatieniveaus aan te slaan:  $C_V = \frac{1}{2}sR$ . Hieruit volgt  $C_p = \frac{1}{2}(s+2)R$ . Voor de verhouding volgt nu:  $\gamma = (2+s)/s$ . Voor lagere  $T$  dient men alleen die vrijheidsgraden te beschouwen die in thermisch evenwicht zijn. Voor een Van der Waals gas geldt:  $C_{mV} = \frac{1}{2}sR + ap/RT^2$ .

In het algemeen geldt:

$$C_p - C_V = T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \cdot \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = -T \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p^2 \left( \frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \geq 0$$

Omdat  $(\partial p/\partial V)_T$  altijd  $< 0$  is, geldt altijd  $C_p \geq C_V$ . Als de uitzettingscoëfficiënt 0 is, geldt  $C_p = C_V$ , evenals bij  $T = 0\text{K}$ .

## 8.4 De 3 hoofdwetten

De 0e hoofdwet is dat warmte stroomt van hogere naar lagere temperatuur. De 1e hoofdwet is de wet van behoud van energie. Voor een gesloten systeem geldt:  $Q = \Delta U + W$ , waarin  $Q$  de netto toegevoerde warmte is,  $W$  de verrichte uitwendige arbeid en  $\Delta U$  de verandering van inwendige energie. In differentiële vorm is dit:  $\delta Q = dU + \delta W$ , waarin  $\delta$  betekent dat het geen differentiaal van een toestandsgrootte is. Voor een quasi-statisch proces geldt:  $\delta W = pdV$ . Voor een reversibel proces geldt dus:  $\delta Q = dU + pdV$ .

Voor een open (stromend) systeem luidt de 1e hoofdwet:  $Q = \Delta H + W_i + \Delta E_{\text{kin}} + \Delta E_{\text{pot}}$ . Men kan een *indicateurarbeid*  $W_t$  aan het systeem onttrekken of een *technische arbeid*  $W_t = -W_i$  aan het systeem toevoegen.

De 2e hoofdwet luidt: voor een gesloten systeem bestaat er een additieve toestandsgrootte  $S$ , de entropie, waarvan de differentiaal voldoet aan:

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T}$$

Als er slechts reversibele processen plaatsvinden geldt:  $dS = \delta Q_{\text{rev}}/T$ . Het entropieverschil na een reversibel proces is dus:

$$S_2 - S_1 = \int_1^2 \frac{\delta Q_{\text{rev}}}{T}$$

Voor een reversibel kringproces is dus  $\oint \frac{\delta Q_{\text{rev}}}{T} = 0$ .

voor een irversibel kringproces geldt:  $\oint \frac{\delta Q_{\text{irr}}}{T} < 0$ .

De 3e hoofdwet van de thermodynamica luidt (Nernst):

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left( \frac{\partial S}{\partial X} \right)_T = 0$$

Hieruit volgt o.a. dat de soortelijke warmte  $\rightarrow 0$  als  $T \rightarrow 0$ , zodat het absolute nulpunt  $T = 0\text{K}$  niet te halen is door afkoeling in een eindig aantal stappen.

## 8.5 Toestandsfuncties en Maxwellrelaties

De verschillende toestandsfuncties en hun differentialen zijn:

Inwendige energie:	$U$	$dU = TdS - pdV$
Enthalpie:	$H = U + pV$	$dH = TdS + Vdp$
Vrije energie:	$F = U - TS$	$dF = -SdT - pdV$
Vrije enthalpie:	$G = H - TS$	$dG = -SdT + Vdp$

Uit het voorgaande kan men de Maxwellrelaties afleiden:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p, \quad \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T, \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = -\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T$$

Uit de totale differentiaal en de definities van  $C_V$  en  $C_p$  kan men afleiden dat:

$$TdS = C_V dT + T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V dV \quad \text{en} \quad TdS = C_p dT - T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p dp$$

Voor een ideaal gas geldt tevens:

$$S_m = C_V \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) + R \ln\left(\frac{V}{V_0}\right) + S_{m0} \quad \text{en} \quad S_m = C_p \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) - R \ln\left(\frac{p}{p_0}\right) + S'_{m0}$$

De vergelijkingen van Helmholtz luiden:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p, \quad \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_T = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

Bij het vergroten van een oppervlak geldt:  $dW_{\text{rev}} = -\gamma dA$ , met  $\gamma$  de oppervlaktespanning. Hieruit volgt:

$$\gamma = \left(\frac{\partial U}{\partial A}\right)_S = \left(\frac{\partial F}{\partial A}\right)_T$$

## 8.6 Processen

Het rendement  $\eta$  van een proces is gegeven door:  $\eta = \frac{\text{verrichte arbeid}}{\text{toegevoerde warmte}}$

De koudefactor  $\xi$  van een koelproces is gegeven door:  $\xi = \frac{\text{geleverde koude}}{\text{toegevoerde arbeid}}$

### Reversibele adiabatische processen

Voor adiabatische processen geldt dat  $W = U_1 - U_2$ . Voor reversibele adiabatische processen geldt de vergelijking van Poisson: met  $\gamma = C_p/C_V$  is  $pV^\gamma = \text{constant}$ . Tevens geldt:  $TV^{\gamma-1} = \text{constant}$  en  $T^\gamma p^{1-\gamma} = \text{constant}$ . Adiabaten lopen steiler in een  $p$ - $V$  diagram dan isothermen omdat  $\gamma > 1$ .

### Isobare processen

Hier geldt:  $H_2 - H_1 = \int_1^2 C_p dT$ . Voor een reversibel isobaar proces geldt:  $H_2 - H_1 = Q_{\text{rev}}$ .

### Het smoorproces

Dit heet ook wel het *Joule-Kelvin* effect, en is een adiabatische expansie van een gas door een poreuze prop of een nauwe opening. Hierbij geldt dat  $H$  een behouden grootte is, en dat  $dS > 0$ . Hierbij treedt over het algemeen een temperatuursverandering op. Hierbij is van belang de *smoorco efficiënt*:

$$\alpha_H = \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_H = \frac{1}{C_p} \left[ T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p - V \right]$$

De *inversietemperatuur* is de temperatuur waarbij een gas bij adiabatische expansie niet van  $T$  verandert. Als  $T > T_i$  wordt het gas warmer, als  $T < T_i$  dan wordt het gas kouder.  $T_i = 2T_B$ , waarbij voor  $T_B$  geldt:  $[\partial(pV)/\partial p]_T = 0$ . Het smoorproces wordt o.a. toegepast in koelkasten.

### Het Carnotproces

Hier doorloopt het systeem een reversibele kringloop van 2 isothermen en 2 adiabaten:

1. Isotherme expansie bij  $T_1$ . Het systeem neemt uit het reservoir  $Q_1$  op.

2. Adiabatische expansie waarbij de temperatuur zakt tot  $T_2$ .
3. Isotherme compressie bij  $T_2$ , hierbij wordt  $Q_2$  afgevoerd.
4. Adiabatische compressie tot  $T_1$ .

Voor het Carnotproces geldt:

$$\eta = 1 - \frac{|Q_2|}{|Q_1|} = 1 - \frac{T_2}{T_1} := \eta_C$$

Het *Carnotrendement*  $\eta_C$  is het maximaal haalbare bij een warmtemachine. Indien het proces in omgekeerde richting doorlopen wordt, en het systeem een arbeid  $-W$  verricht, is de koudefactor gegeven door:

$$\xi = \frac{|Q_2|}{W} = \frac{|Q_2|}{|Q_1| - |Q_2|} = \frac{T_2}{T_1 - T_2}$$

### Het Stirlingproces

De kringloop van Stirling bestaat uit 2 isothermen en 2 isochoren. Het rendement is in het ideale geval gelijk aan het Carnotrendement.

## 8.7 Maximale arbeid

Wanneer een systeem van toestand 1 overgaat naar toestand 2 bij een omgevingsdruk  $p_0$  en omgevingstemperatuur  $T_0$  is de maximale arbeid die te winnen is uit die overgang gegeven door (alle processen reversibel):

1. Gesloten systeem:  $W_{\max} = (U_1 - U_2) - T_0(S_1 - S_2) + p_0(V_1 - V_2)$ .
2. Open systeem:  $W_{\max} = (H_1 - H_2) - T_0(S_1 - S_2) - \Delta E_{\text{kin}} - \Delta E_{\text{pot}}$ .

De minimale arbeid die nodig is om een bepaalde toestand te bereiken is:  $W_{\min} = -W_{\max}$ .

## 8.8 Fase-overgangen

Fase-overgangen zijn isotherm én isobaar, en dus is  $dG = 0$ . Geeft men de verschillende fasen aan met  $\alpha$ ,  $\beta$  en  $\gamma$ , dan geldt:  $G_m^\alpha = G_m^\beta$  en

$$\Delta S_m = S_m^\alpha - S_m^\beta = \frac{r_{\beta\alpha}}{T_0}$$

waarin  $r_{\beta\alpha}$  de overgangswarmte is van fase  $\beta$  naar fase  $\alpha$  en  $T_0$  de overgangstemperatuur. Er geldt:  $r_{\beta\alpha} = r_{\alpha\beta}$  en  $r_{\beta\alpha} = r_{\gamma\alpha} - r_{\gamma\beta}$ . Verder is

$$S_m = \left( \frac{\partial G_m}{\partial T} \right)_p$$

zodat  $G$  een knik vertoont in het overgangspunt. In een 2-fasensysteem geldt de vergelijking van Clapeyron:

$$\frac{dp}{dT} = \frac{S_m^\alpha - S_m^\beta}{V_m^\alpha - V_m^\beta} = \frac{r_{\beta\alpha}}{(V_m^\alpha - V_m^\beta)T}$$

Voor een ideaal gas kan men dan voor de damplijn op enige afstand van het kritieke punt vinden:

$$p = p_0 e^{-r_{\beta\alpha}/RT}$$

Er zijn ook fase-overgangen waarvoor  $r_{\beta\alpha} = 0$ . Nu zal er pas een discontinuïteit optreden in de 2e afgeleiden van  $G_m$ . Deze overgangen van de 2e orde treden op bij *ordeningsverschijnselen*.

Een fase-overgang van de 3e orde, dus met o.a.  $[\partial^3 G_m / \partial T^3]_p$  discontinu treedt b.v. op bij de overgang van de ferromagnetische toestand naar de paramagnetische toestand van ijzer.

## 8.9 Thermodynamische potentiaal

Als het aantal deeltjes van een systeem verandert wordt het aantal deeltjes een derde toestandsgrrootheid. Omdat toevoeging van materie meestal bij constante  $p$  en  $T$  plaatsvindt wordt  $G$  beschouwd. Als het systeem uit meer componenten bestaat wordt dit:

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_i \mu_i dn_i$$

waarbij  $\mu = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{p,T,n_j}$  de thermodynamische potentiaal is. Dit is een *partiële grootheid*. Voor  $V$  geldt:

$$V = \sum_{i=1}^c n_i \left(\frac{\partial V}{\partial n_i}\right)_{n_j,p,T} := \sum_{i=1}^c n_i V_i$$

met  $V_i$  het partiële volume van component  $i$ . Er geldt:

$$\begin{aligned} V_m &= \sum_i x_i V_i \\ 0 &= \sum_i x_i dV_i \end{aligned}$$

waarin  $x_i = n_i/n$  de molaire fractie is van component  $i$ . Het molaire volume van een mengsel van 2 stoffen kan in een  $V$ - $x_2$  diagram bv. een holle lijn zijn: er treedt contractie op bij het mengen.

De thermodynamische potentialen zijn in een meer-componentensysteem niet onafhankelijk. Men kan afleiden dat  $\sum_i n_i d\mu_i = -SdT + Vdp$ , hetgeen bij constante  $p$  en  $T$  overgaat in:  $\sum_i x_i d\mu_i = 0$  (Gibbs-Duhmen).

Als er meer fasen zijn heeft elke component zoveel  $\mu$ 's als er fasen zijn. Het aantal vrij te kiezen parameters in een systeem met  $c$  componenten en  $p$  verschillende fasen is  $f = c + 2 - p$ .

## 8.10 Ideale mengsels

Als men  $n$  stoffen mengt geldt (de index  $^0$  duidt de zuivere component aan):

$$U_{\text{mengsel}} = \sum_i n_i U_i^0, \quad H_{\text{mengsel}} = \sum_i n_i H_i^0, \quad S_{\text{mengsel}} = n \sum_i x_i S_i^0 + \Delta S_{\text{meng}}$$

waarin voor ideale gassen geldt dat  $\Delta S_{\text{meng}} = -nR \sum_i x_i \ln(x_i)$ .

Voor de thermodynamische potentialen geldt:  $\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln(x_i) < \mu_i^0$ . Een mengsel van 2 vloeistoffen is zelden ideaal: dit geldt slechts voor chemisch zeer nauw verwante vloeistoffen (of isotopen). Toch geldt voor veel binaire mengsels de *wet van Raoult* voor de dampdrukken:  $p_i = x_i p_i^0 = y_i p$ . Hierin is  $x_i$  de fractie van de  $i$ e component in de vloeistoffase en  $y_i$  de fractie van de  $i$ e component in de gasfase.

Een oplossing van een stof in een andere geeft aanleiding tot een kookpuntsverhoging  $\Delta T_k$  en een vriespuntsdaling (stolpuntsdaling)  $\Delta T_s$ . Voor  $x_2 \ll 1$  vindt men:

$$\Delta T_k = \frac{RT_k^2}{r_{\beta\alpha}} x_2, \quad \Delta T_s = -\frac{RT_s^2}{r_{\gamma\beta}} x_2$$

met  $r_{\beta\alpha}$  de verdampingswarmte en  $r_{\gamma\beta} < 0$  de smeltwarmte. Voor de *osmotische druk*  $\Pi$  van een oplossing geldt:  $\Pi V_{m,1}^0 = x_2 RT$ .

## 8.11 Voorwaarden voor evenwicht

Op weg naar een evenwicht zijn alleen veranderingen mogelijk waarbij  $(dS)_{U,V} \geq 0$  of  $(dU)_{S,V} \leq 0$  of  $(dH)_{S,p} \leq 0$  of  $(dF)_{T,V} \leq 0$  of  $(dG)_{T,p} \leq 0$ . In evenwicht geldt voor elke component:  $\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta = \mu_i^\gamma$ .

## 8.12 Statistische basis voor de thermodynamica

Het aantal mogelijkheden  $P$  om  $N$  deeltjes te verdelen over  $n$  mogelijke energietoestanden die elk  $g$  voudig ontaard zijn heet de thermodynamische waarschijnlijkheid en is gegeven door:

$$P = N! \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$$

De meest waarschijnlijke verdeling, die met de maximale waarde voor  $P$ , is de *evenwichtstoestand*. Uitgaande van de formule van Stirling,  $\ln(n!) \approx n \ln(n) - n$  geeft dit de verdelingswet van Maxwell-Boltzmann voor een discreet systeem. De bezettingsgetallen bij evenwicht volgen uit:

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i \exp\left(-\frac{W_i}{kT}\right)$$

De *toestandssom*  $Z$  is een normeringsconstante: ze is gelijk aan  $Z = \sum_i g_i \exp(-W_i/kT)$ . Voor een ideaal gas geldt:

$$Z = \frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3}$$

Men kan nu de entropie definiëren als:  $S = k \ln(P)$ . Voor een systeem in thermisch evenwicht wordt dit:

$$S = \frac{U}{T} + kN \ln\left(\frac{Z}{N}\right) + kN \approx \frac{U}{T} + k \ln\left(\frac{Z^N}{N!}\right)$$

Voor een ideaal gas, met  $U = \frac{3}{2}kT$  is dan:  $S = \frac{5}{2}kN + kN \ln\left(\frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{Nh^3}\right)$

## 8.13 Toepassingen op andere systemen

Men kan de thermodynamica ook op andere systemen dan gassen en vloeistoffen toepassen. Daartoe dient men  $dW = pdV$  te vervangen door de overeenkomstige arbeidsterm, zoals  $dW_{\text{rev}} = -Fdl$  voor het uittrekken van een draad,  $dW_{\text{rev}} = -\gamma dA$  voor het uittrekken van een zeepvlies of  $dW_{\text{rev}} = -BdM$  voor een magnetisch systeem.

De temperatuur van een roterend, niet geladen zwart gat is gegeven door  $T = \hbar c / 8\pi km$ . De entropie ervan is  $S = Akc^3 / 4\hbar\kappa$  waarin  $A$  de oppervlakte van de waarnemingshorizon is. Bij een Schwarzschild zwart gat is deze gegeven door  $A = 16\pi m^2$ . Hawkings oppervlakte theorema stelt dat  $dA/dt \geq 0$ .

Hieruit volgt dat de levensduur van een zwart gat  $\sim m^3$ .

# Hoofdstuk 9

## Transportfysica

### 9.1 Mathematische inleiding

Een belangrijke eigenschap in de stromingsleer is: zij  $X$  een eigenschap van een volume element dat in  $dt$  van positie  $\vec{r}$  naar  $\vec{r} + d\vec{r}$  gaat. Dan is de totale differentiaal  $dX$  gegeven door:

$$dX = \frac{\partial X}{\partial x} dx + \frac{\partial X}{\partial y} dy + \frac{\partial X}{\partial z} dz + \frac{\partial X}{\partial t} dt \Rightarrow \frac{dX}{dt} = \frac{\partial X}{\partial x} v_x + \frac{\partial X}{\partial y} v_y + \frac{\partial X}{\partial z} v_z + \frac{\partial X}{\partial t}$$

Dit geeft in het algemeen:  $\boxed{\frac{dX}{dt} = \frac{\partial X}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)X}$ .

Hieruit volgt dat tevens geldt:  $\boxed{\frac{d}{dt} \iiint X d^3V = \frac{\partial}{\partial t} \iiint X d^3V + \oint X (\vec{v} \cdot \vec{n}) d^2A}$

waarbij het volume  $V$  omsloten wordt door oppervlak  $A$ . Enkele eigenschappen van de  $\nabla$  operator zijn:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\phi \vec{v}) &= \phi \operatorname{div} \vec{v} + \operatorname{grad} \phi \cdot \vec{v} & \operatorname{rot}(\phi \vec{v}) &= \phi \operatorname{rot} \vec{v} + (\operatorname{grad} \phi) \times \vec{v} & \operatorname{rot} \operatorname{grad} \phi &= \vec{0} \\ \operatorname{div}(\vec{u} \times \vec{v}) &= \vec{v} \cdot (\operatorname{rot} \vec{u}) - \vec{u} \cdot (\operatorname{rot} \vec{v}) & \operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{v} &= \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{v} - \nabla^2 \vec{v} & \operatorname{div} \operatorname{rot} \vec{v} &= 0 \\ \operatorname{div} \operatorname{grad} \phi &= \nabla^2 \phi & \nabla^2 \vec{v} &\equiv (\nabla^2 v_1, \nabla^2 v_2, \nabla^2 v_3) \end{aligned}$$

Hierin is  $\vec{v}$  een willekeurig vectorveld en  $\phi$  een willekeurig scalarveld. Enkele belangrijke integraalstellingen zijn:

Gauss:  $\oint (\vec{v} \cdot \vec{n}) d^2A = \iiint (\operatorname{div} \vec{v}) d^3V$

Stokes voor een scalarveld:  $\oint (\phi \cdot \vec{e}_i) ds = \iint (\vec{n} \times \operatorname{grad} \phi) d^2A$

Stokes voor een vectorveld:  $\oint (\vec{v} \cdot \vec{e}_i) ds = \iint (\operatorname{rot} \vec{v} \cdot \vec{n}) d^2A$

dit geeft:  $\oint (\operatorname{rot} \vec{v} \cdot \vec{n}) d^2A = 0$

Ostrogradsky:  $\oint (\vec{n} \times \vec{v}) d^2A = \iiint (\operatorname{rot} \vec{v}) d^3A$

$$\oint (\phi \vec{n}) d^2A = \iiint (\operatorname{grad} \phi) d^3V$$

Hierin wordt het oriënteerbare oppervlak  $\iint d^2A$  begrensd door de Jordankromme  $\oint ds$ .

### 9.2 De behoudswetten

Op een volume werken 2 soorten krachten:

1. De kracht  $\vec{f}_0$  op ieder volume-element. Voor de zwaartekracht geldt:  $\vec{f}_0 = \rho \vec{g}$ .
2. Oppervlaktekrachten  $\vec{t}$  die alleen op de rand werken. Hiervoor geldt:  $\vec{t} = \vec{n} \mathbf{T}$ , waarin  $\mathbf{T}$  de *spanning-tensor* is.

$\mathbf{T}$  is te splitsen in een deel  $p\mathbf{I}$  dat de normaalspanningen vertegenwoordigt en een deel  $\mathbf{T}'$  dat de schuifspanningen vertegenwoordigt:  $\mathbf{T} = \mathbf{T}' + p\mathbf{I}$ , waarin  $\mathbf{I}$  de eenheidstensor is. Wanneer viskeuze aspecten te verwaarlozen zijn geldt:  $\text{div}\mathbf{T} = -\text{grad}p$ .

Wanneer de stroomsnelheid  $\vec{v}$  is op plaats  $\vec{r}$  beschouwen geldt op plaats  $\vec{r} + d\vec{r}$ :

$$\vec{v}(d\vec{r}) = \underbrace{\vec{v}(\vec{r})}_{\text{translatie}} + \underbrace{d\vec{r} \cdot (\text{grad}\vec{v})}_{\text{rotatie, deformatie, dilatatie}}$$

De grootheid  $\mathbf{L} := \text{grad}\vec{v}$  kan men splitsen in een symmetrisch deel  $\mathbf{D}$  en een antisymmetrisch deel  $\mathbf{W}$ .  $\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$  met

$$D_{ij} := \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad W_{ij} := \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$$

Wanneer de rotatie of vorticititeit  $\vec{\omega} = \text{rot}\vec{v}$  ingevoerd wordt, geldt:  $W_{ij} = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\omega_k$ .  $\vec{\omega}$  geeft de lokale draaisnelheid weer:  $d\vec{r} \cdot \mathbf{W} = \frac{1}{2}\vec{\omega} \times d\vec{r}$ .

Voor een Newtonse vloeistof geldt:  $\mathbf{T}' = 2\eta\mathbf{D}$ . Hierin is  $\eta$  de dynamische viscositeit. Deze hangt samen met de schuifspanning  $\tau$  volgens

$$\tau_{ij} = \eta \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$$

Voor compressibele media kan men stellen:  $\mathbf{T}' = (\eta' \text{div}\vec{v})\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{D}$ . Door gelijkstellen van de thermodynamische en de mechanische druk volgt dan:  $3\eta' + 2\eta = 0$ . Indien de viscositeit constant is geldt:  $\text{div}(2\mathbf{D}) = \nabla^2\vec{v} + \text{grad}\text{div}\vec{v}$ .

De behoudswetten voor massa, impuls en energie voor continue media kan men zowel in integraal- als in differentiaalvorm schrijven. Ze luiden:

### Integraalvorm:

1. Massabehoud:  $\frac{\partial}{\partial t} \iiint \rho d^3V + \oint \rho(\vec{v} \cdot \vec{n}) d^2A = 0$
2. Impulsbehoud:  $\frac{\partial}{\partial t} \iiint \rho\vec{v} d^3V + \oint \rho\vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{n}) d^2A = \iiint f_0 d^3V + \oint \vec{n} \cdot \mathbf{T} d^2A$
3. Energiebehoud:  $\frac{\partial}{\partial t} \iiint (\frac{1}{2}v^2 + e)\rho d^3V + \oint (\frac{1}{2}v^2 + e)\rho(\vec{v} \cdot \vec{n}) d^2A =$   
 $-\oint (\vec{q} \cdot \vec{n}) d^2A + \iiint (\vec{v} \cdot \vec{f}_0) d^3V + \oint (\vec{v} \cdot \vec{n}) \mathbf{T} d^2A$

### Differentiaalvorm:

1. Massabehoud:  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \cdot (\rho\vec{v}) = 0$
2. Impulsbehoud:  $\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\rho\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v} = \vec{f}_0 + \text{div}\mathbf{T} = \vec{f}_0 - \text{grad}p + \text{div}\mathbf{T}'$
3. Energiebehoud:  $\rho T \frac{ds}{dt} = \rho \frac{de}{dt} - \frac{p}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\text{div}\vec{q} + \mathbf{T}' : \mathbf{D}$

Hierin is  $e$  de inwendige energie per massaeneheid  $E/m$  en  $s$  de entropie per massaeneheid  $S/m$ .  $\vec{q} = -\kappa \vec{\nabla}T$  is de warmtestroom. Verder geldt:

$$p = -\frac{\partial E}{\partial V} = -\frac{\partial e}{\partial (1/\rho)}, \quad T = \frac{\partial E}{\partial S} = \frac{\partial e}{\partial s}$$

Hiermee wordt

$$C_V = \left( \frac{\partial e}{\partial T} \right)_V \quad \text{en} \quad C_P = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_p$$



met  $h = H/m$  de enthalpie per massaeenheid.

Hieruit volgen voor een onsamendrukbaar, visceus en warmtegeleidend medium de *Navier-Stokes* vergelijkingen:

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \vec{v} &= 0 \\ \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} &= \rho \vec{g} - \operatorname{grad} p + \eta \nabla^2 \vec{v} \\ \rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C(\vec{v} \cdot \nabla) T &= \kappa \nabla^2 T + 2\eta \mathbf{D} : \mathbf{D}\end{aligned}$$

waarin  $C$  de warmtecapaciteit is. De kracht  $\vec{F}$  op een lichaam in een stroming, wanneer visceuze effecten beperkt zijn tot de grenslaag is te berekenen met de impulswet. Wanneer het lichaam omsloten wordt door een oppervlak  $A$  op een afstand buiten de grenslaag geldt:

$$\vec{F} = - \oint [p \vec{n} + \rho \vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{n})] d^2 A$$

### 9.3 De vergelijkingen van Bernoulli

Voor een niet-visceus medium vindt men, uitgaande van de impulsvergelijking voor een stationaire stroming, de stelling

$$(\vec{v} \cdot \operatorname{grad}) \vec{v} = \frac{1}{2} \operatorname{grad}(v^2) + (\operatorname{rot} \vec{v}) \times \vec{v}$$

en de potentiaalvergelijking  $\vec{g} = -\operatorname{grad}(gh)$  dat:

$$\frac{1}{2} v^2 + gh + \int \frac{dp}{\rho} = \text{constant langs een stroomlijn}$$

Als de stroming incompressibel is geldt:  $\frac{1}{2} v^2 + gh + p/\rho = \text{constant}$  langs een stroomlijn. Als de stroming tevens rotatievrij is ( $\operatorname{rot} \vec{v} = 0$ ) en de entropie is op alle stroomlijnen gelijk is, geldt dat  $\frac{1}{2} v^2 + gh + \int dp/\rho = \text{constant}$  in het hele veld. Voor incompressibele stromingen wordt dit:  $\frac{1}{2} v^2 + gh + p/\rho = \text{constant}$  in het hele veld. Voor ideale gassen met constante  $C_p$  en  $C_V$  geldt met  $\gamma = C_p/C_V$ :

$$\frac{1}{2} v^2 + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p}{\rho} = \frac{1}{2} v^2 + \frac{c^2}{\gamma-1} = \text{constant}$$

Uitgaande van de snelheidspotentiaal  $\vec{v} = \operatorname{grad} \phi$  geldt voor instationaire stromingen:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2} v^2 + gh + \int \frac{dp}{\rho} = \text{constant in het hele veld}$$

### 9.4 Karakterisering van stromingen door dimensieloze getallen

Het voordeel van dimensieloze getallen is dat het modelproeven mogelijk maakt: men dient te zorgen dat de betrokken dimensieloze getallen voor model en experiment gelijk zijn. Tevens kan men functionele gelijkheden afleiden zonder de DV's op te lossen. Enkele dimensieloze getallen worden gegeven door:

$$\begin{array}{llll} \text{Strouhal: } \operatorname{Sr} = \frac{\omega L}{v} & \text{Froude: } \operatorname{Fr} = \frac{v^2}{gL} & \text{Mach: } \operatorname{Ma} = \frac{v}{c} \\ \text{Fourier: } \operatorname{Fo} = \frac{a}{\omega L^2} & \text{Péclet: } \operatorname{Pe} = \frac{vL}{a} & \text{Reynolds: } \operatorname{Re} = \frac{vL}{\nu} \\ \text{Prandtl: } \operatorname{Pr} = \frac{\nu}{a} & \text{Nusselt: } \operatorname{Nu} = \frac{L\alpha}{\kappa} & \text{Eckert: } \operatorname{Ec} = \frac{v^2}{c\Delta T} \end{array}$$

Hierin is  $\nu = \eta/\rho$  de kinematische viscositeit,  $c$  de geluidssnelheid en  $L$  een karakteristieke lengte van het systeem.  $\alpha$  volgt uit de warmtetransportvergelijking  $\kappa \partial_y T = \alpha \Delta T$  en  $a = \kappa/\rho c$  is de temperatuursvereffeningscoëfficiënt.

Men kan deze getallen interpreteren als:

- Re: (stationaire traagheidskrachten)/(visceuze krachten)
- Sr: (instationaire traagheidskrachten)/(stationaire traagheidskrachten)
- Fr: (stationaire traagheidskrachten)/(zwaartekracht)
- Fo: (warmtegeleiding)/(instationaire enthalpieverandering)
- Pe: (convectief warmtetransport)/(warmtegeleiding)
- Ec: (visceuze dissipatie)/(convectief warmtetransport)
- Ma: (snelheid)/(geluidssnelheid): objecten die zich sneller dan ongeveer  $Ma = 0,8$  bewegen produceren schokgolven voort die zich onder een hoek  $\theta$  met de voortplantingssnelheid propageren. Hiervoor geldt:  $Ma = 1/\arctan(\theta)$ .
- Pr en Nu zijn stof-kengetallen.

De dimensieloze Navier-Stokes vergelijking wordt nu, met  $x' = x/L$ ,  $\vec{v}' = \vec{v}/V$ ,  $\text{grad}' = L\text{grad}$ ,  $\nabla'^2 = L^2\nabla^2$  en  $t' = t\omega$ :

$$\text{Sr} \frac{\partial \vec{v}'}{\partial t'} + (\vec{v}' \cdot \nabla') \vec{v}' = -\text{grad}' p + \frac{\vec{g}}{\text{Fr}} + \frac{\nabla'^2 \vec{v}'}{\text{Re}}$$

## 9.5 Buisstromingen

Voor buisstromingen geldt: als  $Re < 2300$  met als lengtemaat de diameter is de stroming laminair, daarboven turbulent. Voor een incompressibele laminaire stroming door een rechte, cirkelvormige buis geldt voor het snelheidsprofiel

$$v(r) = -\frac{1}{4\eta} \frac{dp}{dx} (R^2 - r^2)$$

Voor de volumestroom geldt:  $\Phi_V = \int_0^R v(r) 2\pi r dr = -\frac{\pi}{8\eta} \frac{dp}{dx} R^4$

De *inlooptlengte*  $L_e$  is gegeven door:

1.  $500 < Re_D < 2300$ :  $L_e/2R = 0,056 Re_D$
2.  $Re > 2300$ :  $L_e/2R \approx 50$

Voor gastransport onder lage druk (Knudsen-gas) geldt:  $\Phi_V = \frac{4R^3 \alpha \sqrt{\pi}}{3} \frac{dp}{dx}$

Voor stromingen bij kleine Re geldt:  $\nabla p = \eta \nabla^2 \vec{v}$  en  $\text{div} \vec{v} = 0$ . Voor de totale kracht op een bol met straal  $R$  in een stroming geldt dan:  $F = 6\pi\eta Rv$ . Voor grote Re geldt voor de weerstand op een oppervlak  $A$ :  $F = \frac{1}{2} C_W A \rho v^2$ .

## 9.6 Potentiaaltheorie

De *circulatie*  $\Gamma$  is gedefinieerd als:  $\Gamma = \oint (\vec{v} \cdot \vec{e}_t) ds = \iint (\text{rot} \vec{v}) \cdot \vec{n} d^2 A = \iint (\vec{\omega} \cdot \vec{n}) d^2 A$

Voor niet-visceuze media, als  $p = p(\varrho)$  en er alleen conservatieve krachten werken, vindt men de stelling van Kelvin:

$$\frac{d\Gamma}{dt} = 0$$

Voor rotatievrije stromingen kan men een snelheidspotentiaal invoeren door  $\vec{v} = \text{grad} \phi$ . In het incompressibele geval volgt dan uit massabehoud  $\nabla^2 \phi = 0$ . Voor een 2-dimensionale stroming kan men tevens een

stroomfunctie  $\psi(x, y)$  definiëren: met  $\Phi_{AB}$  de hoeveelheid vloeistof die door een kromme  $s$  tussen de punten A en B stroomt:

$$\Phi_{AB} = \int_A^B (\vec{v} \cdot \vec{n}) ds = \int_A^B (v_x dy - v_y dx)$$

en de definities  $v_x = \partial\psi/\partial y$ ,  $v_y = -\partial\psi/\partial x$  geldt:  $\Phi_{AB} = \psi(B) - \psi(A)$ . In het algemeen geldt:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega_z$$

In poolcoördinaten geldt:

$$v_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{\partial \phi}{\partial r}, \quad v_\theta = -\frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta}$$

Voor bronstromingen met sterkte  $Q$  in  $(x, y) = (0, 0)$  geldt:  $\phi = \frac{Q}{2\pi} \ln(r)$  zodat  $v_r = Q/2\pi r$ ,  $v_\theta = 0$ .

Voor een dipool van sterkte  $Q$  in  $x = a$  en sterkte  $-Q$  in  $x = -a$  volgt door superpositie:  $\phi = -Qax/2\pi r^2$  waarin  $Qa$  de dipoolsterkte is. Voor een wervel geldt:  $\phi = \Gamma\theta/2\pi$ .

Voor een lichaam dat wordt aangestroomd door een uniforme hoofdstroming met  $\vec{v} = v\vec{e}_x$  en  $Re$  zo groot is dat visceuze effecten tot de grenslaag beperkt blijven geldt:  $F_x = 0$  en  $F_y = -\rho\Gamma v$ . Dat  $F_x = 0$  noemt men de paradox van d'Alembert en komt door de verwaarlozing van  $\eta$ . De liftkracht  $F_y$  wordt wel door de viscositeit veroorzaakt omdat die zorgt dat  $\Gamma \neq 0$ . Ook roterende lichamen wekken daardoor een dwarskracht op: het *Magnuseffect*.

## 9.7 Grenslagen

### 9.7.1 Stromingsgrenslagen

Wanneer de voor dikte  $\delta$  van de grenslaag geldt:  $\delta \ll L$  is  $\delta \approx L/\sqrt{Re}$ . Met  $v_\infty$  de snelheid van de hoofdstroming geldt voor de snelheid  $v_y \perp$  het oppervlak:  $v_y L \approx \delta v_\infty$ . De vergelijking van Blasius voor de grenslaag luidt, met  $v_y/v_\infty = f(y/\delta)$ :  $2f''' + ff'' = 0$  met RVW  $f(0) = f'(0) = 0$ ,  $f'(\infty) = 1$ . Dit geeft:  $C_W = 0,664 Re_x^{-1/2}$ .

De impulsstelling van Von Karman voor de grenslaag luidt:  $\frac{d}{dx}(\vartheta v^2) + \delta^* v \frac{dv}{dx} = \frac{\tau_0}{\rho}$

waarin de verplaatsingsdikte  $\delta^* v$  en de impulsverliesdikte  $\vartheta v^2$  gegeven zijn door:

$$\vartheta v^2 = \int_0^\infty (v - v_x) v_x dy, \quad \delta^* v = \int_0^\infty (v - v_x) dy \quad \text{en} \quad \tau_0 = -\eta \left. \frac{\partial v_x}{\partial y} \right|_{y=0}$$

De grenslaag laat los als  $\left( \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)_{y=0} = 0$ . Dit komt overeen met  $\frac{dp}{dx} = \frac{12\eta v_\infty}{\delta^2}$ .

### 9.7.2 Temperatuur grenslagen

Indien de dikte van de temperatuurgrenslaag  $\delta_T \ll L$  geldt: 1. Als  $Pr \leq 1$ :  $\delta/\delta_T \approx \sqrt{Pr}$ .  
2. Als  $Pr \gg 1$ :  $\delta/\delta_T \approx \sqrt[3]{Pr}$ .

## 9.8 Warmtegeleiding

Voor instationaire warmtegeleiding in 1 dimensie zonder stroming geldt:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\kappa}{\rho c} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Phi$$

met  $\Phi$  een bronterm. Als  $\Phi = 0$  heeft dit als oplossing voor harmonische oscillaties bij  $x = 0$ :

$$\frac{T - T_\infty}{T_{\max} - T_\infty} = \exp\left(-\frac{x}{D}\right) \cos\left(\omega t - \frac{x}{D}\right)$$

met  $D = \sqrt{2\kappa/\omega\rho c}$ . Bij  $x = \pi D$  is de temperatuurvariatie in tegenfase met het oppervlak. De 1-dimensionale oplossing bij  $\Phi = 0$  is

$$T(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi at}} \exp\left(-\frac{x^2}{4at}\right)$$

Dit is wiskundig equivalent aan het diffusieprobleem:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\nabla^2 n + P - A$$

waarin  $P$  de productie van en  $A$  de afvoer van deeltjes is. De stroomdichtheid  $J = -D\nabla n$ .

## 9.9 Turbulentie

De tijdschaal van turbulente snelheidsvariaties  $\tau_t$  ligt in de orde van:  $\tau_t = \tau\sqrt{\text{Re}}/\text{Ma}^2$  met  $\tau$  de moleculaire tijdschaal. Voor de snelheid van de deeltjes geldt:  $v(t) = \langle v \rangle + v'(t)$  met  $\langle v'(t) \rangle = 0$ . De Navier-Stokes vergelijking gaat nu over in

$$\frac{\partial \langle \vec{v} \rangle}{\partial t} + \langle \langle \vec{v} \rangle \cdot \nabla \rangle \langle \vec{v} \rangle = -\frac{\nabla \langle p \rangle}{\rho} + \nu \nabla^2 \langle \vec{v} \rangle + \frac{\text{div} \mathbf{S}_R}{\rho}$$

hierin is  $\mathbf{S}_{Rij} = -\rho \langle v_i v_j \rangle$  de turbulente spanningstensor. Aanname van Boussinesq:  $\tau_{ij} = -\rho \langle v'_i v'_j \rangle$ . Men stelt nu, analoog aan Newtonse media:  $\mathbf{S}_R = 2\rho\nu_t \langle \mathbf{D} \rangle$ . Vlak bij een wand geldt:  $\nu_t = 0$ , ver van de wand geldt:  $\nu_t \approx \nu \text{Re}$ .

## 9.10 Zelforganisatie

Voor een (semi) 2-dimensionale stroming geldt:  $\frac{d\omega}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial t} + J(\omega, \psi) = \nu \nabla^2 \omega$

Met  $J(\omega, \psi)$  de Jacobiaan. Als  $\nu = 0$  is  $\omega$  dus behouden. Verder is de kinetische energie/ $mA$  en de enstrofie  $V$  behouden: met  $\vec{v} = \nabla \times (\vec{k}\psi)$

$$E \sim (\nabla \psi)^2 \sim \int_0^\infty \mathcal{E}(k, t) dk = \text{constant} \quad , \quad V \sim (\nabla^2 \psi)^2 \sim \int_0^\infty k^2 \mathcal{E}(k, t) dk = \text{constant}$$

Hieruit volgt dat in een 2-dimensionale stroming de energiefloed de neiging heeft om naar grote  $k$  waarden te gaan: grotere structuren groeien aan ten koste van kleinere, i.t.t. de situatie bij 3-dimensionale stromingen.

# Hoofdstuk 10

## Quantummechanica

### 10.1 Inleiding tot de quantummechanica

#### 10.1.1 Zwarte straling

De wet van Planck voor de energieverdeling van de straling van een zwart lichaam luidt:

$$w(f) = \frac{8\pi h f^3}{c^3} \frac{1}{e^{hf/kT} - 1}, \quad w(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$$

Hieruit volgt voor de totale stralingsvermogensdichtheid de wet van Stefan-Boltzmann:  $P = A\sigma T^4$ . Voor het maximum volgt hieruit de wet van Wien:  $T\lambda_{\max} = k_W$ .

#### 10.1.2 Comptoneffect

Wanneer men licht als bestaande uit deeltjes beschouwt volgt voor de golflengte van verstrooid licht aan deeltjes:

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta) = \lambda + \lambda_C(1 - \cos \theta)$$

#### 10.1.3 Elektronen diffractie

Diffractie van elektronen aan een kristal is te verklaren door aan te nemen dat deeltjes een golfkarakter hebben met golflengte  $\lambda = h/p$ . Deze golflengte noemt men de Broglie golflengte.

### 10.2 Golf functies

Het golfkarakter van deeltjes wordt beschreven met de golf functie  $\psi$ . Men kan deze golf functie zowel in de plaats- als in de impulsruimte definiëren. Deze definities zijn elkaars Fourier getransformeerde:

$$\Phi(k, t) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int \Psi(x, t) e^{-ikx} dx \quad \text{en} \quad \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int \Phi(k, t) e^{ikx} dk$$

Deze golven definiëren een deeltje met groepsnelheid  $v_g = p/m$  en energie  $E = \hbar\omega$ .

Men kan de golf functie interpreteren als een maat voor de waarschijnlijkheid  $P$  om een deeltje ergens aan te treffen (Born):  $dP = |\psi|^2 d^3V$ . De verwachtingswaarde  $\langle f \rangle$  van een eigenschap  $f$  van een systeem is:

$$\langle f(t) \rangle = \iiint \Psi^* f \Psi d^3V, \quad \langle f_p(t) \rangle = \iiint \Phi^* f \Phi d^3V_p$$

Men noteert dit ook wel als  $\langle f(t) \rangle = \langle \Phi | f | \Phi \rangle$ . Hieruit volgt de normeringsconditie voor de golf functies:  $\langle \Phi | \Phi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ .

### 10.3 Operatoren in de quantummechanica

Klassieke grootheden worden in de quantummechanica vertaald in operatoren. Deze zijn hermitisch omdat ze reële eigenwaarden moeten hebben:

$$\int \psi_1^* A \psi_2 d^3V = \int \psi_2 (A \psi_1)^* d^3V$$

Wanneer  $u_n$  de eigenfunctie is van de eigenwaardevergelijking  $A\Psi = a\Psi$  bij eigenwaarde  $a_n$  kan men  $\Psi$  ontwikkelen naar een basis van eigenfuncties:  $\Psi = \sum_n c_n u_n$ . Kiest men deze basis orthonormaal, dan volgt:

voor de coëfficiënten:  $c_n = \langle u_n | \Psi \rangle$ . Nu geldt: als het systeem zich in toestand  $\Psi$  bevindt, is de kans om bij een meting van  $A$  de eigenwaarde  $a_n$  te vinden gelijk aan  $|c_n|^2$  in het discrete deel van het spectrum en  $|c_n|^2 da$  in het continue deel in  $a, a + da$ . Het *matricelement*  $A_{ij}$  is gegeven door:  $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$ . Omdat  $(AB)_{ij} = \langle u_i | AB | u_j \rangle = \langle u_i | A \sum_n | u_n \rangle \langle u_n | B | u_j \rangle$  geldt:  $\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = 1$ .

De tijdsafhankelijkheid van een operator is gegeven door (Heisenberg):

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{[A, H]}{i\hbar}$$

met  $[A, B] \equiv AB - BA$  de *commutator* van  $A$  en  $B$ . Voor hermitische operatoren is de commutator altijd zuiver complex. Als  $[A, B] = 0$  hebben de operatoren  $A$  en  $B$  een gemeenschappelijke set eigenfuncties. Door dit toe te passen op  $p_x$  en  $x$  vindt men (Ehrenfest):  $m d^2 \langle x \rangle_t / dt^2 = - \langle dU(x)/dx \rangle$ .

De 1e orde benadering  $\langle F(x) \rangle_t \approx F(\langle x \rangle_t)$ , met  $F = -dU/dx$  geeft de klassieke vergelijking weer.

Bij het optellen van quantummechanische operatoren die een product van andere operatoren zijn moeten deze eerst symmetrisch gemaakt worden: klassiek  $AB$  wordt nu  $\frac{1}{2}(AB + BA)$ .

## 10.4 Het onzekerheidsprincipe

Wanneer de onzekerheid  $\Delta A$  in  $A$  wordt gedefinieerd als:  $(\Delta A)^2 = \langle \psi | A_{\text{op}} - \langle A \rangle |^2 \psi \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$  volgt:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} | \langle \psi | [A, B] | \psi \rangle |$$

Hieruit volgt:  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{1}{2} \hbar$ , en omdat  $[x, p_x] = i\hbar$  geldt:  $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar$ , en  $\Delta L_x \cdot \Delta L_y \geq \frac{1}{2} \hbar L_z$ .

## 10.5 De Schrödingervergelijking

De impulsoperator is gegeven door:  $p_{\text{op}} = -i\hbar \nabla$ . De plaatsoperator is:  $x_{\text{op}} = i\hbar \nabla_p$ . De energieoperator is:  $E_{\text{op}} = i\hbar \partial / \partial t$ . De Hamiltoniaan van een deeltje met massa  $m$ , potentiële energie  $U$  en totale energie  $E$ , is gegeven door:  $H = p^2/2m + U$ . Uit  $H\psi = E\psi$  volgt dan de *Schrödingervergelijking*:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}}$$

De lineaire combinatie van de oplossingen hiervan geven de algemene oplossing. In 1 dimensie:

$$\psi(x, t) = \left( \sum + \int dE \right) c(E) u_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

De stroomdichtheid  $J$  is gegeven door:  $J = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$

Er geldt een behoudswet:  $\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\nabla J(x, t)$

## 10.6 Pariteit

De pariteitsoperator is in 1 dimensie gegeven door:  $\mathcal{P}\psi(x) = \psi(-x)$ . Wanneer de golf functie gesplitst wordt in een som van even en oneven functies, wordt  $\psi$  ontwikkeld naar eigenfuncties van  $\mathcal{P}$ :

$$\psi(x) = \underbrace{\frac{1}{2}(\psi(x) + \psi(-x))}_{\text{even: } \psi^+} + \underbrace{\frac{1}{2}(\psi(x) - \psi(-x))}_{\text{oneven: } \psi^-}$$

$[\mathcal{P}, H] = 0$ . De functies  $\psi^+ = \frac{1}{2}(1 + \mathcal{P})\psi(x, t)$  en  $\psi^- = \frac{1}{2}(1 - \mathcal{P})\psi(x, t)$  voldoen elk aan de Schrödingervergelijking. Hierdoor is de pariteit een behouden grootte.

## 10.7 Het tunneleffect

De golf functie van een deeltje in een  $\infty$  hoge potentiaalput van 0 tot  $a$  is gegeven door  $\psi(x) = a^{-1/2} \sin(kx)$ . De energieniveaus volgen uit  $E_n = n^2 \hbar^2 / 8a^2 m$ .

Wanneer de golf functie met energie  $W$  een potentiaalberg van  $W_0 > W$  ontmoet zal deze, i.t.t. het klassieke geval, niet 0 zijn binnen en na de potentiaalberg. Als 1, 2 en 3 de gebieden voor, binnen en na de potentiaalberg zijn, geldt:

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \psi_2 = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, \quad \psi_3 = A'e^{ikx}$$

met  $k'^2 = 2m(W - W_0)/\hbar^2$  en  $k^2 = 2mW$ . Toepassen van de continuïteitsvoorwaarden:  $\psi$  continu en  $\partial\psi/\partial x$  continu bij  $x = 0$  en  $x = a$  geeft  $B$ ,  $C$  en  $D$  en  $A'$  in  $A$ . De doorlaatbaarheid  $T$  van de berg is gedefinieerd door  $T = |A'|^2/|A|^2$ . Als  $W > W_0$  én  $2a = n\lambda' = 2\pi n/k'$  geldt:  $T = 1$ .

## 10.8 De harmonische oscillator

Voor de harmonische oscillator geldt:  $U = \frac{1}{2}bx^2$  en  $\omega_0^2 = b/m$ . De Hamiltoniaan  $H$  is dan gegeven door:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega + \omega A^\dagger A$$

met

$$A = \sqrt{\frac{1}{2}m\omega}x + \frac{ip}{\sqrt{2m\omega}} \quad \text{en} \quad A^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}m\omega}x - \frac{ip}{\sqrt{2m\omega}}$$

$A \neq A^\dagger$  is niet hermitisch.  $[A, A^\dagger] = \hbar$  en  $[A, H] = \hbar\omega A$ .  $A$  is een absorptie ladderoperator,  $A^\dagger$  een creatieladderoperator.  $HAu_E = (E - \hbar\omega)Au_E$ . Er is een eigenfunctie  $u_0$  waarvoor geldt:  $Au_0 = 0$ . De energie in deze grondtoestand is  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ : de nulpuntsenergie. Voor de genormeerde eigenfuncties volgt:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \frac{A^\dagger}{\sqrt{\hbar}} \right)^n u_0 \quad \text{met} \quad u_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

met  $E_n = (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega$ .

## 10.9 Impulsmoment

Voor de impulsmomentoperatoren  $L$  geldt:  $[L_z, L^2] = [L_z, H] = [L^2, H] = 0$ . Echter, er geldt cyclisch:  $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ . Niet alle componenten van  $L$  kunnen dus tegelijkertijd oneindig nauwkeurig bekend zijn. Voor  $L_z$  geldt:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

De ladderoperatoren  $L_\pm$  worden gegeven door:  $L_\pm = L_x \pm iL_y$ . Nu geldt:  $L^2 = L_+L_- + L_-L_+ - \hbar L_z$ . Verder is

$$L_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

Uit  $[L_+, L_z] = -\hbar L_+$  volgt:  $L_z(L_+ Y_{lm}) = (m+1)\hbar(L_+ Y_{lm})$ .

Uit  $[L_-, L_z] = \hbar L_-$  volgt:  $L_z(L_- Y_{lm}) = (m-1)\hbar(L_- Y_{lm})$ .

Uit  $[L^2, L_\pm] = 0$  volgt:  $L^2(L_\pm Y_{lm}) = l(l+1)\hbar^2(L_\pm Y_{lm})$ .

Uit de hermiticiteit van  $L_x$  en  $L_y$  (impliceert  $L_\pm^\dagger = L_\mp$ ) en  $|L_\pm Y_{lm}|^2 > 0$  volgt:  $l(l+1) - m^2 - m \geq 0 \Rightarrow -l \leq m \leq l$ . Verder vindt men dat  $l$  heeltallig of halftallig moet zijn. Halftallige waarden geven geen eenduidige oplossing  $\psi$  en zijn dus niet toegestaan.

## 10.10 Spin

De spinoperatoren voldoen cyclisch aan:  $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$ . Omdat de spinoperatoren niet in de fysische ruimte  $(x, y, z)$  werken is de eenduidigheid van de golf functie hier niet van belang: ook halfvallige waarden zijn toegelaten.  $[L, S] = 0$ : spin en impulsmoment hebben dus een gemeenschappelijke set van eigenfuncties. De spinoperatoren worden gegeven door  $\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ , met

$$\vec{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

De eigentoestanden van  $S_z$  zijn zgn. *spinoren*:  $\chi = \alpha_+\chi_+ + \alpha_-\chi_-$ , waarin  $\chi_+ = (1, 0)$  de toestand met spin up ( $S_z = \frac{1}{2}\hbar$ ) weergeeft en  $\chi_- = (0, 1)$  de toestand met spin down ( $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$ ) weergeeft. Dan is  $|\alpha_+|^2$  de kans om bij een meting spin up en  $|\alpha_-|^2$  de kans om spin down te vinden. Uiteraard geldt  $|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$ .

Met de spin van een elektron is een intrinsiek magnetisch moment  $\vec{M}$  geassocieerd volgens  $\vec{M} = -eg_S\vec{S}/2m$  met  $g_S = 2(1 + \alpha/2\pi + \dots)$  de gyromagnetische ratio. In een uitwendig magnetisch veld hoort hierbij een potentiële energie  $U = -\vec{M} \cdot \vec{B}$ . De Schrödingervergelijking is dan  $(\partial\chi/\partial x_i \equiv 0)$ :

$$i\hbar \frac{\partial\chi(t)}{\partial t} = \frac{eg_S\hbar}{4m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}\chi(t)$$

met  $\vec{\sigma} = (\vec{\sigma}_x, \vec{\sigma}_y, \vec{\sigma}_z)$ . Voor constante  $\vec{B} = B\vec{e}_z$  heeft dit probleem 2 eigenwaarden:  $\chi_{\pm}$  bij  $E = \pm eg_S\hbar B/4m = \pm\hbar\omega$ . Dit geeft als algemene oplossing  $\chi = (ae^{-i\omega t}, be^{i\omega t})$ . Hieruit volgt:  $\langle S_x \rangle = \frac{1}{2}\hbar \cos(2\omega t)$  en  $\langle S_y \rangle = \frac{1}{2}\hbar \sin(2\omega t)$ . De interpretatie is dat de spin om de  $z$ -as precedeert met hoekfrequentie  $2\omega$ . Bij atomen geeft dit aanleiding tot de normale Zeemansplitsing van spectraallijnen.

De potentiële energieoperator voor 2 deeltjes met spin  $\pm\frac{1}{2}\hbar$  is:

$$V(r) = V_1(r) + \frac{1}{\hbar^2}(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)V_2(r) = V_1(r) + \frac{1}{2}V_2(r)[S(S+1) - \frac{3}{2}]$$

Er zijn nu 2 toestanden mogelijk:  $S = 1$  (triplet) of  $S = 0$  (Singlet).

## 10.11 Het Dirac formalisme

Wanneer de  $p$  en  $E$  operatoren toegepast worden op het relativistische  $E^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2$  volgt de *Klein-Gordon* vergelijking:

$$\left( \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\vec{x}, t) = 0$$

De operator  $\square - m_0^2c^2/\hbar^2$  kan men nu in 2 delen splitsen:

$$\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} = \left\{ \gamma_\lambda \frac{\partial}{\partial x_\lambda} - \frac{m_0 c}{\hbar} \right\} \left\{ \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{m_0 c}{\hbar} \right\}$$

waarin voor de Dirac matrices  $\gamma$  geldt:  $\{\gamma_\lambda, \gamma_\mu\} = \gamma_\lambda\gamma_\mu + \gamma_\mu\gamma_\lambda = 2\delta_{\lambda\mu}$ . (In de ART wordt dit  $2g_{\lambda\mu}$ ). Hieruit is af te leiden dat de  $\gamma$  hermitische  $4 \times 4$  matrices zijn die gegeven worden door:

$$\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_k \\ i\sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

De Dirac vergelijking is nu:

$$\left( \gamma_\lambda \frac{\partial}{\partial x_\lambda} + \frac{m_0 c}{\hbar} \right) \psi(\vec{x}, t) = 0$$

waarin  $\psi(x) = (\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \psi_4(x))$  een spinor is.



## 10.12 Atoomfysica

### 10.12.1 Oplossingen

Als de potentiële energie alleen van  $r$  afhangt kunnen de oplossingen van de Schrödingervergelijking in bolcoördinaten geschreven worden als:  $\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)\chi_{m_s}$ , met

$$Y_{lm} = \frac{C_{lm}}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

Voor een atoom of ion met één elektron geldt:  $R_{lm}(\rho) = C_{lm} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$

met  $\rho = 2rZ/na_0$  met  $a_0 = \varepsilon_0 h^2 / \pi m_e e^2$ . Hierin zijn  $L_i^j$  de geassocieerde Laguerre functies en zijn  $P_l^m$  de geassocieerde Legendre polynomen:

$$P_l^{|m|}(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} [(x^2-1)^l] \quad , \quad L_n^m(x) = \frac{(-1)^m n!}{(n-m)!} e^{-x} x^{-m} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} (e^{-x} x^n)$$

De pariteit van deze oplossingen is  $(-1)^l$ . De ontardingsgraad is gegeven door  $2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$ .

### 10.12.2 Eigenwaardevergelijkingen

De verschillende eigenwaardevergelijkingen voor een atoom of ion met één elektron zijn:

Vergelijking	Eigenwaarde	Range
$H_{\text{op}}\psi = E\psi$	$E_n = \mu e^4 Z^2 / 8\varepsilon_0^2 h^2 n^2$	$n \geq 1$
$L_{z\text{op}}Y_{lm} = L_z Y_{lm}$	$L_z = m_l \hbar$	$-l \leq m_l \leq l$
$L_{\text{op}}^2 Y_{lm} = L^2 Y_{lm}$	$L^2 = l(l+1)\hbar^2$	$0 \leq l < n$
$S_{z\text{op}}\chi = S_z \chi$	$S_z = m_s \hbar$	$m_s = \pm \frac{1}{2}$
$S_{\text{op}}^2 \chi = S^2 \chi$	$S^2 = s(s+1)\hbar^2$	$s = \frac{1}{2}$

### 10.12.3 Spin-baan wisselwerking

Het totale impulsmoment is gegeven door  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{M}$ . Het totale magnetische dipoolmoment van een elektron is dan  $\vec{M} = \vec{M}_L + \vec{M}_S = -(e/2m_e)(\vec{L} + g_S \vec{S})$  waarin  $g_S = 2,0023$  de gyromagnetische verhouding van het elektron is. Verder geldt:  $J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} = L^2 + S^2 + 2L_z S_z + L_+ S_- + L_- S_+$ .  $J$  heeft quantumgetallen  $j$  met als mogelijke waarden  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , met  $2j + 1$  mogelijke  $z$  componenten ( $m_J \in \{-j, \dots, 0, \dots, j\}$ ). Als de wisselwerkingsenergie tussen  $S$  en  $L$  klein is, kan men stellen:  $E = E_n + E_{SL} = E_n + a \vec{S} \cdot \vec{L}$ . Er volgt:

$$a = \frac{|E_n| Z^2 \alpha^2}{\hbar^2 n l (l+1) (l + \frac{1}{2})}$$

Wanneer tevens rekening gehouden wordt met de relativistische correctie wordt dit:

$$E = E_n + \frac{|E_n| Z^2 \alpha^2}{n} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right)$$

Dit geeft aanleiding tot de *fijnstructuur* in atomaire spectra. Voor het gemiddelde magnetisch moment geldt, met  $g_S = 2$ :  $\vec{M}_{\text{gem}} = -(e/2m_e) g \hbar \vec{J}$ , waarin  $g$  de Landé-factor is:

$$g = 1 + \frac{\vec{S} \cdot \vec{J}}{J^2} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

Voor atomen met meer dan 1 elektron zijn er twee limietgevallen:

1.  $L - S$  koppeling: bij kleine atomen is de elektrostatistische wisselwerking dominant en kan de toestand gekarakteriseerd worden door  $L, S, J, m_J$ .  $J \in \{|L - S|, \dots, L + S - 1, L + S\}$  en  $m_J \in \{-J, \dots, J - 1, J\}$ . De spectroscopische notatie bij deze interactie is:  ${}^{2S+1}L_J$ .  $2S + 1$  is de multipliciteit van een multiplet.
2.  $j - j$  koppeling: bij grotere atomen is de elektrostatistische wisselwerking zwakker dan de  $L_i \cdot s_i$  wisselwerking van een elektron. De toestand wordt gekarakteriseerd door  $j_1 \dots j_n, J, m_J$  waarbij alleen de  $j_i$  van de niet gevulde subshillen meedoen.

Voor grotere atomen geldt voor het energieverval in een magneetveld:  $\Delta E = g\mu_B m_J B$  met  $g$  de Landé factor. Voor een overgang tussen 2 singlet toestanden splits de spectraallijn in 3 delen, voor  $\Delta m_J = -1, 0, +1$ . Dit geeft aanleiding tot het normale Zeeman-effect. Voor hogere  $S$  splits de lijn in meer delen: het anomale Zeeman-effect.

Wisselwerking met de kernspin geeft aanleiding tot de hyperfijnstructuur.

### 10.12.4 Selectieregels

Voor de dipoolovergangsmatrixelementen geldt:  $p_0 \sim |\langle l_2 m_2 | \vec{E} \cdot \vec{r} | l_1 m_1 \rangle|$ . Uit behoud van impulsmoment volgt dat voor een dipoolovergang geldt dat voor het elektron dat springt  $\Delta l = \pm 1$ .

Voor een atoom waar  $L - S$  koppeling dominant is geldt verder:  $\Delta S = 0$  (niet strikt),  $\Delta L = 0, \pm 1$ ,  $\Delta J = 0, \pm 1$  maar geen  $J = 0 \rightarrow J = 0$  overgangen,  $\Delta m_J = 0, \pm 1$ , maar  $\Delta m_J = 0$  is verboden als  $\Delta J = 0$ .

Voor een atoom waar  $j - j$  koppeling dominant is geldt verder: voor het elektron dat springt geldt, behalve  $\Delta l = \pm 1$  ook:  $\Delta j = 0, \pm 1$ , en voor alle andere elektronen:  $\Delta j = 0$ . Voor het atoom als geheel geldt verder:  $\Delta J = 0, \pm 1$  maar geen  $J = 0 \rightarrow J = 0$  overgang en  $\Delta m_J = 0, \pm 1$ , maar  $\Delta m_J = 0$  is verboden als  $\Delta J = 0$ .

## 10.13 Wisselwerking met het elektromagnetische veld

De Hamiltoniaan van een elektron in het elektromagnetisch veld is:

$$H = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} + e\vec{A})^2 - eV = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{e}{2\mu} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2}{2\mu} A^2 - eV$$

met  $\mu$  de gereduceerde massa van het systeem. De term  $\sim A^2$  is meestal te verwaarlozen, behalve bij zeer sterke velden of macroscopische bewegingen, ze is bij  $\vec{B} = B\vec{e}_z$  gegeven door  $e^2 B^2 (x^2 + y^2) / 8\mu$ .

Wanneer een ijktransformatie op de elektromagnetische potentialen wordt uitgevoerd:  $\vec{A}' = \vec{A} - \nabla f$ ,  $V' = V + \partial f / \partial t$ , zal de golf functie meetransformeren volgens  $\psi' = \psi e^{iqef/\hbar}$  met  $qe$  de lading van het deeltje. Omdat  $f = f(x, t)$  is dit een lokale ijktransformatie i.t.t. een globale ijktransformatie  $\psi' = \psi e^{i\varphi}$ , die men altijd mag toepassen.

## 10.14 Storingsrekening

### 10.14.1 Tijdonafhankelijke storingsrekening

Om de vergelijking  $(H_0 + \lambda H_1)\psi_n = E_n \psi_n$  op te lossen moet men de eigenfuncties van  $H = H_0 + \lambda H_1$  te vinden. Stel dat  $\phi_n$  een complete set eigenfuncties is van ongestoorde Hamiltoniaan  $H_0$ :  $H_0 \phi_n = E_n^0 \phi_n$ . Omdat  $\phi_n$  een volledig stelsel is geldt dan:

$$\psi_n = N(\lambda) \left\{ \phi_n + \sum_{k \neq n} c_{nk}(\lambda) \phi_k \right\}$$

Wanneer  $c_{nk}$  en  $E_n$  worden ontwikkeld naar  $\lambda$ :  $c_{nk} = \lambda c_{nk}^{(1)} + \lambda^2 c_{nk}^{(2)} + \dots$   
 $E_n = E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$

en dit invullen in de Schrödingervergelijking, is het resultaat:  $E_n^{(1)} = \langle \phi_n | H_1 | \phi_n \rangle$  en

$c_{nm}^{(1)} = \frac{\langle \phi_m | H_1 | \phi_n \rangle}{E_n^0 - E_m^0}$  als  $m \neq n$ . De 2e orde correctie op de energie is dan gegeven door:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}. \text{ In 1e orde geldt dus: } \psi_n = \phi_n + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k | \lambda H_1 | \phi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \phi_k.$$

Als er ontarding is geldt bovenstaande niet. Er wordt dan bij elk niveau  $n$  een orthonormale set eigenfuncties  $\phi_{ni}$  gekozen, zo dat  $\langle \phi_{mi} | \phi_{nj} \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij}$ . Nu wordt  $\psi$  ontwikkeld als

$$\psi_n = N(\lambda) \left\{ \sum_i \alpha_i \phi_{ni} + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_i \beta_i \phi_{ki} + \dots \right\}$$

$E_{ni} = E_n^0 + \lambda E_{ni}^{(1)}$  wordt benaderd door  $E_{ni}^0 := E_n^0$ . Substitutie in de Schrödingervergelijking en inproduct nemen met  $\phi_{ni}$  geeft:  $\sum_i \alpha_i \langle \phi_{nj} | H_1 | \phi_{ni} \rangle = E_n^{(1)} \alpha_j$ . Normering vereist dat  $\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$ .

## 10.14.2 Tijdafhankelijke storingsrekening

Uitgaande van de Schrödingervergelijking  $i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = (H_0 + \lambda V(t))\psi(t)$

en de ontwikkeling  $\psi(t) = \sum_n c_n(t) \exp\left(\frac{-iE_n^0 t}{\hbar}\right) \phi_n$  met  $c_n(t) = \delta_{nk} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \dots$

volgt:  $c_n^{(1)}(t) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t \langle \phi_n | V(t') | \phi_k \rangle \exp\left(\frac{i(E_n^0 - E_k^0)t'}{\hbar}\right) dt'$

## 10.15 Meer deeltjes systemen

### 10.15.1 Algemeen

Identieke deeltjes zijn ononderscheidbaar. Voor de totale golffunctie van een systeem van identieke ononderscheidbare deeltjes geldt:

1. Deeltjes met een halfvallige spin (Fermionen):  $\psi_{\text{totaal}}$  moet antisymmetrisch zijn t.o.v. verwisseling van de coördinaten (ruimtelijk en spin) van elk paar deeltjes. Dit geeft aanleiding tot het Pauliprincipe: 2 fermionen kunnen niet in een identieke toestand verkeren omdat dan  $\psi_{\text{totaal}} = 0$ .
2. Deeltjes met een heeltallige spin (Bosonen):  $\psi_{\text{totaal}}$  moet symmetrisch zijn t.o.v. verwisseling van de coördinaten (ruimtelijk en spin) van elk paar deeltjes.

Voor een systeem van 2 elektronen zijn er 2 mogelijkheden voor de ruimtelijke golffunctie. Wanneer  $a$  en  $b$  de quantumgetallen van de elektronen 1 en 2 voorstellen, geldt:

$$\psi_S(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1), \quad \psi_A(1, 2) = \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)$$

Omdat de deeltjes bij  $\psi_A$  elkaar nooit dicht naderen is de afstotingsenergie hiervan kleiner. Voor de spingolffuncties zijn er de volgende mogelijkheden:

$$\chi_A = \frac{1}{2}\sqrt{2}[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)] \quad m_s = 0$$

$$\chi_S = \begin{cases} \chi_+(1)\chi_+(2) & m_s = +1 \\ \frac{1}{2}\sqrt{2}[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_+(2)\chi_-(1)] & m_s = 0 \\ \chi_-(1)\chi_-(2) & m_s = -1 \end{cases}$$

Omdat de totale golffunctie antisymmetrisch moet zijn, geldt dus:  $\psi_{\text{totaal}} = \psi_S \chi_A$  óf  $\psi_{\text{totaal}} = \psi_A \chi_S$ .

Voor  $N$  deeltjes is de symmetrische baangolffunctie gegeven door:

$$\psi_S(1, \dots, N) = \sum \psi(\text{alle permutaties van } 1..N)$$

De antisymmetrische golffunctie is gegeven door de determinant  $\psi_A(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} |u_{E_i}(j)|$

## 10.15.2 Moleculen

De golffuncties van de atomen  $a$  en  $b$  zijn  $\phi_a$  en  $\phi_b$ . Wanneer de 2 atomen elkaar naderen zijn er twee mogelijkheden: de totale golffunctie neigt naar de bonding functie met lagere totale energie  $\psi_B = \frac{1}{2}\sqrt{2}(\phi_a + \phi_b)$  of naar de anti-bonding functie met hogere energie  $\psi_{AB} = \frac{1}{2}\sqrt{2}(\phi_a - \phi_b)$ . Wanneer een moleculair-orbitaal symmetrisch is om de bindingsas, zoals een combinatie van 2 s-orbitals heet het een  $\sigma$ -orbital, anders een  $\pi$ -orbital, zoals de combinatie van 2 p-niveaus langs 2 assen.

De energie van een systeem is gegeven door  $E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$ .

Als  $\psi$  slechts een benadering is van de oplossing van  $H\psi = E\psi$ , zal de zo berekende energie steeds *hoger* zijn dan de werkelijke energie. Bovendien is, in het geval er meerdere functies zijn, de functie met de laagste  $E$  de beste benadering. Dit toepassende op de functie  $\psi = \sum c_i \phi_i$  vindt men:  $(H_{ij} - ES_{ij})c_i = 0$ . Deze vergelijking heeft slechts oplossingen als de *seculiere determinant*  $|H_{ij} - ES_{ij}| = 0$ . Hierin is  $H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$  en  $S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle$ .  $\alpha_i := H_{ii}$  is de Coulomb integraal en  $\beta_{ij} := H_{ij}$  de exchange integraal.  $S_{ii} = 1$  en  $S_{ij}$  is de overlap integraal.

In de moleculair-orbitaal theorie plaatst men in 1e benadering beide elektronen van een binding in de bonding orbitaal:  $\psi(1, 2) = \psi_B(1)\psi_B(2)$ . Dit geeft een grote elektronendichtheid tussen de kernen en daardoor een afstoting. Een betere benadering is:  $\psi(1, 2) = C_1\psi_B(1)\psi_B(2) + C_2\psi_{AB}(1)\psi_{AB}(2)$ , met  $C_1 = 1$  en  $C_2 \approx 0, 6$ .

In sommige atomen, zoals C, is het energetisch gunstiger om orbitalen te vormen die een combinatie zijn van de s, p en d niveaus. In C zijn er drie vormen van hybridisatie:

1. SP-hybridisatie:  $\psi_{sp} = \frac{1}{2}\sqrt{2}(\psi_{2s} \pm \psi_{2p_z})$ . Er zijn nu 2 hybride orbitalen, die op 1 lijn onder  $180^\circ$  van elkaar liggen. Verder zijn er nog de  $2p_x$  en  $2p_y$  orbitalen.
2. SP<sup>2</sup> hybridisatie:  $\psi_{sp^2} = \psi_{2s}/\sqrt{3} + c_1\psi_{2p_x} + c_2\psi_{2p_y}$ , waarin  $(c_1, c_2) \in \{(\sqrt{2/3}, 0), (-1/\sqrt{6}, 1/\sqrt{2}), (-1/\sqrt{6}, -1/\sqrt{2})\}$ . De 3 SP<sup>2</sup> orbitalen liggen in één vlak, hun symmetrie assen maken een hoek van  $120^\circ$ .
3. SP<sup>3</sup> hybridisatie:  $\psi_{sp^3} = \frac{1}{2}(\psi_{2s} \pm \psi_{2p_x} \pm \psi_{2p_y} \pm \psi_{2p_z})$ . De 4 SP<sup>3</sup> orbitalen vormen een tetraeder met hun symmetrieassen onder een hoek van  $109^\circ 28'$ .

## 10.16 Quantumstatistiek

Als een systeem in een toestand verkeert waarin men geen maximale informatie over dat systeem heeft is het te beschrijven met de *dichtheidsmatrix*  $\rho$ . Als het systeem met kans  $r_i$  in een toestand met golffunctie  $\psi_i$  verkeert, is de verwachtingswaarde  $a$  van  $A$ :  $\langle a \rangle = \sum_i r_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle$ .

Als men  $\psi$  ontwikkelt naar de orthonormale basis  $\{\phi_k\}$  volgens:  $\psi^{(i)} = \sum_k c_k^{(i)} \phi_k$ , dan geldt

$$\langle A \rangle = \sum_k (A\rho)_{kk} = \text{Tr}(A\rho)$$

met  $\rho_{lk} = c_k^* c_l$ .  $\rho$  is hermitisch, met  $\text{Tr}(\rho) = 1$ . Verder is  $\rho = \sum r_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ . De kans om bij een meting van  $A$  eigenwaarde  $a_n$  te vinden is  $\rho_{nn}$  als voor  $\{\phi_k\}$  een basis van eigenvectoren van  $A$  gebruikt wordt. Voor de tijdsafhankelijkheid geldt (in het Schrödingerbeeld zijn de operatoren niet expliciet tijdsafhankelijk):

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]$$

Voor een macroscopisch systeem in evenwicht geldt  $[H, \rho] = 0$ . Als alle quantumtoestanden bij dezelfde energie even waarschijnlijk zijn:  $P_i = P(E_i)$ , leidt dit tot de verdeling:

$$P_n(E) = \rho_{nn} = \frac{e^{-E_n/kT}}{Z} \text{ met de toestandssom } Z = \sum_n e^{-E_n/kT}$$

De thermodynamische grootheden hangen als volgt samen met deze definities:  $F = -kT \ln(Z)$ ,  $U = \langle H \rangle = \sum_n p_n E_n = -\frac{\partial}{\partial kT} \ln(Z)$ ,  $S = -k \sum_n P_n \ln(P_n)$ . Voor een gemengde toestand van  $M$  orthonormale quantumtoestanden met kans  $1/M$  volgt dan:  $S = k \ln(M)$ .

In thermisch evenwicht zijn de verdelingsfuncties voor de interne toestanden van een systeem gegeven door de meest waarschijnlijke verdeling. Deze is te vinden door de functie die het totaal aantal mogelijke verdelingen geeft te maximaliseren m.b.v. de formule van Stirling:  $\ln(n!) \approx n \ln(n) - n$ , en de voorwaarden  $\sum_k n_k = N$  en  $\sum_k n_k W_k = W$ . Voor identieke, ononderscheidbare deeltjes die voldoen aan het uitsluitingsprincipe is het totaal aantal mogelijke verdelingen gegeven door:

$$P = \prod_k \frac{g_k!}{n_k!(g_k - n_k)!}$$

Dit geeft de *Fermi-Dirac statistiek*. Voor ononderscheidbare deeltjes die *niet* voldoen aan het uitsluitingsprincipe is het aantal mogelijke verdelingen gegeven door

$$P = N! \prod_k \frac{g_k^{n_k}}{n_k!}$$

Dit geeft de *Bose-Einstein statistiek*. De verdelingsfuncties die aangeven hoe de deeltjes verdeeld zijn over de diverse 1-deeltjestoestanden  $k$  die elk  $g_k$ -voudig ontwaard zijn, hangen dus af van de spin van de deeltjes. Ze zijn gegeven door:

1. Fermi-Dirac statistiek: heeltallige spin.  $n_k \in \{0, 1\}$ ,  $n_k = \frac{N}{Z_g} \frac{g_k}{\exp((E_k - \mu)/kT) + 1}$   
met  $\ln(Z_g) = \sum g_k \ln[1 + \exp((E_i - \mu)/kT)]$ .

2. Bose-Einstein statistiek: halftallige spin.  $n_k \in \mathbb{N}$ ,  $n_k = \frac{N}{Z_g} \frac{g_k}{\exp((E_k - \mu)/kT) - 1}$   
met  $\ln(Z_g) = -\sum g_k \ln[1 - \exp((E_i - \mu)/kT)]$ .

Hierin is  $Z_g$  de groot-canonieke toestandssom en  $\mu$  de chemische potentiaal. Deze wordt bepaald uit de eis  $\sum n_k = N$ . Hiervoor geldt:  $\lim_{T \rightarrow 0} \mu = E_F$ , de Fermi-energie.  $N$  is het totaal aantal deeltjes. De verdelingswet van Maxwell-Boltzmann volgt hieruit in de limiet dat  $E_k - \mu \gg kT$ :

$$n_k = \frac{N}{Z} \exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right) \text{ met } Z = \sum_k g_k \exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right)$$

Met de Fermi-energie zijn de Fermi-Dirac en Bose-Einstein statistieken te schrijven als:

1. Fermi-Dirac statistiek:  $n_k = \frac{g_k}{\exp((E_k - E_F)/kT) + 1}$ .
2. Bose-Einstein statistiek:  $n_k = \frac{g_k}{\exp((E_k - E_F)/kT) - 1}$ .

# Hoofdstuk 11

## Plasmafysica

### 11.1 Basisbegrippen

De *ionisatiegraad*  $\alpha$  van een plasma is gedefinieerd door:  $\alpha = \frac{n_e}{n_e + n_0}$

met  $n_e$  de elektronendichtheid en  $n_0$  de neutralendichtheid. Voor een plasma dat ook negatieve ionen en moleculen bevat is  $\alpha$  niet goed gedefinieerd.

De kans dat een testdeeltje botst met een ander is  $dP = n\sigma dx$  waarin  $\sigma$  de *werkzame doorsnede* is. De botsingsfrequentie  $\nu_c = 1/\tau_c = n\sigma v$ . De *gemiddelde vrije weglengte* is gegeven door  $\lambda_v = 1/n\sigma$ . Men definieert de *ratecoëfficiënt*  $K$  als  $K = \langle \sigma v \rangle$ . Het aantal botsingen per volume en tijdseenheid tussen deeltjes van soort 1 en 2 is gegeven door  $n_1 n_2 \langle \sigma v \rangle = K n_1 n_2$ .

Omdat er in een plasma afscherming van lading plaatsvindt wordt de potentiaal van een elektron gegeven door

$$V(r) = \frac{-e}{4\pi\epsilon_0 r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right) \quad \text{met} \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T_e T_i}{e^2 (n_e T_i + n_i T_e)}} \approx \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T_e}{n_e e^2}}$$

Hierin is  $\lambda_D$  de *Debye lengte*. Voor afstanden  $< \lambda_D$  mag men het plasma niet meer als quasi-neutraal beschouwen. De afwijkingen van ladingsneutraliteit door thermische beweging wordt teniet gedaan door oscillaties met frequentie

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0}}$$

De afstand van dichtste nadering bij een botsing voor 2 gelijksoortige ladingsdragers bij  $\pi/2$  afbuiging is  $2b_0 = e^2 / (4\pi\epsilon_0 \frac{1}{2} m v^2)$ . Een “net” plasma wordt gedefinieerd als een plasma waarvoor geldt:  $b_0 < n_e^{-1/3} \ll \lambda_D \ll L_p$ . Hierin is  $L_p := |n_e / \nabla n_e|$  de gradiëntlengte van het plasma.

### 11.2 Transport

Relaxatietijden worden gedefinieerd als  $\tau = 1/\nu_c$ . Uitgaande van  $\sigma_m = 4\pi b_0^2 \ln(\Lambda_C)$  vindt men met  $\frac{1}{2} m v^2 = kT$ :

$$\tau_m = \frac{4\pi\epsilon_0^2 m^2 v^3}{n e^4 \ln(\Lambda_C)} = \frac{8\sqrt{2}\pi\epsilon_0^2 \sqrt{m} (kT)^{3/2}}{n e^4 \ln(\Lambda_C)}$$

Voor impulsoverdracht tussen elektronen en ionen geldt bij een Maxwellse snelheidsverdeling:

$$\tau_{ee} = \frac{6\pi\sqrt{3}\epsilon_0^2 \sqrt{m_e} (kT_e)^{3/2}}{n_e e^4 \ln(\Lambda_C)} \approx \tau_{ei}, \quad \tau_{ii} = \frac{6\pi\sqrt{3}\epsilon_0^2 \sqrt{m_i} (kT_i)^{3/2}}{n_i e^4 \ln(\Lambda_C)}$$

De energierelaxatietijden voor gelijke deeltjes zijn gelijk aan de impulsrelaxatietijden. Omdat voor e-i botsingen de energieoverdracht slechts  $\sim 2m_e/m_i$  gaat dit echter langzaam. Globaal geldt de verhouding  $\tau_{ee} : \tau_{ei} : \tau_{ie}^E : \tau_{ie}^E = 1 : 1 : \sqrt{m_i/m_e} : m_i/m_e$ .

De relaxatie voor e-o interactie is veel gecompliceerder. Voor  $T > 10$  eV geldt globaal:  $\sigma_{eo} = 10^{-17} v_e^{-2/5}$ , voor lage energieën kan dit tot een factor 10 lager zijn.

De soortelijke weerstand  $\eta = E/J$  van een plasma is gegeven door:

$$\eta = \frac{n_e e^2}{m_e \nu_{ei}} = \frac{e^2 \sqrt{m_e} \ln(\Lambda_C)}{6\pi\sqrt{3}\epsilon_0^2 (kT_e)^{3/2}}$$

De diffusiecoëfficiënt  $D$  is gedefinieerd via de flux  $\Gamma$  volgens  $\vec{\Gamma} = n\vec{v}_{\text{diff}} = -D\nabla n$ . De continuïteitsvergelijking luidt  $\partial_t n + \nabla(nv_{\text{diff}}) = 0 \Rightarrow \partial_t n = D\nabla^2 n$ . Men vindt  $D = \frac{1}{3}\lambda_v v$ . Een ruwe afschatting geeft  $\tau_D = L_p/D = L_p^2\tau_c/\lambda_v^2$ . Voor gemagnetiseerde plasma's dient men  $\lambda_v$  te vervangen door de cyclotronstraal. In elektrische velden vindt men ook  $\vec{J} = ne\mu\vec{E} = e(n_e\mu_e + n_i\mu_i)\vec{E}$  met  $\mu = e/mv_c$  de beweeglijkheid van de deeltjes. De Einstein relatie is:

$$\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{e}$$

Omdat elektronen en ionen door de ladingsneutraliteit sterk gekoppeld zijn diffunderen ze niet onafhankelijk. De *ambipolaire diffusiecoëfficiënt*  $D_{\text{amb}}$  is gedefinieerd volgens  $\vec{\Gamma} = \vec{\Gamma}_i = \vec{\Gamma}_e = -D_{\text{amb}}\nabla n_{e,i}$ . Hieruit volgt dat

$$D_{\text{amb}} = \frac{kT_e/e - kT_i/e}{1/\mu_e - 1/\mu_i} \approx \frac{kT_e\mu_i}{e}$$

In aanwezigheid van een uitwendig magnetisch veld  $B_0$  zullen deeltjes gaan bewegen in een spiraalbaan met *cyclotronstraal*  $\rho = mv/eB_0$  en met de cyclotronfrequentie  $\Omega = B_0e/m$ . De gesignaleerde baan wordt onderbroken door botsingen. Men noemt het plasma *gemagnetiseerd* als  $\lambda_v > \rho_{e,i}$ . De elektronen zijn dus gemagnetiseerd als

$$\frac{\rho_e}{\lambda_{ee}} = \frac{\sqrt{m_e}e^3 n_e \ln(\Lambda_C)}{6\pi\sqrt{3}\epsilon_0^2 (kT_e)^{3/2} B_0} < 1$$

Vanwege de vereiste ladingsneutraliteit zorgt magnetisatie van alleen de elektronen al voor een redelijke opsluiting van het plasma. Bij magnetische opsluiting geldt:  $\nabla p = \vec{J} \times \vec{B}$ . Samen met de 2 stationaire Maxwellvergelijkingen voor het  $B$ -veld zijn dit de ideale magneto-hydrodynamische vergelijkingen. Voor een uniform  $B$ -veld geldt:  $p = nkT = B^2/2\mu_0$ .

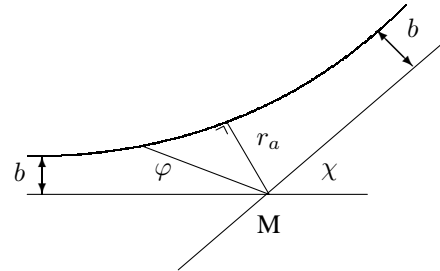
Als er zowel een elektrisch als een magnetisch veld aanwezig is, zullen elektronen en ionen beide dezelfde kant op bewegen. Als men stelt dat  $\vec{E} = E_r\vec{e}_r + E_z\vec{e}_z$  en  $\vec{B} = B_z\vec{e}_z$  geeft de  $\vec{E} \times \vec{B}$  drift een snelheid  $\vec{u} = (\vec{E} \times \vec{B})/B^2$  en de snelheid in het  $r, \varphi$  vlak  $\dot{r}(r, \varphi, t) = \vec{u} + \vec{\rho}(t)$ .

## 11.3 Elastische botsingen

### 11.3.1 Algemeen

De strooihoek van een deeltje in wisselwerking met een ander deeltje, zoals gegeven in het figuur hiernaast, is:

$$\chi = \pi - 2b \int_{r_a}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{W(r)}{E_0}}}$$



Deeltjes met een botsingsparameter tussen  $b$  en  $b + db$ , die door een ring gaan met  $d\sigma = 2\pi b db$  verlaten het strooigebied onder een ruimtehoek  $d\Omega = 2\pi \sin(\chi)d\chi$ . De *differentiële werkzame doorsnede* is dan gedefinieerd als:

$$I(\Omega) = \left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = \frac{b}{\sin(\chi)} \frac{\partial b}{\partial \chi}$$

Voor een potentiële energie  $W(r) = kr^{-n}$  volgt:  $I(\Omega, v) \sim v^{-4/n}$ .

Voor lage energieën,  $\mathcal{O}(1 \text{ eV})$  bevat  $\sigma$  een *Ramsauer minimum*. Dit komt vanwege interferentie van de materiegolven achter het object.  $I(\Omega)$  voor hoeken  $0 < \chi < \lambda/4$  is groter dan de klassieke waarde.

### 11.3.2 De Coulomb interactie

Voor de Coulomb interactie geldt:  $2b_0 = q_1 q_2 / 2\pi\epsilon_0 m v_0^2$ , dus  $W(r) = 2b_0/r$ . Dit geeft  $b = b_0 \cot(\frac{1}{2}\chi)$  en

$$I(\Omega) = \frac{b}{\sin(\chi)} \frac{\partial b}{\partial \chi} = \frac{b_0^2}{4 \sin^2(\frac{1}{2}\chi)}$$

Omdat de maximale invloedssfeer van een deeltje gaat tot  $r = \lambda_D$  geldt:  $\sigma = \pi(\lambda_D^2 - b_0^2)$ . Omdat geldt  $dp = d(mv) = mv_0(1 - \cos \chi)$  vindt men voor de werkzame doorsnede gerelateerd aan impulsuitwisseling  $\sigma_m$ :

$$\sigma_m = \int (1 - \cos \chi) I(\Omega) d\Omega = 4\pi b_0^2 \ln \left( \frac{1}{\sin(\frac{1}{2}\chi_{\min})} \right) = 4\pi b_0^2 \ln \left( \frac{\lambda_D}{b_0} \right) := 4\pi b_0^2 \ln(\Lambda_C) \sim \frac{\ln(v^4)}{v^4}$$

met  $\ln(\Lambda_C)$  de *Coulomb-logaritme*. Hiervoor geldt:  $\Lambda_C = \lambda_D/b_0 = 9n(\lambda_D)$ .

### 11.3.3 De geïnduceerde dipool interactie

De geïnduceerde dipool wisselwerking, met  $\vec{p} = \alpha \vec{E}$ , geeft voor de potentiaal  $V$  en de energie  $W$  in een dipoolveld:

$$V(r) = \frac{\vec{p} \cdot \vec{e}_r}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad W(r) = -\frac{|e|p}{8\pi\epsilon_0 r^2} = -\frac{\alpha e^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 r^4}$$

met  $b_a = \sqrt[4]{\frac{2e^2\alpha}{(4\pi\epsilon_0)^2 \frac{1}{2} m v_0^2}}$  geldt:  $\chi = \pi - 2b \int_{r_a}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} + \frac{b_a^4}{4r^4}}}$

Als  $b \geq b_a$  zou de lading op het atoom vallen. Dit gebeurt niet door de afstotende kernkrachten. Als de strooihoek enkele malen  $2\pi$  is spreekt men van invangst. De werkzame doorsnede voor invangst  $\sigma_{\text{orb}} = \pi b_a^2$  noemt men de Langevin limiet, en is een ondergrens voor de totale  $\sigma$ .

### 11.3.4 Het massamiddelpuntssysteem

Wanneer een verstrooiing in het massamiddelpuntssysteem onder een hoek  $\chi$  van twee deeltjes met massa's  $m_1$  en  $m_2$  vergeleken wordt met de verstrooiing onder hoek  $\theta$  in het laboratoriumsysteem is het verband:

$$\tan(\theta) = \frac{m_2 \sin(\chi)}{m_1 + m_2 \cos(\chi)}$$

Het energieverlies  $\Delta E$  van het inkomende deeltje is gegeven door:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\frac{1}{2} m_2 v_2^2}{\frac{1}{2} m_1 v_1^2} = \frac{2m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} (1 - \cos(\chi))$$

### 11.3.5 Verstrooiing van licht

Verstrooiing van licht aan vrije elektronen noemt men Thomson verstrooiing. De verstrooiing is vrij van collectieve effecten als  $k\lambda_D \ll 1$ . De werkzame doorsnede  $\sigma = 6,65 \cdot 10^{-29} \text{m}^2$  en

$$\frac{\Delta f}{f} = \frac{2v}{c} \sin(\frac{1}{2}\chi)$$

Dit geeft een verstrooide energie  $E_{\text{ver}} \sim n\lambda_0^4/(\lambda^2 - \lambda_0^2)^2$  met  $n$  de dichtheid. Als  $\lambda \gg \lambda_0$  spreekt men van Rayleigh verstrooiing. Thomson verstrooiing is een limietgeval van de Compton verstrooiing, die gegeven is door  $\lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos \chi)$  met  $\lambda_C = h/mc$ , en is niet meer bruikbaar wanneer relativistische effecten belangrijk worden.



## 11.4 Thermodynamisch evenwicht en reversibiliteit

Voor een plasma in evenwicht gelden de stralingswet van Planck en de Maxwellse snelheidsverdeling

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1} d\nu, \quad N(E, T)dE = \frac{2\pi n}{(\pi kT)^{3/2}} \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE$$

“Detailed balancing” houdt in dat in evenwicht het aantal heengaande reacties gelijk is aan het aantal teruggaande reacties omdat beide processen dezelfde waarschijnlijkheid hebben als er gecorrigeerd wordt voor de gebruikte faseruimte. Voor de reactie

$$\sum_{\text{heen}} X_{\text{heen}} \rightleftharpoons \sum_{\text{terug}} X_{\text{terug}}$$

geldt in een plasma in evenwicht *microscopische* reversibiliteit:

$$\prod_{\text{heen}} \hat{\eta}_{\text{heen}} = \prod_{\text{terug}} \hat{\eta}_{\text{terug}}$$

Als de snelheidsverdeling Maxwells is, geldt voor de elementaire bezetting:

$$\hat{\eta}_x = \frac{n_x}{g_x} \frac{h^3}{(2\pi m_x kT)^{3/2}} e^{-E_{\text{kin}}/kT}$$

met  $g$  het statistisch gewicht van de toestand en  $n/g := \eta$ . Voor elektronen geldt  $g = 2$ , voor aangeslagen toestanden kan men meestal stellen  $g = 2j + 1 = 2n^2$ .

Hiermee vindt men voor de Boltzmann balans,  $X_p + e^- \rightleftharpoons X_1 + e^- + (E_{1p})$ :

$$\frac{n_p^B}{n_1} = \frac{g_p}{g_1} \exp\left(\frac{E_p - E_1}{kT_e}\right)$$

En voor de Saha balans,  $X_p + e^- + (E_{pi}) \rightleftharpoons X_1^+ + 2e^-$ :

$$\frac{n_p^S}{g_p} = \frac{n_1^+ n_e}{g_1^+ g_e} \frac{h^3}{(2\pi m_e kT_e)^{3/2}} \exp\left(\frac{E_{pi}}{kT_e}\right)$$

Omdat links en rechts niet evenveel deeltjes staan blijft er een factor  $g/V_e$  staan die de *Saha-sprong* veroorzaakt.

Uit microscopische reversibiliteit kan men afleiden dat voor de ratecoëfficiënten  $K(p, q, T) := \langle \sigma v \rangle_{pq}$  geldt:

$$K(q, p, T) = \frac{g_p}{g_q} K(p, q, T) \exp\left(\frac{\Delta E_{pq}}{kT}\right)$$

## 11.5 Inelastische botsingen

### 11.5.1 Typen botsingen

De kinetische energie kan gesplitst worden in een deel *van* en *in* het massamiddelpunt. De energie *in* het massamiddelpunt is beschikbaar voor reacties. Deze energie is

$$E = \frac{m_1 m_2 (v_1 - v_2)^2}{2(m_1 + m_2)}$$

Er zijn verschillende typen inelastische botsingen van belang in de plasmafysica:

1. Aanslag:  $A_p + e^- \rightleftharpoons A_q + e^-$
2. Verval:  $A_q \rightleftharpoons A_p + hf$

3. Ionisatie en 3-deeltjes recombinatie:  $A_p + e^- \rightleftharpoons A^+ + 2e^-$
4. Stralingsrecombinatie:  $A^+ + e^- \rightleftharpoons A_p + hf$
5. Gestimuleerde emissie:  $A_q + hf \rightarrow A_p + 2hf$
6. Associatieve ionisatie:  $A^{**} + B \rightleftharpoons AB^+ + e^-$
7. Penning ionisatie: b.v.  $Ne^* + Ar \rightleftharpoons Ar^+ + Ne + e^-$
8. Ladingsoverdracht:  $A^+ + B \rightleftharpoons A + B^+$
9. Resonante ladingsoverdracht:  $A^+ + A \rightleftharpoons A + A^+$

### 11.5.2 Werkzame doorsneden

Botsingen tussen een elektron en een atoom kan men benaderen door een botsing tussen een elektron en één van de elektronen van dat atoom. Dit geeft

$$\frac{d\sigma}{d(\Delta E)} = \frac{\pi Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 E (\Delta E)^2}$$

Voor de overgang  $p \rightarrow q$  volgt dan:  $\sigma_{pq}(E) = \frac{\pi Z^2 e^4 \Delta E_{q,q+1}}{(4\pi\epsilon_0)^2 E (\Delta E)_{pq}^2}$

Voor ionisatie vanuit toestand  $p$  geldt in goede benadering:  $\sigma_p = 4\pi a_0^2 Ry \left( \frac{1}{E_p} - \frac{1}{E} \right) \ln \left( \frac{1,25\beta E}{E_p} \right)$

Voor resonante ladingsoverdracht geldt:  $\sigma_{ex} = \frac{A[1 - B \ln(E)]^2}{1 + CE^{3,3}}$

## 11.6 Straling

In evenwicht geldt voor stralingsprocessen:

$$\underbrace{n_p A_{pq}}_{\text{emissie}} + \underbrace{n_p B_{pq} \rho(\nu, T)}_{\text{gestimuleerde emissie}} = \underbrace{n_q B_{qp} \rho(\nu, T)}_{\text{absorptie}}$$

Hierin is  $A_{pq}$  het matricelement van de overgang  $p \rightarrow q$ , en is gegeven door:

$$A_{pq} = \frac{8\pi^2 e^2 \nu^3 |r_{pq}|^2}{3\hbar\epsilon_0 c^3} \quad \text{met} \quad r_{pq} = \langle \psi_p | \vec{r} | \psi_q \rangle$$

Voor waterstofachtige atomen geldt:  $A_p = 1,58 \cdot 10^8 Z^4 p^{-4,5}$ , met  $A_p = 1/\tau_p = \sum_q A_{pq}$ . De intensiteit  $I$  van een lijn is gegeven door  $I_{pq} = h\nu A_{pq} n_p / 4\pi$ . De Einsteincoëfficiënten  $B$  zijn gegeven door:

$$B_{pq} = \frac{c^3 A_{pq}}{8\pi h\nu^3} \quad \text{en} \quad \frac{B_{pq}}{B_{qp}} = \frac{g_q}{g_p}$$

Een spectraallijn wordt door verschillende oorzaken verbreed:

1. Vanwege de eindige levensduur van een niveau. De natuurlijke levensduur van een niveau  $p$  is gegeven door  $\tau_p = 1 / \sum_q A_{pq}$ . Uit de onzekerheidsrelatie volgt dan:  $\Delta(h\nu) \cdot \tau_p = \frac{1}{2}\hbar$ , dit geeft

$$\Delta\nu = \frac{1}{4\pi\tau_p} = \frac{\sum_q A_{pq}}{4\pi}$$

De natuurlijke lijnbreedte is meestal  $\ll$  dan de volgende twee verbredingen:

2. De Doppler verbreding wordt veroorzaakt door de warmtebeweging van de deeltjes:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{2}{c} \sqrt{\frac{2 \ln(2) k T_i}{m_i}}$$

Deze verbreding geeft aanleiding tot een Gaussisch lijnprofiel:

$$k_\nu = k_0 \exp(-[2\sqrt{\ln 2}(\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D]^2), \text{ met } k \text{ de absorptie- of emissiecoëfficiënt.}$$

3. De Stark verbreding wordt veroorzaakt door de elektrische velden van de elektronen:

$$\Delta\lambda_{1/2} = \left[ \frac{n_e}{C(n_e, T_e)} \right]^{2/3}$$

met voor de H- $\beta$  lijn:  $C(n_e, T_e) \approx 3 \cdot 10^{14} \text{Å}^{-3/2} \text{cm}^{-3}$ .

De natuurlijke verbreding en de Starkverbreding geven aanleiding tot een Lorentz profiel van een spectraallijn:  $k_\nu = \frac{1}{2} k_0 \Delta\nu_L / [(\frac{1}{2} \Delta\nu_L)^2 + (\nu - \nu_0)^2]$ . De totale lijnvorm is een convolutie van het Gauss- en Lorentz profiel en heet een *Voigtprofiel*.

Het aantal overgangen  $p \rightarrow q$  wordt gegeven door  $n_p B_{pq} \rho$  én door  $n_p n_{h\nu} \langle \sigma_a c \rangle = n_p (\rho d\nu / h\nu) \sigma_a c$  met  $d\nu$  de bandbreedte van de lijn. Dan volgt voor de werkzame doorsnede van absorptieprocessen:  $\sigma_a = B_{pq} h\nu / c d\nu$ .

De in het plasma optredende achtergrondstraling is afkomstig van twee processen:

1. Free-Bound straling, afkomstig van stralingsrecombinatie. De emissie is gegeven door:

$$\varepsilon_{fb} = \frac{C_1 z_i n_i n_e}{\lambda^2 \sqrt{k T_e}} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k T_e}\right) \right] \xi_{fb}(\lambda, T_e)$$

met  $C_1 = 1,63 \cdot 10^{-43} \text{Wm}^4 \text{K}^{1/2} \text{sr}^{-1}$  en  $\xi$  de *Biberman factor*.

2. Free-free straling, afkomstig van de versnelling van deeltjes in het EM-veld van andere deeltjes:

$$\varepsilon_{ff} = \frac{C_1 z_i n_i n_e}{\lambda^2 \sqrt{k T_e}} \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k T_e}\right) \xi_{ff}(\lambda, T_e)$$

## 11.7 De Boltzmann transport vergelijking

Aangenomen wordt dat er voor een plasma een verdelingsfunctie  $F$  bestaat zodat

$$F(\vec{r}, \vec{v}, t) = F_r(\vec{r}, t) \cdot F_v(\vec{v}, t) = F_1(x, t) F_2(y, t) F_3(z, t) F_4(v_x, t) F_5(v_y, t) F_6(v_z, t)$$

Dan geldt de BTV:  $\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \nabla_r \cdot (F \vec{v}) + \nabla_v \cdot (F \vec{a}) = \left( \frac{\partial F}{\partial t} \right)_{\text{bots-stral}}$

Er van uit gaande dat  $v$  niet van  $r$  afhangt en  $a_i$  niet van  $v_i$ , geldt  $\nabla_r \cdot (F \vec{v}) = \vec{v} \cdot \nabla F$  en  $\nabla_v \cdot (F \vec{a}) = \vec{a} \cdot \nabla_v F$ . Dit geldt ook voor magneetvelden omdat  $\partial a_i / \partial x_i = 0$ . De snelheid is gesplitst in een thermische snelheid  $\vec{v}_t$  en een driftsnelheid  $\vec{w}$ . De totale dichtheid is gegeven door  $n = \int F d\vec{v}$  en  $\int \vec{v} F d\vec{v} = n \vec{w}$ .

De balansvergelijkingen kunnen nu worden afgeleid met de momentenmethode:

1. Massabalans:  $\int (\text{BTV}) d\vec{v} \Rightarrow \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \vec{w}) = \left( \frac{\partial n}{\partial t} \right)_{\text{bs}}$
2. Impulsbalans:  $\int (\text{BTV}) m \vec{v} d\vec{v} \Rightarrow mn \frac{d\vec{w}}{dt} + \nabla \Gamma' + \nabla p = mn \langle \vec{a} \rangle + \vec{R}$
3. Energiebalans:  $\int (\text{BTV}) m v^2 d\vec{v} \Rightarrow \frac{3}{2} \frac{dp}{dt} + \frac{5}{2} p \nabla \cdot \vec{w} + \nabla \cdot \vec{q} = Q$

Hierin is  $\langle \vec{a} \rangle = e/m(\vec{E} + \vec{w} \times \vec{B})$  de gemiddelde versnelling,  $\vec{q} = \frac{1}{2}nm\langle \vec{v}_t^2 \vec{v}_t \rangle$  de warmtestroom,  $Q = \int \frac{mv_t^2}{r} \left( \frac{\partial F}{\partial t} \right)_{\text{bs}} d\vec{v}$  de bronterm voor energieproductie,  $\vec{R}$  een wrijvingsterm en  $p = nkT$  de druk.

Een thermodynamische afleiding geeft voor de totale druk:  $p = nkT = \sum_i p_i - \frac{e^2(n_e + z_i n_i)}{24\pi\epsilon_0\lambda_D}$

Voor de stroomgeleiding in een plasma volgt uit de impulsbalans, als  $w_e \gg w_i$ :

$$\eta \vec{J} = \vec{E} - \frac{\vec{J} \times \vec{B} + \nabla p_e}{en_e}$$

Als in een plasma alleen elastische e-a botsingen van belang zijn is de evenwichtsenergieverdeling de *Druyvesteyn verdeling*:

$$N(E)dE = Cn_e \left( \frac{E}{E_0} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{3m_e}{m_0} \left( \frac{E}{E_0} \right)^2 \right] dE$$

met  $E_0 = eE\lambda_v = eE/n\sigma$ .

## 11.8 Botsings-stralings modellen

Deze modellen zijn 1e-moment vergelijkingen voor aangeslagen toestanden. Men gaat uit van de Quasi-steady-state solution waarbij  $\forall_{p>1} [(\partial n_p / \partial t = 0) \wedge (\nabla \cdot (n_p \vec{w}_p) = 0)]$ . Dit geeft de vergelijkingen

$$\left( \frac{\partial n_{p>1}}{\partial t} \right)_{\text{bs}} = 0, \quad \frac{\partial n_1}{\partial t} + \nabla \cdot (n_1 \vec{w}_1) = \left( \frac{\partial n_1}{\partial t} \right)_{\text{bs}}, \quad \frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \vec{w}_i) = \left( \frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_{\text{bs}}$$

met als oplossingen  $n_p = r_p^0 n_p^S + r_p^1 n_p^B = b_p n_p^S$ . Verder geldt voor niveaus die botsingsgedomineerd zijn dat  $\delta b_p := b_p - 1 = b_0 p_{\text{eff}}^{-x}$  met  $p_{\text{eff}} = \sqrt{Ry/E_{pi}}$  en  $5 \leq x \leq 6$ . Voor systemen in ESP, waar alleen botsings(de)excitatie tussen niveaus  $p$  en  $p \pm 1$  meegenomen wordt, geldt  $x = 6$ . Ook in plasma's ver van evenwicht zullen de aangeslagen toestanden uiteindelijk in de ESP toestand komen, zodat men vanaf een zeker niveau de toestandsdichtheden kan uitrekenen.

Om de toestandsdichtheden van de lagere niveaus in de stationaire toestand te berekenen dient men uit te gaan van een macroscopisch evenwicht:

Aantal bevolkende processen van niveau  $p =$  Aantal ontvolkende processen van niveau  $p$ ,

Uitgeschreven geeft dit:

$$\underbrace{n_e \sum_{q<p} n_q K_{qp}}_{\text{bots. excit.}} + \underbrace{n_e \sum_{q>p} n_q K_{qp}}_{\text{bots. deexcit.}} + \underbrace{\sum_{q>p} n_q A_{qp}}_{\text{stral. deexc. naar}} + \underbrace{n_e^2 n_i K_{+p}}_{\text{bots. recomb.}} + \underbrace{n_e n_i \alpha_{\text{rad}}}_{\text{stral. recomb}} =$$

$$\underbrace{n_e n_p \sum_{q<p} K_{pq}}_{\text{bots. deexcit.}} + \underbrace{n_e n_p \sum_{q>p} K_{pq}}_{\text{bots. excit.}} + \underbrace{n_p \sum_{q<p} A_{pq}}_{\text{stral. deexc. van}} + \underbrace{n_e n_p K_{p+}}_{\text{bots. ion.}}$$

## 11.9 Golven in plasma's

Interactie van EM-golven met een plasma resulteert in verstrooiing en absorptie van energie. Voor elektromagnetische golven met complex golfgetal  $k = \omega(n + i\kappa)/c$  vindt men in één dimensie:  $E_x = E_0 e^{-\kappa\omega x/c} \cos[\omega(t - nx/c)]$ . De brekingsindex  $n$  is gegeven door:

$$n = c \frac{k}{\omega} = \frac{c}{v_f} = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}$$

Voor verstoringen in de  $z$ -richting in een koud, homogeen, gemagnetiseerd plasma:  $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + \vec{B} e^{i(kz - \omega t)}$  en  $n = n_0 + \hat{n} e^{i(kz - \omega t)}$  (externe  $E$  velden zijn afgeschermd) volgt, met de definities  $\alpha = \omega_p / \omega$  en  $\beta = \Omega / \omega$  en  $\omega_p^2 = \omega_{pi}^2 + \omega_{pe}^2$ :

$$\vec{J} = \vec{\sigma} \vec{E}, \text{ met } \vec{\sigma} = i \varepsilon_0 \omega \sum_s \alpha_s^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{1 - \beta_s^2} & \frac{-i\beta_s}{1 - \beta_s^2} & 0 \\ \frac{i\beta_s}{1 - \beta_s^2} & \frac{1}{1 - \beta_s^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

waarin gesommeerd wordt over deeltjessoort  $s$ . De diëlektrische tensor  $\mathcal{E}$ , waarvoor geldt:

$$\vec{k} \cdot (\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{E}) = 0$$

wordt gegeven door  $\vec{\mathcal{E}} = \vec{I} - \vec{\sigma} / i \varepsilon_0 \omega$ .

Met de definities  $S = 1 - \sum_s \frac{\alpha_s^2}{1 - \beta_s^2}$ ,  $D = \sum_s \frac{\alpha_s^2 \beta_s}{1 - \beta_s^2}$ ,  $P = 1 - \sum_s \alpha_s^2$

volgt:

$$\vec{\mathcal{E}} = \begin{pmatrix} S & -iD & 0 \\ iD & S & 0 \\ 0 & 0 & P \end{pmatrix}$$

De eigenwaarden van deze hermitische matrix zijn  $R = S + D$ ,  $L = S - D$ ,  $\lambda_3 = P$ , bij eigenvectoren  $\vec{e}_r = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, i, 0)$ ,  $\vec{e}_l = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i, 0)$  en  $\vec{e}_3 = (0, 0, 1)$ .  $\vec{e}_r$  heeft te maken met een rechtsdraaiend veld waarvoor  $iE_x/E_y = 1$  en  $\vec{e}_l$  met een linksdraaiend veld waarvoor  $iE_x/E_y = -1$ . Wanneer  $\theta$  de hoek is die  $\vec{k}$  maakt met  $\vec{B}$  vindt men:

$$\tan^2(\theta) = \frac{P(n^2 - R)(n^2 - L)}{S(n^2 - RL/S)(n^2 - P)}$$

met  $n$  de brekingsindex. Hieruit volgen de oplossingen:

#### A. $\theta = 0$ : voortplanting in de $z$ -richting.

1.  $P = 0$ :  $E_x = E_y = 0$ . Dit beschrijft een longitudinale linear gepolariseerde golf.
2.  $n^2 = L$ : een linksdraaiende, circulair gepolariseerde golf.
3.  $n^2 = R$ : een rechtsdraaiende, circulair gepolariseerde golf.

#### B. $\theta = \pi/2$ : voortplanting $\perp$ het $B$ -veld.

1.  $n^2 = P$ : de gewone mode:  $E_x = E_y = 0$ . Dit is een transversale linear gepolariseerde golf.
2.  $n^2 = RL/S$ : de buitengewone mode:  $iE_x/E_y = -D/S$ , een elliptisch gepolariseerde golf.

*Resonantiefrequenties* zijn frequenties waarbij  $n^2 \rightarrow \infty$ , dus  $v_f = 0$ . Hiervoor geldt:  $\tan(\theta) = -P/S$ . Voor  $R \rightarrow \infty$  geeft dit de elektronencyclotronresonantiefrequentie  $\omega = \Omega_e$ , voor  $L \rightarrow \infty$  de ionencyclotronresonantiefrequentie  $\omega = \Omega_i$  en voor  $S = 0$  geldt voor de buitengewone mode:

$$\alpha^2 \left( 1 - \frac{m_i \Omega_i^2}{m_e \omega^2} \right) = \left( 1 - \frac{m_i^2 \Omega_i^2}{m_e^2 \omega^2} \right) \left( 1 - \frac{\Omega_i^2}{\omega^2} \right)$$

*Afsnijffrequenties* zijn frequenties waarbij  $n^2 = 0$ , dus  $v_f \rightarrow \infty$ . Hiervoor geldt:  $P = 0$  óf  $R = 0$  óf  $L = 0$ .

Voor het geval  $\beta^2 \gg 1$  vindt men Alfvén golven die zich  $\parallel$  aan de veldlijnen voortplanten. Met de Alfvén snelheid

$$v_A = \frac{\Omega_e \Omega_i}{\omega_{pe}^2 + \omega_{pi}^2} c^2$$

volgt:  $n = \sqrt{1 + c/v_A}$ , en voor  $v_A \ll c$ :  $\omega = kv_A$ .

# Hoofdstuk 12

## Vaste stoffysica

### 12.1 Kristalstructuur

Een rooster is gedefinieerd door de 3 translatievectoren  $\vec{a}_i$ , zo dat de atomaire samenstelling er in elke richting hetzelfde uitziet vanuit elk punt  $\vec{r}$  en  $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{T}$ , waarbij  $\vec{T}$  een translatievector is die gegeven wordt door:  $\vec{T} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$  met  $u_i \in \mathbb{N}$ . Een rooster kan helemaal opgebouwd worden uit primitieve cellen. Men kan als primitieve cel een parallellepipedum vormen, met volume

$$V_{\text{cel}} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$$

Omdat een rooster een periodieke structuur heeft, hebben de fysische eigenschappen die met dat rooster samenhangen deze periodiciteit ook. (Randeffecten worden verwaarloosd):

$$n_e(\vec{r} + \vec{T}) = n_e(\vec{r})$$

Deze periodiciteit leent zich voor Fourieranalyse:  $n(\vec{r})$  wordt ontwikkeld als:

$$n(\vec{r}) = \sum_G n_G \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r})$$

met

$$n_G = \frac{1}{V_{\text{cel}}} \iiint_{\text{cel}} n(\vec{r}) \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}) dV$$

$\vec{G}$  is de *reciproke roostervector*. Wanneer  $\vec{G}$  geschreven wordt als:  $\vec{G} = v_1\vec{b}_1 + v_2\vec{b}_2 + v_3\vec{b}_3$  met  $v_i \in \mathbb{N}$ , volgt voor de vectoren  $\vec{b}_i$ , cyclisch:

$$\vec{b}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_{i+1} \times \vec{a}_{i+2}}{\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_{i+1} \times \vec{a}_{i+2})}$$

De set van  $\vec{G}$ -vectoren bepaalt de Röntgendiffracties: een maximum in de teruggekaatste straling treedt op als:  $\Delta\vec{k} = \vec{G}$  met  $\Delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}'$ . Dus:  $2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2$ . Hieruit volgt voor parallelle roostervlakken (Bragg reflectie) dat voor de maxima geldt:  $2d \sin(\theta) = n\lambda$ .

De Brillouin zone is gedefinieerd als een Wigner-Seitz cel in het reciproke rooster.

### 12.2 Bindingen

Er worden 4 soorten bindingen onderscheiden:

1. Van der Waals bindingen
2. Ionbindingen
3. Covalente of homopolaire bindingen
4. Metaalbindingen.

Bij de ionbinding van NaCl berekent men de energie per molecuuleenheid via:

$$E = \text{cohesieenergie(NaCl)} - \text{ionisatieenergie(Na)} + \text{elektronenaffiniteit(Cl)}$$

Bij de covalente binding is de wisselwerking afhankelijk van de relatieve spinorientaties van de bindingselektronen: De potentiële energie voor 2 gelijkgerichte spins is hoger dan de potentiële energie voor 2 niet gelijkgerichte spins. Verder vertoont de potentiële energie bij 2 gelijkgerichte spins soms geen minimum. Binding is dan dus niet mogelijk.

## 12.3 Roostertrillingen

### 12.3.1 Rooster met één soort atomen

Bij deze beschouwing van roostertrillingen wordt uitgegaan van de benadering dat een atoom alleen met zijn naaste burens wisselwerking heeft. De kracht op atoom  $s$  met massa  $M$  is dan te schrijven als:

$$F_s = M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s)$$

Uitgaande van oplossingen met alle dezelfde tijdafhankelijkheid  $\exp(-i\omega t)$  geeft dit:

$$-M\omega^2 u_s = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s)$$

Vervolgens wordt gepostuleerd:  $u_{s\pm 1} = u \exp(isKa) \exp(\pm iKa)$ .

Dit geeft:  $u_s = \exp(iKsa)$ . Invullen van de laatste twee relaties in de eerste levert een lineair stelsel vergelijkingen op, waarvan de determinant 0 gesteld wordt. Dit resulteert in:

$$\omega^2 = \frac{4C}{M} \sin^2\left(\frac{1}{2}Ka\right)$$

Alleen roostertrillingen met een golflengte die in de eerste Brillouin Zone past hebben een fysische betekenis. Dit betekent dat  $-\pi < Ka \leq \pi$ .

De groepsnelheid van deze roostertrillingen wordt gegeven door:

$$v_g = \frac{d\omega}{dK} = \sqrt{\frac{Ca^2}{M}} \cos\left(\frac{1}{2}Ka\right).$$

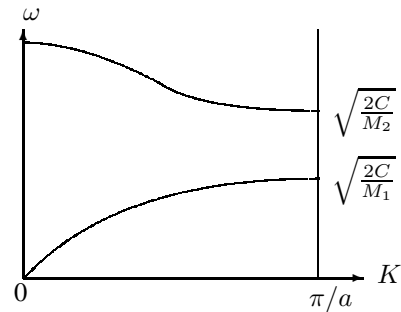
en is dus 0 op de rand van een Brillouin Zone. De golf is hier staand.

### 12.3.2 Rooster met twee soorten atomen

Nu zijn de oplossingen:

$$\omega^2 = C \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm C \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(Ka)}{M_1 M_2}}$$

Bij elke waarde van  $K$  horen nu twee  $\omega$ -waarden, zoals te zien is in de grafiek. De bovenste tak heet de optische, de onderste de akoustische. Bij de optische mode trillen beide soorten ionen in tegenfase, bij de akoustische in fase. Hierdoor hebben de optische trillingen een veel groter geïnduceerd dipoolmoment, en dus ook een sterkere emissie en absorptie van straling. Bovendien heeft elke mode nog 3 polarisatierichtingen, een longitudinale en twee transversale.



### 12.3.3 Fononen

De quantummechanische aanslag van een roostertrilling met een energie  $\hbar\omega$  heet een *fonon*. Fononen kan men als quasiedeeltjes beschouwen: ze gedragen zich bij botsingen als deeltjes met impuls  $\hbar K$ . Men kan ze een impuls toekennen, maar hun totale impuls blijkt 0 te zijn. Hun impuls hoeft bij onderlinge botsingen niet behouden te zijn: Normaal proces:  $K_1 + K_2 = K_3$ , Umklapp proces:  $K_1 + K_2 = K_3 + G$ . Omdat fononen geen spin hebben gedragen ze zich als bosonen.

### 12.3.4 Soortelijke warmte

De totale energie van de roostertrillingen kan men berekenen door elke mode met de bijbehorende energie te vermenigvuldigen en te sommeren over alle modes  $K$  en polarisaties  $P$ :

$$U = \sum_K \sum_P \hbar\omega \langle n_{k,p} \rangle = \sum_\lambda \int D_\lambda(\omega) \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} d\omega$$

bij een gegeven polarisatie  $\lambda$ . De soortelijke warmte is dan:

$$C_{\text{rooster}} = \frac{\partial U}{\partial T} = k \sum_\lambda \int D(\omega) \frac{(\hbar\omega/kT)^2 \exp(\hbar\omega/kT)}{(\exp(\hbar\omega/kT) - 1)^2} d\omega$$

In 1 dimensie wordt de dispersierelatie gegeven door:

$$D(\omega)d\omega = \frac{L}{\pi} \frac{dK}{d\omega} d\omega = \frac{L}{\pi} \frac{d\omega}{v_g}$$

In drie dimensies worden de periodieke randvoorwaarden toegepast op een kubus met  $N^3$  primitieve cellen en volume  $L^3$ :  $\exp(i(K_x x + K_y y + K_z z)) \equiv \exp(i(K_x(x+L) + K_y(y+L) + K_z(z+L)))$ .

Omdat  $\exp(2\pi i) = 1$  kan dit alleen als:

$$K_x, K_y, K_z = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \pm \frac{6\pi}{L}; \dots \pm \frac{2N\pi}{L}$$

Er is dus één toegestane waarde van  $\vec{K}$  per volume  $(2\pi/L)^3$  in de  $K$ -ruimte, ofwel:

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{V}{8\pi^3}$$

toegestane  $\vec{K}$ -waarden per eenheidsvolume in de  $\vec{K}$ -ruimte, voor elke polarisatie en elke tak. Het totale aantal toestanden met een golfvector  $< K$  is:

$$N = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi K^3}{3}$$

voor elke polarisatierichting. De toestandsdichtheid voor elke polarisatierichting is volgens Einstein:

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \left(\frac{VK^2}{2\pi^2}\right) \frac{dK}{d\omega} = \frac{V}{8\pi^3} \iint \frac{dA_\omega}{v_g}$$

Het *Debye model* voor de soortelijke warmte is een lage-temperatuur benadering die tot  $\approx 50\text{K}$  goed opgaat. Men beschouwt hier alleen de akoustische fononen (3 polarisatierichtingen), en neemt aan dat  $v = \omega K$ , onafhankelijk van de polarisatierichting. Hieruit volgt:  $D(\omega) = V\omega^2/2\pi^2 v^3$ , waarin  $v$  de geluidssnelheid is. Dit geeft:

$$U = 3 \int D(\omega) \langle n \rangle \hbar\omega d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} d\omega = \frac{3Vk^2 T^4}{2\pi^2 v^3 \hbar^3} \int_0^{x_D} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Hierin is  $x_D = \hbar\omega_D/kT = \theta_D/T$ .  $\theta_D$  is de *Debye temperatuur* en wordt gegeven door:

$$\theta_D = \frac{\hbar v}{k} \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}$$

waarin  $N$  het aantal primitieve cellen is. Hieruit volgt, omdat  $x_D \rightarrow \infty$  voor  $T \rightarrow 0$ :

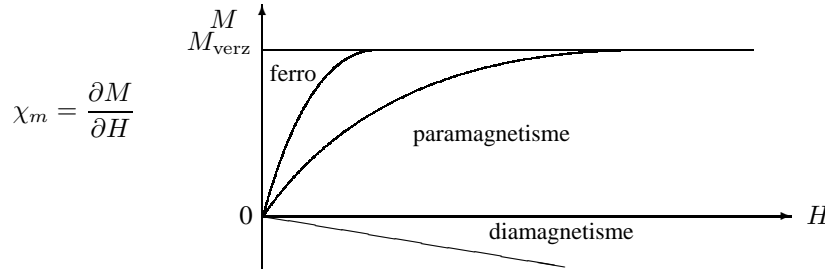
$$U = 9NkT \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{3\pi^4 NkT^4}{5\theta_D} \sim T^4 \quad \text{en} \quad C_V = \frac{12\pi^4 NkT^3}{5\theta_D^3} \sim T^3$$

In het Einstein model van de soortelijke warmte kijkt men juist naar fononen bij één frequentie, een benadering voor de optische fononen.



## 12.4 Magnetisch veld in een vaste stof

De volgende grafiek geeft de magnetisatie versus veldsterkte voor verschillende typen magnetisme:



### 12.4.1 Diamagnetisme

Quantummechanisch gezien wordt diamagnetisme veroorzaakt door de Larmorprecessie van de elektronspin. Uitgaande van een cirkelvormige elektronenbaan om een atoom met twee elektronen, werkt er een Coulombkracht  $F_c$  en een magnetische kracht op ieder elektron. Als het magnetisch deel van de kracht niet sterk genoeg is om de baan significant te vervormen geldt:

$$\omega^2 = \frac{F_c(r)}{mr} \pm \frac{eB}{m}\omega = \omega_0^2 \pm \frac{eB}{m}(\omega_0 + \delta) \Rightarrow \omega = \sqrt{\left(\omega_0 \pm \frac{eB}{2m}\right)^2 + \dots} \approx \omega_0 \pm \frac{eB}{2m} = \omega_0 \pm \omega_L$$

Hierin is  $\omega_L$  de *Larmorfrequentie*. Één elektron wordt versneld, het andere vertraagd. Er gaat een netto kringstroom lopen, die het atoom een magnetisch moment  $\vec{\mu}$  geeft. Deze kringstroom wordt gegeven door:  $I = -Ze\omega_L/2\pi$ , en  $\langle \mu \rangle = IA = I\pi \langle \rho^2 \rangle = \frac{2}{3}I\pi \langle r^2 \rangle$ . Als  $N$  het aantal atomen is dat in het kristal voorkomt volgt voor de susceptibiliteit, met  $\vec{M} = \vec{\mu}N$ :

$$\chi = \frac{\mu_0 M}{B} = -\frac{\mu_0 N Z e^2}{6m} \langle r^2 \rangle$$

### 12.4.2 Paramagnetisme

Uitgaande van de opsplitsing van energieniveaus onder een zwak veld:  $\Delta U_m - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = m_J g \mu_B B$ , en van een verdelingsfunctie  $f_m \sim \exp(-\Delta U_m/kT)$ , vindt men voor het gemiddelde magnetische moment  $\langle \mu \rangle = \sum f_m \mu / \sum f_m$ . Na linearisatie, en omdat  $\sum m_J = 0$ ,  $\sum J = 2J + 1$  en  $\sum m_J^2 = \frac{2}{3}J(J+1)(J+\frac{1}{2})$  kan men schrijven:

$$\chi_p = \frac{\mu_0 M}{B} = \frac{\mu_0 N \langle \mu \rangle}{B} = \frac{\mu_0 J(J+1)g^2 \mu_B^2 N}{3kT}$$

Hiermee is de *wet van Curie*,  $\chi_p \sim 1/T$  afgeleid.

### 12.4.3 Ferromagnetisme

Een ferromagneet vertoont boven de kritische temperatuur  $T_c$  paramagnetisch gedrag. Om het ferromagnetisme te beschrijven wordt een veld  $B_E$  evenredig aan  $M$  gepostuleerd:  $\vec{B}_E = \lambda \mu_0 \vec{M}$ . De behandeling is nu verder analoog aan het paramagnetisme:

$$\mu_0 M = \chi_p (B_a + B_E) = \chi_p (B_a + \lambda \mu_0 M) = \mu_0 \left(1 - \lambda \frac{C}{T}\right) M$$

Hieruit volgt voor een ferromagneet:  $\chi_F = \frac{\mu_0 M}{B_a} = \frac{C}{T - T_c}$  de wet van *Weiss-Curie*.

Wanneer  $B_E$  op deze manier wordt geschat, geeft dit waarden rond de 1000 T. Dit is een onrealistische waarde, en suggereert dat er iets anders aan de hand is. Een quantummechanische behandeling (Heisenberg) postuleert een wisselwerking tussen 2 naburige atomen:  $U = -2J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \equiv -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_E$ .  $J$  is hier een overlappingsintegraal die gegeven wordt door:  $J = 3kT_c/2zS(S+1)$ , met  $z$  het aantal buren. Er zijn nu 2 gevallen te onderscheiden:

1.  $J > 0$ :  $S_i$  en  $S_j$  gaan parallel staan: de stof is een ferromagneet.
2.  $J < 0$ :  $S_i$  en  $S_j$  gaan antiparallel staan: de stof is een antiferromagneet.

De theorie van Heisenberg voorspelt het bestaan van spingolven: magnonen. Uitgaande van een model waarin alleen de naaste burens wisselwerking met elkaar vertonen kan men schrijven:

$$U = -2J\vec{S}_p \cdot (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1}) \approx \vec{\mu}_p \cdot \vec{B}_p \quad \text{met} \quad \vec{B}_p = \frac{-2J}{g\mu_B}(\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1})$$

Nu is de bewegingsvergelijking voor de magnonen:  $\frac{d\vec{S}}{dt} = \frac{2J}{\hbar}\vec{S}_p \times (\vec{S}_{p-1} + \vec{S}_{p+1})$

De oplossing gaat nu analoog aan de behandeling van fononen: postuleer lopende golven van het type  $\vec{S}_p = \vec{u} \exp(i(pka - \omega t))$ . Dit geeft een lineair stelsel vergelijkingen met oplossing:

$$\hbar\omega = 4JS(1 - \cos(ka))$$

## 12.5 Het vrije-elektronen Fermi gas

### 12.5.1 Soortelijke warmte

De periodieke oplossing met periode  $L$  van de Schrödingervergelijking in 1 dimensie is:  $\psi_n(x) = A \sin(2\pi x/\lambda_n)$  met  $n\lambda_n = 2L$ . Hieruit volgt

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2$$

In een lineair rooster zijn alleen de quantumgetallen  $n$  en  $m_s$  van belang. Het *Fermi niveau* is het bovenste gevulde niveau in de grondtoestand, met als energie de *Fermi-energie*  $E_F$ . Als  $n_F$  het quantumgetal van het Fermi niveau is, kan men hiervoor schrijven:  $2n_F = N$  dus  $E_F = \hbar^2\pi^2 N^2/8mL$ . In drie dimensies geldt:

$$k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad \text{en} \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$$

Hieruit volgt voor het aantal toestanden met energie  $\leq E$ :  $N = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2}$ .

en voor de toestandsdichtheid:  $D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} = \frac{3N}{2E}$ .

De warmtecapaciteit van het elektronengas is ongeveer 0,01 maal de klassiek verwachte waarde van  $\frac{3}{2}Nk$ . Dit komt door het Pauli principe en de Fermi-Dirac verdeling: alleen de elektronen in een afstand rond  $kT$  van het Fermi niveau zijn thermisch geëxciteerd. Er is dan een fractie  $\approx T/T_F$  thermisch aangeslagen. Dit geeft voor de inwendige energie:

$$U \approx NkT \frac{T}{T_F} \quad \text{en} \quad C = \frac{\partial U}{\partial T} \approx Nk \frac{T}{T_F}$$

Een nauwkeuriger analyse geeft:  $C_{\text{elektronen}} = \frac{1}{2}\pi^2 NkT/T_F \sim T$ . Samen met de  $T^3$  afhankelijkheid van de soortelijke warmte van de fononen is de totale soortelijke warmte van metalen:  $C = \gamma T + AT^3$ .

### 12.5.2 Elektrische geleiding

De bewegingsvergelijking van de ladingsdragers is:  $\vec{F} = m d\vec{v}/dt = \hbar d\vec{k}/dt$ . De variatie van  $\vec{k}$  wordt gegeven door  $\delta\vec{k} = \vec{k}(t) - \vec{k}(0) = -e\vec{E}t/\hbar$ . Als de karakteristieke tijd dat de elektronen botsen gelijk is aan  $\tau$  blijft  $\delta\vec{k}$  stabiel als  $t = \tau$ . Dan geldt:  $\langle \vec{v} \rangle = \mu \vec{E}$ , met  $\mu = e\tau/m$  de *beweeglijkheid* van de elektronen.

De stroom in een geleider wordt gegeven door:  $\vec{J} = nq\vec{v} = \sigma \vec{E} = \vec{E}/\rho = ne\mu \vec{E}$ . Omdat voor de botsingstijd geldt:  $1/\tau = 1/\tau_L + 1/\tau_i$ , waarin  $\tau_L$  de botsingstijd aan het zuivere rooster is en  $\tau_i$  de botsingstijd aan de onzuiverheden, geldt voor de soortelijke weerstand  $\rho = \rho_L + \rho_i$ , met  $\lim_{T \rightarrow 0} \rho_L = 0$ .

### 12.5.3 Het Hall-effect

Als er een magnetisch veld aangelegd wordt  $\perp$  op de stroomrichting zullen de ladingsdragers opzij geduwd worden door de Lorentzkracht. Dit geeft een elektrisch veld  $\perp$  de stroomrichting. Als  $\vec{J} = J\vec{e}_x$  en  $\vec{B} = B\vec{e}_z$  dan is  $E_y/E_x = \mu B$ . De Hallconstante wordt gedefinieerd als:  $R_H = E_y/J_x B$ ,  $R_H = -1/ne$  als  $J_x = ne\mu E_x$ . De Hallspanning wordt gegeven door:  $V_H = Bvb = IB/neh$  waarin  $b$  de breedte van het materiaal is en  $h$  de hoogte.

### 12.5.4 Thermische geleiding

Uit  $\kappa = \frac{1}{3}C\langle v \rangle \ell$ , met  $\ell = v_F\tau$  de vrije weglengte van de elektronen, volgt:  $\kappa_{\text{elektronen}} = \pi^2 nk^2 T\tau/3m$ . Hieruit volgt de *Wiedemann-Franz* verhouding:  $\kappa/\sigma = \frac{1}{3}(\pi k/e)^2 T$ .

## 12.6 Energiebanden

In de *tight-binding* benadering Stelt men  $\psi = e^{ikna}\phi(x - na)$ . Hieruit volgt voor de energie:  $\langle E \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle = E_{\text{at}} - \alpha - 2\beta \cos(ka)$ . Dit geeft dus een cosinus gesuperponeerd op de atomaire energie, die vaak te benaderen is met een harmonische oscillator. Als men aanneemt dat het elektron bijna vrij is kan men stellen:  $\psi = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ . Dit is een lopende golf. Deze is te ontbinden in twee staande golven:

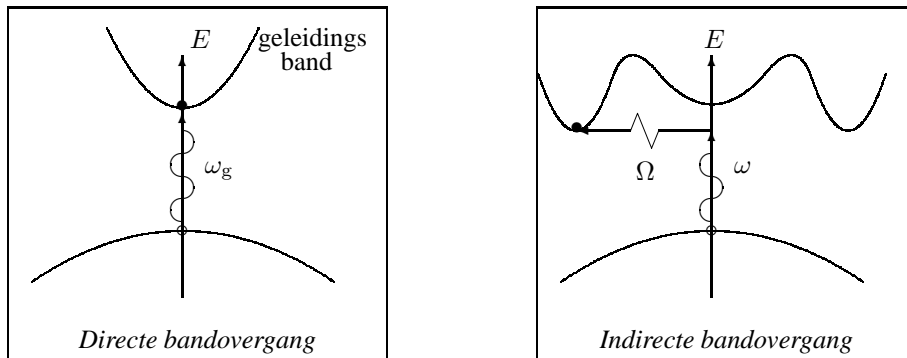
$$\begin{aligned} \psi(+) &= \exp(i\pi x/a) + \exp(-i\pi x/a) = 2 \cos(\pi x/a) \\ \psi(-) &= \exp(i\pi x/a) - \exp(-i\pi x/a) = 2i \sin(\pi x/a) \end{aligned}$$

De waarschijnlijkheidsdichtheid  $|\psi(+)|^2$  is hoog bij de atomen van het rooster en laag daar tussenin. De waarschijnlijkheidsdichtheid  $|\psi(-)|^2$  is juist laag op de atomen en hoog daar tussenin. De energie van  $\psi(+)$  is dus ook lager dan de energie van  $\psi(-)$ . Stel  $U(x) = U \cos(2\pi x/a)$ , dan volgt voor de bandafstand:

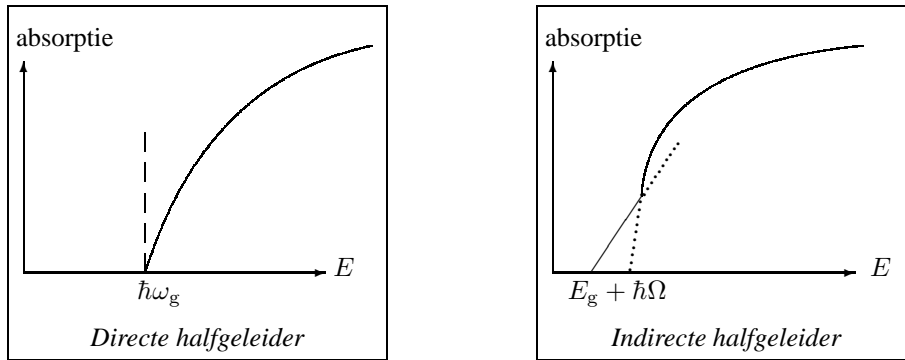
$$E_{\text{gap}} = \int_0^1 U(x) [|\psi(+)|^2 - |\psi(-)|^2] dx = U$$

## 12.7 Halfgeleiders

De bandstructuren en overgangen hiertussen van directe en indirecte halfgeleiders zijn aangegeven in de onderstaande figuren. Hierbij is aangenomen dat de impuls van het invallende foton te verwaarlozen is. Bij een indirecte halfgeleider is een overgang tussen de valentie- en geleidingsband ook al mogelijk als de energie van het invallend foton kleiner is dan de bandafstand: er wordt dan tevens een fonon opgenomen.



Dit verschil is ook te zien in de absorptiespectra:



Indirecte halfgeleiders, zoals Si en Ge, kunnen dus geen licht uitzenden, zodat ze ongeschikt zijn voor de fabricage van lasers. Bij de absorptie van licht geldt:  $k_h = -\vec{k}_e$ ,  $E_h(k_h) = -E_e(\vec{k}_e)$ ,  $\vec{v}_h = \vec{v}_e$  en  $m_h = -m_e^*$  als de geleidingsband en de valentieband gelijkvormig zijn.

In plaats van de normale massa van het elektron moet men in een rooster de *effectieve massa* gebruiken. Deze is gedefinieerd als:

$$m^* = \frac{F}{a} = \frac{dp/dt}{dv_g/dt} = \hbar \frac{dK}{dv_g} = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

met  $E = \hbar\omega$  en  $v_g = d\omega/dk$  en  $p = \hbar k$ .

Met de verdelingsfunctie  $f_e(E) \approx \exp((\mu - E)/kT)$  voor de elektronen en  $f_h(E) = 1 - f_e(E)$  voor de gaten wordt de toestandsdichtheid gegeven door:

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c}$$

met  $E_c$  de energie aan de rand van de geleidingsband. Hieruit volgt voor de concentraties gaten  $p$  en elektronen  $n$ :

$$n = \int_{E_c}^{\infty} D_e(E) f_e(E) dE = 2 \left( \frac{m^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_c}{kT}\right)$$

Voor het product  $np$  volgt nu:  $np = 4 \left( \frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right)^3 \sqrt{m_e^* m_h} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right)$

In een intrinsieke (niet verontreinigde) halfgeleider geldt:  $n_i = p_i$ , in een  $n$ -type geldt:  $n > p$  en in een  $p$ -type geldt:  $n < p$ .

Een exciton is een gebonden elektron-gat paar, die om elkaar draaien als in positronium. Omdat de energie van een exciton lager is dan die van een vrij elektron en een vrij gat, is de aanslagenergie van een elektron uit de valentieband tot een exciton kleiner dan de bandafstand. Dit veroorzaakt een piek in de absorptie karakteristiek net vóór  $E_g$ .

## 12.8 Supergeleiders

### 12.8.1 Beschrijving

Een supergeleider wordt gekenmerkt door het 0 worden van de elektrische weerstand als bepaalde grootheden kleiner zijn dan een zekere kritische waarde:  $T < T_c$ ,  $I < I_c$  en  $H < H_c$ . Door het *BCS-model* wordt voor de sprongtemperatuur  $T_c$  voorspeld:

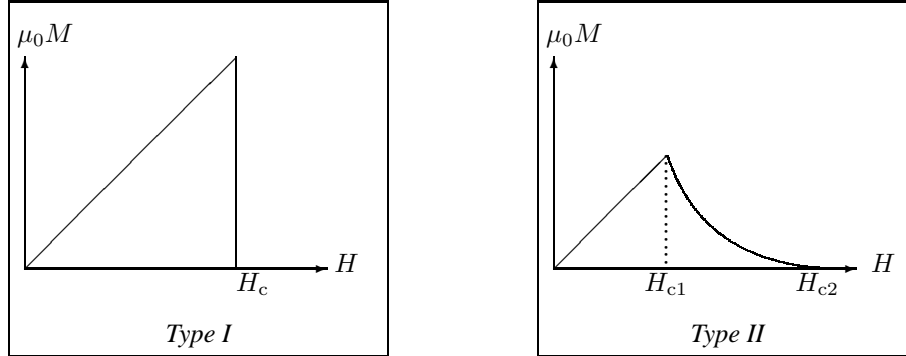
$$T_c = 1,14\Theta_D \exp\left(\frac{-1}{UD(E_F)}\right)$$

Terwijl men uit experimenten voor  $H_c$  bij benadering vindt:

$$H_c(T) \approx H_c(T_c) \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2}\right).$$

Binnen een supergeleider is het magnetisch veld 0: het *Meissner effect*.

Er zijn type I en type II supergeleiders. Omdat het Meissner effect impliceert dat een supergeleider een perfecte diamagneet is moet in de supergeleidende toestand gelden:  $\vec{H} = \mu_0 \vec{M}$ . Bij een type I supergeleider geldt dit inderdaad, bij een type II supergeleider geldt dit slechts tot een waarde  $H_{c1}$ , daarna bevindt de supergeleider zich in een *vortex toestand* tot een waarde  $H_{c2}$ , die wel 100 maal zo groot kan zijn als  $H_{c1}$ . Als het magnetisch veld nog groter wordt dan  $H_{c2}$  gedraagt de supergeleider zich als een normale geleider: zie de onderstaande figuren.



De overgang naar een supergeleidende toestand is thermodynamisch een fase-overgang van de tweede orde. Dit betekent dat er in het  $T - S$  diagram een knik zit en in het  $C_X - T$  diagram een sprong.

### 12.8.2 Het Josephson effect

Bij het Josephson effect beschouwt men twee supergeleiders, gescheiden door een isolator. In de ene supergeleider is de elektronengolf functie  $\psi_1$ , in de andere  $\psi_2$ . De Schrödingervergelijkingen in beide supergeleiders wordt identiek gesteld:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \hbar T \psi_2, \quad i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \hbar T \psi_1$$

$\hbar T$  is het effect van de koppeling van de elektronen, of de transferwisselwerking door de isolator. De elektronengolf functies worden geschreven als  $\psi_1 = \sqrt{n_1} \exp(i\theta_1)$  en  $\psi_2 = \sqrt{n_2} \exp(i\theta_2)$ . Omdat een Cooperpaar uit twee elektronen bestaat, geldt  $\psi \sim \sqrt{n}$ . Hieruit volgt, als  $n_1 \approx n_2$ :

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} = \frac{\partial \theta_2}{\partial t} \quad \text{en} \quad \frac{\partial n_2}{\partial t} = -\frac{\partial n_1}{\partial t}$$

De stroomdichtheid door de isolator wordt nu gegeven door  $J = J_0 \sin(\theta_2 - \theta_1) = J_0 \sin(\delta)$ , waarin  $J_0 \sim T$ . Het Josephson effect geeft dus een stroomdichtheid die van het faseverschil afhankelijk is. Wanneer men een AC-spanning over de junctie zet worden de Schrödingervergelijkingen:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \hbar T \psi_2 - eV \psi_1 \quad \text{en} \quad i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \hbar T \psi_1 + eV \psi_2$$

Dit geeft:  $J = J_0 \sin\left(\theta_2 - \theta_1 - \frac{2eVt}{\hbar}\right)$ .

Er is nu dus een oscillatie met  $\omega = 2eV/\hbar$ .

### 12.8.3 Fluxquantisatie in een supergeleidende ring

Voor de stroomdichtheid geldt in het algemeen:  $\vec{J} = q\psi^* \vec{v}\psi = \frac{nq}{m} [\hbar \vec{\nabla}\theta - q\vec{A}]$

Uit het Meissnereffect:  $\vec{B} = 0$  en  $\vec{J} = 0$  volgt:  $\hbar \vec{\nabla}\theta = q\vec{A} \Rightarrow \oint \vec{\nabla}\theta dl = \theta_2 - \theta_1 = 2\pi s$  met  $s \in \mathbb{N}$ . Omdat:  $\oint \vec{A} dl = \iint (\text{rot} \vec{A}, \vec{n}) d\sigma = \iint (\vec{B}, \vec{n}) d\sigma = \Psi$  volgt:  $\Psi = 2\pi \hbar s / q$ . De grootte van een fluxquantum volgt door  $s = 1$  te stellen:  $\Psi = 2\pi \hbar / e = 2,0678 \cdot 10^{-15} \text{ Tm}^2$ .

### 12.8.4 Macroscopische quantuminterferentie

Uit  $\theta_2 - \theta_1 = 2e\Psi/\hbar$  volgt voor twee parallelle juncties:  $\delta_b - \delta_a = \frac{2e\Psi}{\hbar}$ , dus

$$J = J_a + J_b = 2J_0 \sin\left(\delta_0 \cos\left(\frac{e\Psi}{\hbar}\right)\right) \text{ Dit geeft maxima als } e\Psi/\hbar = s\pi.$$

### 12.8.5 De London vergelijking

Men postuleert dat de stroomsterkte in een supergeleider evenredig is met de vectorpotentiaal  $\vec{A}$ :

$$\vec{J} = \frac{-\vec{A}}{\mu_0 \lambda_L^2} \text{ of } \text{rot} \vec{J} = \frac{-\vec{B}}{\mu_0 \lambda_L^2}$$

waarin  $\lambda_L = \sqrt{\varepsilon_0 m c^2 / n q^2}$ . Hieruit volgt:  $\nabla^2 \vec{B} = \vec{B} / \lambda_L^2$ .

Het Meissner effect volgt uit de oplossing van deze vergelijking:  $\vec{B}(x) = B_0 \exp(-x/\lambda_L)$ . Magnetische velden in een supergeleider vallen exponentieel af.

### 12.8.6 Het BCS-model

Het BCS-model slaagt erin om supergeleiding bij metalen te verklaren. (Een verklaring voor hoge- $T_c$  supergeleiders bestaat nog niet).

Men gaat uit van een nieuwe grondtoestand, waarin de elektronen zich als onafhankelijke fermionen gedragen. Vanwege de wisselwerking met het kristalrooster hebben deze pseudo-deeltjes een kleine onderlinge aantrekking. Dit leidt tot een grondtoestand waarin elektronen met een tegengestelde spin combineren tot een *Cooper-paar*. Van deze grondtoestand is aan te tonen dat ze perfect diamagnetisch is.

Het oneindige geleidingsvermogen is wat moeilijker te verklaren, omdat een ring met een persisterende stroom geen echte evenwichtstoestand is: een toestand met stroom 0 heeft een lagere energie. De reden waarom er geen overgangen zijn naar deze toestand is de fluxquantisatie. Het bestaan van dit fluxquantum houdt verband met het bestaan van een macroscopisch coherente veel-deeltjes golf functie. Een fluxquantum komt overeen met ongeveer  $10^4$  elektronen. Als de flux met één fluxquantum wil veranderen, dan moet er dus óf een gelijktijdige overgang van vele elektronen plaatshebben, wat zeer onwaarschijnlijk is, óf door tussentoestanden heengaan, waarin de flux niet gequantiseerd is, en die dus een hogere energie hebben, ook dit is onwaarschijnlijk.

Tenslotte nog enkele nuttige wiskundige relaties:

$$\int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^{ax} + 1} = \frac{\pi^2}{12a^2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 dx}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{3}, \quad \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x + 1} = \frac{\pi^4}{15}$$

En, onder de aanname dat  $\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n = \frac{1}{2}$  volgt:  $\int_0^{\infty} \sin(px) dx = \int_0^{\infty} \cos(px) dx = \frac{1}{p}$ .

# Hoofdstuk 13

## Groepentheorie

### 13.1 Het begrip groep

#### 13.1.1 Definitie van een groep

$\mathcal{G}$  is een groep voor de operatie  $\bullet$  als:

1.  $\forall A, B \in \mathcal{G} \Rightarrow A \bullet B \in \mathcal{G}$ :  $\mathcal{G}$  is *gesloten*.
2.  $\forall A, B, C \in \mathcal{G} \Rightarrow (A \bullet B) \bullet C = A \bullet (B \bullet C)$ :  $\mathcal{G}$  is *associatief*.
3.  $\exists E \in \mathcal{G}$  z.d.d.  $\forall A \in \mathcal{G} A \bullet E = E \bullet A = A$ :  $\mathcal{G}$  bevat een *eenheidselement*.
4.  $\forall A \in \mathcal{G} \exists A^{-1} \in \mathcal{G}$  z.d.d.  $A \bullet A^{-1} = E$ : Elk element uit  $\mathcal{G}$  heeft een *inverse*.

Als er tevens geldt:

5.  $\forall A, B \in \mathcal{G} \Rightarrow A \bullet B = B \bullet A$  is de groep *Abels* of *commutatief*.

#### 13.1.2 Het herordeningstheorema

In een vermenigvuldigingstabel komt elk element maar één maal voor in elke rij en kolom. Want  $EA_i = A_k^{-1}(A_k A_i) = A_i$ , dus elke  $A_i$  komt voor. Omdat er bij  $h$  groeps-elementen maar  $h$  plaatsen zijn in elke rij en kolom, komt elk element maar één maal voor.

#### 13.1.3 Geconjugeerde elementen, subgroepen en klassen

$B$  is *geconjugerd* aan  $A$  als  $\exists X \in \mathcal{G}$  z.d.d.  $B = XAX^{-1}$ . Dan is  $A$  ook geconjugerd aan  $B$ :  $B = (X^{-1})A(X^{-1})^{-1}$ .

Als  $B$  en  $C$  geconjugerd zijn aan  $A$  is  $B$  ook geconjugerd aan  $C$ .

Een *subgroep* is een deelverzameling van  $\mathcal{G}$  die, bij dezelfde operatie, ook een groep is.

Een verzameling van zoveel mogelijk geconjugeerde elementen is een *klasse*. De gehele groep is op te delen in klassen. Enkele stellingen:

- De doorsnede van twee klassen is leeg.
- $E$  is een klasse op zichzelf: voor elk ander element in deze klasse zou gelden:  
 $A = XEX^{-1} = E$ .
- $E$  is de enige klasse die ook een subgroep is, want alle andere klassen hebben geen eenheidselement.
- In een Abelse groep is elk element een klasse op zichzelf.

De fysische interpretatie van klassen: groeps-elementen zijn meestal symmetrieoperaties die een symmetrisch object met zichzelf in dekking brengen. Elementen uit een klasse zijn dan hetzelfde soort operaties. Omgekeerd geldt dit niet.

### 13.1.4 Isomorfie en homomorfie; representaties

Twee groepen zijn *isomorf* als ze dezelfde vermenigvuldigingstabel hebben. De afbeelding van de groep  $\mathcal{G}_1$  op  $\mathcal{G}_2$ , z.d.d. de vermenigvuldigingstabellen gehandhaafd blijven, is een homomorfe afbeelding. Deze is niet noodzakelijk isomorf.

Een *representatie* is een homomorfe afbeelding van een groep op een groep van vierkante matrices, met de gewone matrixvermenigvuldiging als combinerende operatie. Het symbool hiervoor is  $\Gamma$ . Er geldt:

$$\Gamma(E) = \mathbb{I} \quad , \quad \Gamma(AB) = \Gamma(A)\Gamma(B) \quad , \quad \Gamma(A^{-1}) = [\Gamma(A)]^{-1}$$

In principe zijn er bij elke groep drie mogelijkheden voor een representatie:

1. Een *getrouwe* representatie: alle matrices zijn verschillend.
2. De representatie  $A \rightarrow \det(\Gamma(A))$ .
3. De identieke representatie:  $A \rightarrow 1$ .

Een *equivalente representatie* wordt verkregen door een unitaire basistransformatie (gelijkvormigheidstransformatie):  $\Gamma'(A) = S^{-1}\Gamma(A)S$ .

### 13.1.5 Reducibele en irreducibele representaties

Als men via *dezelfde* basistransformatie alle matrices van een representatie  $\Gamma$  in dezelfde blokvorm kan brengen, is de representatie *reducibel*:

$$\Gamma(A) = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(A) & 0 \\ 0 & \Gamma^{(2)}(A) \end{pmatrix}$$

Dit wordt geschreven als:  $\Gamma = \Gamma^{(1)} \oplus \Gamma^{(2)}$ . Als dit niet kan heet de representatie *irreducibel*.

Het aantal irreducibele representaties is gelijk aan het aantal klassen.

## 13.2 Het orthogonaliteitstheorema

### 13.2.1 Het lemma van Schur

**Lemma** Elke matrix die commuteert met alle matrices van een irreducibele representatie is een constante  $\times \mathbb{I}$ , waarin  $\mathbb{I}$  de eenheidsmatrix is. Omgekeerd geldt dit (uiteraard) ook.

**Lemma** Indien er een matrix  $M$  bestaat, z.d.d. voor twee irreducibele representaties van groep  $\mathcal{G}$ ,  $\gamma^{(1)}(A_i)$  en  $\gamma^{(2)}(A_i)$ , geldt:  $M\gamma^{(1)}(A_i) = \gamma^{(2)}(A_i)M$ , zijn de representaties equivalent, of  $M = \underline{0}$ .

### 13.2.2 Het orthogonaliteitstheorema

Voor een verzameling van inequivalente, irreducibele, unitaire representaties geldt, als  $h$  het aantal elementen in de groep is, en  $\ell_i$  de dimensie van de  $i^{\text{e}}$  representatie:

$$\boxed{\sum_{R \in \mathcal{G}} \Gamma_{\mu\nu}^{(i)*}(R) \Gamma_{\alpha\beta}^{(j)}(R) = \frac{h}{\ell_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta}}$$



### 13.2.3 Karakter

Het karakter van een representatie wordt gegeven door het spoor van de matrix, en is dus invariant onder basistransformaties:  $\chi^{(j)}(R) = \text{Tr}(\Gamma^{(j)}(R))$

Tevens geldt, met  $N_k$  het aantal elementen in een klasse:  $\sum_k \chi^{(i)*}(C_k)\chi^{(j)}(C_k)N_k = h\delta_{ij}$

**Stelling:**  $\sum_{i=1}^n \ell_i^2 = h$

## 13.3 De relatie met de quantummechanica

### 13.3.1 Representaties, energieniveaus en ontgaarding

Beschouw een verzameling symmetrietransformaties  $\vec{x}' = R\vec{x}$ , die de Hamiltoniaan  $\mathcal{H}$  invariant laten. Deze transformaties vormen een groep. Een isomorfe operatie op de golffunctie wordt gegeven door:  $P_R\psi(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x})$ . Dit wordt beschouwd als een *actieve draaiing*. Deze operatoren commuteren met  $\mathcal{H}$ :  $P_R\mathcal{H} = \mathcal{H}P_R$ , en laten het volume element ongewijzigd:  $d(R\vec{x}) = d\vec{x}$ .

$P_R$  is de symmetriegroep van het fysische systeem. Deze veroorzaakt ontgaarding: als  $\psi_n$  een oplossing is van  $\mathcal{H}\psi_n = E_n\psi_n$ , geldt ook:  $\mathcal{H}(P_R\psi_n) = E_n(P_R\psi_n)$ . Een eventuele ontgaarding die niet op symmetrie terug te voeren is heet *toevallige ontgaarding*.

Stel dat er sprake is van een  $\ell_n$ -voudige ontgaarding bij  $E_n$ : kies dan een orthonormale set  $\psi_\nu^{(n)}$ ,  $\nu = 1, 2, \dots, \ell_n$ .

De functie  $P_R\psi_\nu^{(n)}$  ligt in dezelfde deelruimte:  $P_R\psi_\nu^{(n)} = \sum_{\kappa=1}^{\ell_n} \psi_\kappa^{(n)}\Gamma_{\kappa\nu}^{(n)}(R)$

waarin  $\Gamma^{(n)}$  een *irreducibele, unitaire* representatie is van de symmetriegroep  $\mathcal{G}$  van het systeem. Elke  $n$  komt overeen met een ander energieniveau. In de praktijk kan men van de symmetriegroep van een systeem in abstracto irreducibele representaties afleiden, en kan men de energieniveaus zo een quantumgetal toekennen. Door een vaste keuze voor  $\Gamma^{(n)}(R)$  liggen de basisfuncties  $\psi_\nu^{(n)}$  vast. Zo kan men ook een quantumgetal toekennen aan een afzonderlijke basisfunctie.

**Deeltje in een periodieke potentiaal:** De symmetrie operatie is een cyclische groep: noem de operator die de translatie over één eenheid beschrijft  $A$ . Dan:  $\mathcal{G} = \{A, A^2, A^3, \dots, A^h = E\}$ .

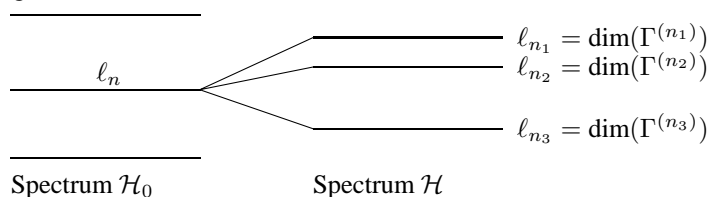
De groep is Abels, dus alle irreducibele representaties zijn 1-dimensionaal. Voor  $0 \leq p \leq h - 1$  volgt:

$$\Gamma^{(p)}(A^n) = e^{2\pi ipn/h}$$

Wanneer men definieert:  $k = -\frac{2\pi p}{ah} \left( \text{mod } \frac{2\pi}{a} \right)$ , zodat:  $P_A\psi_p(x) = \psi_p(x - a) = e^{2\pi ip/h}\psi_p(x)$ , geeft dit het *theorema van Bloch*:  $\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$ , met  $u_k(x \pm a) = u_k(x)$ .

### 13.3.2 Opheffing van ontgaarding door storing

Stel: het ongestoorde systeem heeft Hamiltoniaan  $\mathcal{H}_0$  en symmetriegroep  $\mathcal{G}_0$ . Het gestoorde systeem heeft  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ , en symmetriegroep  $\mathcal{G} \subset \mathcal{G}_0$ . Als  $\Gamma^{(n)}(R)$  een irreducibele representatie is van  $\mathcal{G}_0$ , is het ook een representatie van  $\mathcal{G}$ , maar niet alle elementen van  $\Gamma^{(n)}$  die in  $\mathcal{G}_0$  zaten zitten in  $\mathcal{G}$ . De representatie is dan in het algemeen *reducibel*:  $\Gamma^{(n)} = \Gamma^{(n_1)} \oplus \Gamma^{(n_2)} \oplus \dots$ . De ontgaarding wordt nu (evt. gedeeltelijk) opgeheven: zie de onderstaande figuur.



**Stelling:** De verzameling van  $\ell_n$  ontaarde eigenfuncties  $\psi_\nu^{(n)}$  met energie  $E_n$  vormt een basis voor een  $\ell_n$ -dimensionale irreducibele representatie  $\Gamma^{(n)}$  van de symmetriegroep.

### 13.3.3 Het construeren van een basisfunctie

Elke functie  $F$  in de toestandruimte is te ontbinden in *symmetrietypes*:  $F = \sum_{j=1}^n \sum_{\kappa=1}^{\ell_j} f_\kappa^{(j)}$

De volgende operator extraheert de verschillende symmetrietypes:

$$\left( \frac{\ell_j}{h} \sum_{R \in \mathcal{G}} \Gamma_{\kappa\kappa}^{(j)*}(R) P_R \right) F = f_\kappa^{(j)}$$

Men zegt dat  $f_\kappa^{(j)}$  het deel van  $F$  is dat volgens de  $\kappa^{\text{e}}$  rij van  $\Gamma^{(j)}$  transformeert.

$F$  is ook uit te drukken in basisfuncties  $\varphi$ :  $F = \sum_{a,j,\kappa} c_{a,j,\kappa} \varphi_\kappa^{(a,j)}$ . De functies  $f_\kappa^{(j)}$  worden in het algemeen niet door de groepselementen in elkaar omgezet. Dit is wel het geval als  $c_{ja\kappa} = c_{ja}$ .

**Stelling:** Twee golffuncties die transformeren volgens niet-equivalente unitaire representaties of volgens verschillende rijen van een unitaire irreducibele representatie zijn orthogonaal:

$\langle \varphi_\kappa^{(i)} | \psi_\lambda^{(j)} \rangle \sim \delta_{ij} \delta_{\kappa\lambda}$ , en  $\langle \varphi_\kappa^{(i)} | \psi_\kappa^{(i)} \rangle$  is onafhankelijk van  $\kappa$ .

### 13.3.4 Het direct product van representaties

Beschouw een fysisch systeem dat uit twee deelsystemen bestaat. De deelruimte  $D^{(i)}$  van systeem  $i$  transformeert volgens  $\Gamma^{(i)}$ . Basisfuncties  $\varphi_\kappa^{(i)}(\vec{x}_i)$ ,  $1 \leq \kappa \leq \ell_i$ . Vorm nu alle  $\ell_1 \times \ell_2$  producten  $\varphi_\kappa^{(1)}(\vec{x}_1) \varphi_\lambda^{(2)}(\vec{x}_2)$ . Deze spannen samen de ruimte  $D^{(1)} \otimes D^{(2)}$  op.

Deze productfuncties transformeren als volgt:

$$P_R(\varphi_\kappa^{(1)}(\vec{x}_1) \varphi_\lambda^{(2)}(\vec{x}_2)) = (P_R \varphi_\kappa^{(1)}(\vec{x}_1))(P_R \varphi_\lambda^{(2)}(\vec{x}_2))$$

De ruimte  $D^{(1)} \otimes D^{(2)}$  zal in het algemeen uiteen vallen in een aantal invariante deelruimten:

$$\Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(2)} = \sum_i n_i \Gamma^{(i)}$$

Een nuttig hulpmiddel bij dit reduceren is dat voor de karakters geldt:

$$\chi^{(1)}(R) \chi^{(2)}(R) = \sum_i n_i \chi^{(i)}(R)$$

### 13.3.5 Clebsch-Gordan coëfficiënten

Bij de reductie van de direct-product matrix t.o.v. de basis  $\varphi_\kappa^{(i)} \varphi_\lambda^{(j)}$  gaat men over naar een nieuwe basis  $\varphi_\mu^{(ak)}$ . Deze basisfuncties liggen in deelruimten  $D^{(ak)}$ . De unitaire basistransformatie wordt gegeven door:

$$\varphi_\mu^{(ak)} = \sum_{\kappa\lambda} \varphi_\kappa^{(i)} \varphi_\lambda^{(j)} (i\kappa j\lambda | ak\mu)$$

en de inverse transformatie door:  $\varphi_\kappa^{(i)} \varphi_\lambda^{(j)} = \sum_{ak\mu} \varphi_\mu^{(ak)} (ak\mu | i\kappa j\lambda)$

De Clebsch-Gordan coëfficiënten zijn in essentie inproducten:  $(i\kappa j\lambda | ak\mu) := \langle \varphi_\kappa^{(i)} \varphi_\lambda^{(j)} | \varphi_\mu^{(ak)} \rangle$

### 13.3.6 Symmetrische transformaties van operatoren, irreducibele tensoroperatoren

Observabelen (operatoren) transformeren als volgt onder symmetrietransformaties:  $A' = P_R A P_R^{-1}$ . Als een stel operatoren  $A_\kappa^{(j)}$  met  $0 \leq \kappa \leq \ell_j$  onder elkaar transformeren bij de transformaties van  $\mathcal{G}$  geldt:

$$P_R A_\kappa^{(j)} P_R^{-1} = \sum_\nu A_\nu^{(j)} \Gamma_{\nu\kappa}^{(j)}(R)$$

Als  $\Gamma^{(j)}$  irreducibel is spreekt men van *irreducibele tensoroperatoren*  $A^{(j)}$  met componenten  $A_\kappa^{(j)}$ .

Ook een operator is te ontbinden in symmetrietypes:  $A = \sum_{jk} a_\kappa^{(j)}$ , met:

$$a_\kappa^{(j)} = \left( \frac{\ell_j}{h} \sum_{R \in \mathcal{G}} \Gamma_{\kappa\kappa}^{(j)*}(R) \right) (P_R A P_R^{-1})$$

**Stelling:** Matrixelementen  $H_{ij}$  van operator  $\mathcal{H}$  die invariant is onder  $\forall A \in \mathcal{G}$ , zijn 0 tussen toestanden die transformeren volgens niet-equivalente irreducibele unitaire representaties of volgens verschillende rijen van zo'n representatie. Verder is  $\langle \varphi_\kappa^{(i)} | \mathcal{H} | \psi_\kappa^{(i)} \rangle$  onafhankelijk van  $\kappa$ . Voor  $\mathcal{H} = 1$  is dit weer de vorige stelling.

Dit vindt in de quantummechanica toepassing bij de *storingsrekening* en *variatierekening*. Hierbij probeert men  $\mathcal{H}$  te diagonaliseren. Oplossingen kan men zoeken binnen elke categorie functies  $\varphi_\kappa^{(i)}$  met gemeenschappelijke  $i$  en  $\kappa$ :  $\mathcal{H}$  is al diagonaal in categorieën als geheel.

Storingsrekening kan men uitvoeren binnen elke categorie afzonderlijk. Bij variatierekening kan men de probeergolffunctie kiezen binnen een afzonderlijke categorie, omdat de exacte eigenfuncties transformeren volgens een rij van een irreducibele representatie.

### 13.3.7 Het Wigner-Eckart theorema

**Stelling:** Het matrixelement  $\langle \varphi_\lambda^{(i)} | A_\kappa^{(j)} | \psi_\mu^{(k)} \rangle$  kan slechts  $\neq 0$  zijn als  $\Gamma^{(j)} \otimes \Gamma^{(k)} = \dots \oplus \Gamma^{(i)} \oplus \dots$ . Als dit zo is, geldt (als  $\Gamma^{(i)}$  slechts één maal voorkomt, anders sommeren over  $a$ ):

$$\langle \varphi_\lambda^{(i)} | A_\kappa^{(j)} | \psi_\mu^{(k)} \rangle = (i\lambda | j\kappa k\mu) \langle \varphi^{(i)} || A^{(j)} || \psi^{(k)} \rangle$$

Dit theorema kan men toepassen om selectieregels vast te stellen: de kans op een dipoolovergang wordt gegeven door ( $\vec{e}$  is de polarisatierichting van de straling):

$$P_D = \frac{8\pi^2 e^2 f^3 |r_{12}|^2}{3\hbar \epsilon_0 c^3} \text{ met } r_{12} = \langle l_2 m_2 | \vec{e} \cdot \vec{r} | l_1 m_1 \rangle$$

Verder kan men dit gebruiken om intensiteitsverhoudingen te bepalen: als er slechts één waarde van  $a$  is, verhouden de matrixelementen zich als de Clebsch-Gordan coëfficiënten. Voor meerdere  $a$ -waarden kunnen de relaties tussen de intensiteitsverhoudingen vastgesteld worden. Men moet bij dit alles echter wel bedenken dat de absolute lijnintensiteiten ook van de bezettingsgraad van de desbetreffende niveaus afhangen.

## 13.4 Continue groepen

Continue groepen zijn groepen met  $h = \infty$ . Echter niet alle groepen met  $h = \infty$  zijn continu, de translatiegroep voor een  $\infty$ -uitgebreide periodieke potentiaal is bv. niet continu, maar heeft wel  $h = \infty$ .

### 13.4.1 De 3-dimensionale translatiegroep

Voor de translatie van golffuncties over een afstand  $a$  geldt:  $P_a \psi(x) = \psi(x - a)$ . Taylorontwikkeling rondom  $x$  geeft:

$$\psi(x - a) = \psi(x) - a \frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{1}{2} a^2 \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - + \dots$$

Omdat in de quantummechanica de impulsoperator gegeven wordt door  $p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ , kan men dit schrijven als:

$$\psi(x - a) = e^{-iap_x/\hbar} \psi(x)$$

### 13.4.2 De 3-dimensionale rotatiegroep

Deze groep heet SO(3) omdat men een getrouwe representatie kan construeren uit orthogonale  $3 \times 3$  matrices met determinant +1.

Bij een infinitesimale rotatie om de  $x$ -as geldt:

$$\begin{aligned} P_{\delta\theta_x} \psi(x, y, z) &\approx \psi(x, y + z\delta\theta_x, z - y\delta\theta_x) \\ &= \psi(x, y, z) + \left( z\delta\theta_x \frac{\partial}{\partial y} - y\delta\theta_x \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi(x, y, z) \\ &= \left( 1 - \frac{i\delta\theta_x L_x}{\hbar} \right) \psi(x, y, z) \end{aligned}$$

Omdat de impulsmomentoperator gegeven wordt door:  $L_x = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right)$

In een willekeurige richting geldt dus: Rotaties:  $P_{\alpha, \vec{n}} = \exp(-i\alpha(\vec{n} \cdot \vec{J})/\hbar)$   
Translaties:  $P_{a, \vec{n}} = \exp(-ia(\vec{n} \cdot \vec{p})/\hbar)$

$J_x, J_y$  en  $J_z$  heten de *generatoren* van de 3-dim. rotatiegroep,  $p_x, p_y$  en  $p_z$  heten de generatoren van de 3-dim. translatiegroep.

De commutatieregels voor de generatoren volgen uit de vermenigvuldigingseigenschappen van de groep: translaties zijn verwisselbaar  $\leftrightarrow p_x p_y - p_y p_x = 0$ .

Rotaties zijn i.h.a. niet verwisselbaar: beschouw een rotatie om as  $\vec{n}$  in het  $xz$ -vlak over een hoek  $\alpha$ : dan geldt:

$P_{\alpha, \vec{n}} = P_{-\theta, y} P_{\alpha, x} P_{\theta, y}$ , dus:

$$e^{-i\alpha(\vec{n} \cdot \vec{J})/\hbar} = e^{i\theta J_y/\hbar} e^{-i\alpha J_x/\hbar} e^{-i\theta J_y/\hbar}$$

Als  $\alpha$  en  $\theta$  zeer klein zijn, en ontwikkelen tm. de tweede orde, en overeenkomstige termen gelijkstellen, met  $\vec{n} \cdot \vec{J} = J_x \cos \theta + J_z \sin \theta$ , volgt uit de  $\alpha\theta$  term:  $J_x J_y - J_y J_x = i\hbar J_z$ .

### 13.4.3 Eigenschappen van continue groepen

De elementen  $R(p_1, \dots, p_n)$  hangen continu af van parameters  $p_1, \dots, p_n$ . Voor de translatiegroep zijn dit bv.  $an_x, an_y$  en  $an_z$ . Men eist dat de groepsvermenigvuldiging en de inverse van element  $R$  continu afhangen van de parameters van  $R$ .

Het *herordeningstheorem*a geldt ook voor continue groepen. Het begrip *klasse* is op dezelfde manier gedefinieerd als bij discrete groepen. Het begrip *representatie* wordt aangepast via de continuïteitseis: elke matrix  $\Gamma(R)$  hangt continu af van  $p_i(R)$ .

Sommatie over alle groeps-elementen wordt bij continue groepen vervangen door integratie. Als  $f(R)$  een op  $\mathcal{G}$  gedefinieerde functie is, bv  $\Gamma_{\alpha\beta}(R)$ , geldt:

$$\int_{\mathcal{G}} f(R) dR := \int_{p_1} \cdots \int_{p_n} f(R(p_1, \dots, p_n)) g(R(p_1, \dots, p_n)) dp_1 \cdots dp_n$$

Hierin is  $g(R)$  de *dichtheidsfunctie*.

Op basis van het herordeningstheorem wordt geeist:  $\int f(R) dR = \int f(SR) dR$ . Dit legt  $g(R)$  vast op een constante na. Definieer nieuwe variabelen  $p'$  door:  $SR(p_i) = R(p'_i)$ . Als men schrijft  $dV := dp_1 \cdots dp_n$ , geldt:

$$g(S) = g(E) \frac{dV}{dV'}$$

Hierin is  $\frac{dV}{dV'}$  de *Jacobiaan*:  $\frac{dV}{dV'} = \det \left( \frac{\partial p_i}{\partial p'_j} \right)$ , en  $g(E)$  is constant.

Voor de translatiegroep geldt:  $g(\vec{a}) = \text{constant} = g(\vec{0})$ , omdat  $g(a\vec{n})d\vec{a}' = g(\vec{0})d\vec{a}$  en  $d\vec{a}' = d\vec{a}$ .

Op deze wijze is een orthogonaliteitstheorema af te leiden:

$$\int_{\mathcal{G}} \Gamma_{\mu\nu}^{(i)*}(R) \Gamma_{\alpha\beta}^{(j)}(R) dR = \frac{1}{\ell_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta} \int_{\mathcal{G}} dR$$

en voor de karakters geldt:

$$\int_{\mathcal{G}} \chi^{(i)*}(R) \chi^{(j)}(R) dR = \delta_{ij} \int_{\mathcal{G}} dR$$

*Compacte* groepen zijn groepen waar voor het groepsvolume geldt:  $\int_{\mathcal{G}} dR < \infty$ .

### 13.5 De groep SO(3)

Men kan 2 parameters nemen voor de richting van de draaias, en nog één voor de draaihoek  $\varphi$ . De parameter-ruimte is nu een verzameling punten  $\varphi\vec{n}$ , die in een bol liggen met straal  $\pi$ . De diametrale punten op deze bol kan men dan identificeren omdat  $R_{\vec{n},\pi} = R_{-\vec{n},-\pi}$ .

Een andere manier om parameters te definiëren is via de *Eulerhoeken*. Indien  $\alpha, \beta$  en  $\gamma$  de 3 Eulerhoeken zijn, gedefinieerd als:

1. De bolhoeken van as 3 t.o.v.  $xyz$  zijn  $\theta, \varphi := \beta, \alpha$ . Nu is er nog een rotatie om as 3 mogelijk:
2. De bolhoeken van de  $z$ -as t.o.v. 123 zijn  $\theta, \varphi := \beta, \pi - \gamma$ .

Dan wordt de rotatie van een quantummechanische toestand beschreven door:

$$\psi \rightarrow e^{-i\alpha J_z/\hbar} e^{-i\beta J_y/\hbar} e^{-i\gamma J_z/\hbar} \psi. \text{ Dus } P_R = e^{-i\varepsilon(\vec{n}\cdot\vec{J})/\hbar}.$$

Alle irreducibele representaties van SO(3) zijn te construeren d.m.v. het gedrag van de bolfuncties  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  met  $-l \leq m \leq l$  en bij vaste  $l$ :

$$P_R Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{m'} Y_{lm'}(\theta, \varphi) D_{mm'}^{(l)}(R)$$

$D^{(l)}$  is een irreducibele representatie van dimensie  $2l + 1$ . Het karakter van  $D^{(l)}$  wordt gegeven door:

$$\chi^{(l)}(\alpha) = \sum_{m=-l}^l e^{im\alpha} = 1 + 2 \sum_{k=0}^l \cos(k\alpha) = \frac{\sin([l + \frac{1}{2}]\alpha)}{\sin(\frac{1}{2}\alpha)}$$

In de gebruikte afleiding is  $\alpha$  hierin de rotatiehoek om de  $z$ -as. Omdat de klassen van SO(3) bestaan uit rotaties over dezelfde hoek om een willekeurige as, geldt deze uitdrukking voor alle rotaties over hoek  $\alpha$ .

Via het orthogonaliteitstheorema voor de karakters komt men tot de volgende uitdrukking voor de dichtheidsfunctie (de normering is z.d.d.  $g(0) = 1$ ):

$$g(\alpha) = \frac{\sin^2(\frac{1}{2}\alpha)}{(\frac{1}{2}\alpha)^2}$$

Nu is ook in te zien dat de gevonden irreducibele representaties van SO(3) de enige zijn: het karakter van een eventuele andere representatie  $\chi'$  zou  $\perp$  de al bekende staan, dus  $\chi'(\alpha) \sin^2(\frac{1}{2}\alpha) = 0 \forall \alpha \Rightarrow \chi'(\alpha) = 0 \forall \alpha$ . Omdat  $\chi'(0)$  de dimensie van de representatie is, is dit een tegenspraak.

Omdat de spin van een fermion halftallig is, spannen de toestanden  $\psi_{sm_s}$  met  $s = \frac{1}{2}$  en  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  een 2-dim. ruimte op die invariant is onder rotaties. Een probleem ontstaat bij de rotatie om  $2\pi$ :

$$\psi_{\frac{1}{2}m_s} \rightarrow e^{-2\pi i S_z/\hbar} \psi_{\frac{1}{2}m_s} = e^{-2\pi i m_s} \psi_{\frac{1}{2}m_s} = -\psi_{\frac{1}{2}m_s}$$

In  $SO(3)$  geldt echter:  $R_{z,2\pi} = E$ . Hier geldt dus  $E \rightarrow \pm I$ . Omdat waarneembare grootheden altijd geschreven kunnen worden als  $\langle \phi | \psi \rangle$  of  $\langle \phi | A | \psi \rangle$ , en dus bilineair zijn in de toestanden, veranderen deze niet van teken als de toestanden dat wel doen. Als slechts één toestand van teken verandert, veranderen de waarneembare grootheden wel.

Het bestaan van halftallige representaties hangt samen met de topologische eigenschappen van  $SO(3)$ : deze groep is nl. tweevoudig samenhangend door de identificatie  $R_0 = R_{2\pi} = E$ .

## 13.6 Toepassing in de quantummechanica

### 13.6.1 Vectormodel voor samenstellen van impulsmomenten

Als 2 deelsystemen impulsmomentquantumgetallen  $j_1$  en  $j_2$  hebben, kan het totale impulsmoment alleen de waarden  $J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$  aannemen. Dit valt uit de groepentheorie af te leiden: uit  $\chi^{(j_1)}(\alpha)\chi^{(j_2)}(\alpha) = \sum_J n_J \chi^{(J)}(\alpha)$  volgt:

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = D^{(j_1+j_2)} \oplus D^{(j_1+j_2-1)} \oplus \dots \oplus D^{(|j_1-j_2|)}$$

De toestanden kan men op 2 manieren met quantumgetallen karakteriseren: met  $j_1, m_1, j_2, m_2$  en met  $j_1, j_2, J, M$ . De Clebsch-Gordan coëfficiënten, die voor de groep  $SO(3)$  de *Wignercoëfficiënten* heten, kan men reëel kiezen, dus:

$$\begin{aligned} \psi_{j_1 j_2 J M} &= \sum_{m_1 m_2} \psi_{j_1 m_1 j_2 m_2} (j_1 m_1 j_2 m_2 | J M) \\ \psi_{j_1 m_1 j_2 m_2} &= \sum_{J M} \psi_{j_1 j_2 J M} (j_1 m_1 j_2 m_2 | J M) \end{aligned}$$

### 13.6.2 Irreducibele tensoroperatoren, matrixelementen en selectieregels

#### Enkele voorbeelden van het gedrag van operatoren onder $SO(3)$

1. Stel  $j = 0$ : dit geeft de identieke representatie met  $\ell_j = 1$ . Deze toestand wordt beschreven door een scalaire operator. Omdat  $P_R A_0^{(0)} P_R^{-1} = A_0^{(0)}$  is deze invariant, bv. de Hamiltoniaan van een vrij atoom. Dan geldt:  $\langle J' M' | \mathcal{H} | J M \rangle \sim \delta_{M M'} \delta_{J J'}$ .
2. Een vectoroperator:  $\vec{A} = (A_x, A_y, A_z)$ . Bij definitie transformeren de cartesische componenten van een vectoroperator net zo als de cartesische componenten van  $\vec{r}$ . Bij een rotatie om de  $z$ -as geldt dus:

$$D(R_{\alpha,z}) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

De getransformeerde operator heeft t.o.v.  $P_R \psi$  en  $P_R \phi$  dezelfde matrixelementen:

$\langle P_R \psi | P_R A_x P_R^{-1} | P_R \phi \rangle = \langle \psi | A_x | \phi \rangle$ .  $\chi(R_{\alpha,z}) = 1 + 2 \cos(\alpha)$ : volgens de formule voor de karakters betekent dit dat men zodanige nieuwe basisoperatoren kan kiezen dat deze transformeren als  $Y_{1m}(\theta, \varphi)$ .

Dit blijken de sferische componenten te zijn:

$$A_{+1}^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(A_x + iA_y), \quad A_0^{(1)} = A_z, \quad A_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(A_x - iA_y)$$

3. Een cartesische tensor van rang 2:  $T_{ij}$  is een grootheid die onder rotaties transformeert als  $U_i V_j$ , waarin  $\vec{U}$  en  $\vec{V}$  vectoren zijn. Dus  $T_{ij}$  transformeert volgens  $P_R T_{ij} P_R^{-1} = \sum_{kl} T_{kl} D_{ki}(R) D_{lj}(R)$ , dus volgens  $D^{(1)} \otimes D^{(1)} = D^{(2)} \oplus D^{(1)} \oplus D^{(0)}$ . De 9 componenten zijn dus op te splitsen in 3 invariante deelruimten met dimensie 1 ( $D^{(0)}$ ), 3 ( $D^{(1)}$ ) en 5 ( $D^{(2)}$ ). De nieuwe basisoperatoren blijken te zijn:

I.  $\text{Tr}(\underline{T}) = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz}$ . Deze transformeert als de scalar  $\vec{U} \cdot \vec{V}$ , dus volgens  $D^{(0)}$ .

II. De 3 antisymmetrische componenten  $A_z = \frac{1}{2}(T_{xy} - T_{yx})$ , etc. Deze transformeren als de vector  $\vec{U} \times \vec{V}$ , dus volgens  $D^{(1)}$ .

III. De 5 onafhankelijke componenten van de spoorloze, symmetrische tensor  $\underline{S}$ :

$$S_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij} + T_{ji}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \text{Tr}(\underline{T}). \text{ Deze transformeren volgens } D^{(2)}.$$

### Selectieregels voor dipoolovergangen

Dipooloperatoren transformeren volgens  $D^{(1)}$ : voor een elektrische dipoolovergang is de operator  $e\vec{r}$ , voor een magnetische  $e(\vec{L} + 2\vec{S})/2m$ .

Uit het Wigner-Eckart theorema volgt:  $\langle J' M' | A_k^{(1)} | J M \rangle = 0$  tenzij  $D^{(J')}$  bevat is in  $D^{(1)} \otimes D^{(J)} = D^{(J+1)} \oplus D^{(J)} \oplus D^{(J-1)}$ . Dit betekent dat  $J' \in \{J+1, J, |J-1|\}$ :  $J' = J$  of  $J' = J \pm 1$ , behalve  $J' = J = 0$ .

### Landé-formule voor anomale Zeemansplitsing

Volgens het model van Landé wordt de wisselwerking van het magnetisch moment met een uitwendig magneetveld bepaald door de projectie van  $\vec{M}$  op  $\vec{J}$ , omdat  $\vec{L}$  en  $\vec{S}$  snel om  $\vec{J}$  precesseren. Dit is ook te begrijpen uit het Wigner-Eckart theorema. Hieruit volgt dat de matrixelementen van alle vectoroperatoren een zekere evenredigheid vertonen: voor een willekeurige operator  $\vec{A}$  volgt:

$$\langle \alpha j m' | \vec{A} | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha j m | \vec{A} \cdot \vec{J} | \alpha j m \rangle}{j(j+1)\hbar^2} \langle \alpha j m' | \vec{J} | \alpha j m \rangle$$

## 13.7 Toepassing in de elementaire deeltjes fysica

De fysica van een systeem verandert i.h.a. niet als de transformatie  $\psi' = e^{i\delta}\psi$  uitgevoerd wordt, waarin  $\delta$  een constante is. Dit heet een *globale ijktransformatie*: de fase van de golffunctie verandert overal op dezelfde manier.

Er bestaat enige vrijheid in de keuze van de potentialen  $\vec{A}$  en  $\phi$  bij dezelfde  $\vec{E}$  en  $\vec{B}$ : *ijktransformaties* van de potentialen veranderen  $\vec{E}$  en  $\vec{B}$  niet (Zie hoofdstuk 2 en 10). De oplossing  $\psi'$  van de Schrödingervergelijking met de getransformeerde potentialen wordt gegeven door:  $\psi' = e^{-iqf(\vec{r},t)}\psi$ .

Dit is een *locale ijktransformatie*: de fase van de golffunctie verandert op elke plaats verschillend. De fysica van het systeem verandert niet als  $\vec{A}$  en  $\phi$  meetransformeren. Dit wordt nu tot principe verheven: *het "bestaansrecht" van het elektromagnetische veld is het verzorgen van de locale ijkinvariantie*.

De ijktransformaties van het EM-veld vormen een groep: U(1), unitaire  $1 \times 1$ -matrices. Het afsplitsen van de lading in de exponent is essentieel: nu is één ijkveld voldoende voor alle geladen deeltjes, onafhankelijk van de lading.

Dit concept wordt nu gegeneraliseerd: aan deeltjes wordt een "speciale lading"  $Q$  toegekend. De groepselecties zijn dan gegeven door  $P_R = \exp(-iQ\Theta)$ .

Andere krachtvelden dan de elektromagnetische zijn ook op deze manier te begrijpen: de zwakke wisselwerking met de elektromagnetische samen wordt beschreven door een ijkveld dat transformeert volgens  $U(1) \otimes SU(2)$ , dat bestaat uit het foton en drie intermediaire vectorbosonen, en de kleurkracht door  $SU(3)$ , met een ijkveld dat bestaat uit 8 soorten gluonen.

In het algemeen worden de groeps-elementen gegeven door  $P_R = \exp(-i\vec{T} \cdot \vec{\Theta})$ , met  $\Theta_n$  reële constanten en  $T_n$  operatoren (generatoren), zoals  $Q$ . De commutatierregels worden gegeven door  $[T_i, T_j] = i \sum_k c_{ijk} T_k$ . De  $c_{ijk}$  zijn de *structuurconstanten* van de groep. Voor  $SO(3)$  zijn deze constanten  $c_{ijk} = \varepsilon_{ijk}$ , waarin  $\varepsilon_{ijk}$  de volledig antisymmetrische tensor is met  $\varepsilon_{123} = +1$ .

Deze constanten zijn af te leiden via groeps productelementen: omdat  $\mathcal{G}$  gesloten is, geldt:

$e^{i\vec{\Theta}' \cdot \vec{T}} e^{i\vec{\Theta}'' \cdot \vec{T}} e^{-i\vec{\Theta}' \cdot \vec{T}} e^{-i\vec{\Theta}'' \cdot \vec{T}} = e^{-i\vec{\Theta}'' \cdot \vec{T}}$ . Taylorontwikkeling toepassen, en  $\Theta^n \Theta'^m$ -termen gelijkstellen levert de commutatierregels op.

De groep  $SU(2)$  heeft 3 vrije parameters: vanwege de unitariteit 4 reële condities op 4 complexe parameters, dus 4 vrije parameters, en omdat de determinant +1 moet zijn, blijven er 3 over.

Elke unitaire matrix  $U$  is te schrijven als:  $U = e^{-iH}$ . Hierin is  $H$  een Hermitische matrix. Verder geldt altijd:  $\det(U) = e^{-i\text{Tr}(H)}$ .

Voor elke matrix van  $SU(2)$  geldt dat  $\text{Tr}(H)=0$ . Elke Hermitische, spoorloze  $2 \times 2$  matrix is te schrijven als

een lineaire combinatie van de 3 *Pauli-matrices*  $\sigma_i$ . Daarom zijn deze matrices een keuze voor de operatoren van SU(2). Men kan nu schrijven:  $SU(2) = \{\exp(-\frac{1}{2}i\vec{\sigma} \cdot \vec{\Theta})\}$ .

In abstracto kan men een isomorfe groep beschouwen, waarin over de operatoren  $T_i$  alleen de commutatieregels bekend verondersteld worden:  $[T_1, T_2] = iT_3$ , etc.

In de elementaire deeltjesfysica zijn de  $T_i$  o.a. als de *isospin* operatoren op te vatten. Elementaire deeltjes worden verondersteld te kunnen worden ingedeeld in isospin-multipletten, dit zijn de irreducibele representaties van SU(2). De indeling is:

1. Het isospin-singlet  $\equiv$  de identieke representatie:  $e^{-i\vec{T} \cdot \vec{\Theta}} = 1 \Rightarrow T_i = 0$
2. Het isospin-doublet  $\equiv$  de getrouwe representatie van SU(2) op  $2 \times 2$  matrices.

De groep SU(3) heeft 8 vrije parameters. In het algemeen: de groep SU( $N$ ) heeft  $N^2 - 1$  vrije parameters. De Hermitische, spoorloze operatoren zijn 3 SU(2)-subgroepen in het  $\vec{e}_1\vec{e}_2, \vec{e}_1\vec{e}_3$  en het  $\vec{e}_2\vec{e}_3$  vlak. Dit geeft 9 matrices, die echter niet alle 9 lineair onafhankelijk zijn. Door het nemen van een lineaire combinatie komt men tot 8 lineair onafhankelijke matrices.

In de Lagrangedichtheid voor de kleurkracht moet men de substitutie  $\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{D}{Dx} := \frac{\partial}{\partial x} - \sum_{i=1}^8 T_i A_x^i$

uitvoeren. De termen van derde en vierde orde in  $A$  die dit oplevert, geven aan dat het kleurveld wisselwerkt met zichzelf.



# Hoofdstuk 14

## Kernfysica

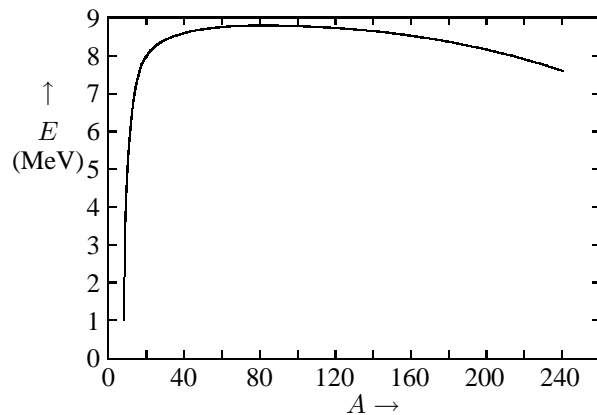
### 14.1 Kernkrachten

De massa van een atoomkern is gegeven door:

$$M_{\text{kern}} = Zm_p + Nm_n - E_{\text{bind}}/c^2$$

De bindingsenergie per nucleon is gegeven in het figuur hiernaast. De top ligt ongeveer bij  ${}^{56}_{26}\text{Fe}$ , de stabielste kern. Met de constanten

$$\begin{aligned} a_1 &= 15,760 \text{ MeV} \\ a_2 &= 17,810 \text{ MeV} \\ a_3 &= 0,711 \text{ MeV} \\ a_4 &= 23,702 \text{ MeV} \\ a_5 &= 34,000 \text{ MeV} \end{aligned}$$



en  $A = Z + N$  is in het *druppel* of *collectieve model* van de kern de bindingsenergie  $E_{\text{bind}}$  gegeven door:

$$\frac{E_{\text{bind}}}{c^2} = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - a_4 \frac{(N-Z)^2}{A} + \epsilon a_5 A^{-3/4}$$

De oorzaak van de verschillende termen is:

1.  $a_1$ : Bindingsenergie van de sterke kernkracht, bij benadering  $\sim A$ .
2.  $a_2$ : Oppervlaktecorrectie: de nucleonen bij het oppervlak zijn minder gebonden.
3.  $a_3$ : Coulombafstoting tussen de protonen.
4.  $a_4$ : Asymmetrie term: een overmaat van protonen of neutronen heeft een lagere bindingsenergie.
5.  $a_5$ : Paringseffect: omdat protonen en neutronen in groepjes van 2 een lagere energie hebben zijn kernen met een even aantal protonen en/of neutronen stabielere. Er geldt:

$$\begin{aligned} \underline{Z \text{ even, } N \text{ even: } \epsilon = +1, Z \text{ oneven, } N \text{ oneven: } \epsilon = -1.} \\ \underline{Z \text{ even, } N \text{ oneven: } \epsilon = 0, Z \text{ oneven, } N \text{ even: } \epsilon = 0.} \end{aligned}$$

Wanneer de kernkracht in 1e benadering wordt beschouwd als het uitwisselen van virtuele pionen tussen nucleonen is voor de kernkracht de Yukawapotential af te leiden:

$$U(r) = -\frac{W_0 r_0}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)$$

Met  $\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$ ,  $E_\gamma = m_0 c^2$  en  $r_0 = c \Delta t$  volgt:  $r_0 = \hbar / m_0 c$ .

In het *schillenmodel* van de kern gaat men er van uit dat een nucleon zich in een gemiddeld veld van de andere nucleonen beweegt. Verder is er nog een bijdrage van de spin-baan koppeling  $\sim \vec{L} \cdot \vec{S}$ :  $\Delta V_{ls} = \frac{1}{2}(2l+1)\hbar\omega$ . Elk  $(n, l)$  niveau wordt dus in 2 niveaus gesplitst, met  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , waarbij de toestand met  $j = l + \frac{1}{2}$  de laagste energie heeft, i.t.t. de situatie bij elektronen. Dit is een indicatie dat de  $L - S$  wisselwerking niet

elektromagnetisch is. De energie van een 3-dimensionale harmonische oscillator is  $E = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega$ .  $N = n_x + n_y + n_z = 2(n - 1) + l$  met  $n \geq 1$  is het hoofdiscillatiegetal. Omdat  $-l \leq m \leq l$  en  $m_s = \pm \frac{1}{2}\hbar$  zijn er  $2(2l + 1)$  subtoestanden, die onafhankelijk voor protonen en neutronen bestaan. Dit geeft aanleiding tot de zogenaamde *magische getallen*: kernen waarbij alle toestanden in het buitenste niveau gevuld zijn zijn bijzonder stabiel. Dit is het geval als  $N$  of  $Z \in \{2, 8, 20, 28, 50, 82, 126\}$ .

## 14.2 De vorm van de atoomkern

Een atoomkern is in 1e benadering bolvormig met een straal van  $R = R_0 A^{1/3}$ . Hierin is  $R_0 \approx 1,4 \cdot 10^{-15}$  m voor alle kernen constant. Wanneer de kernstraal met ladingsverdeling gemeten wordt, vindt men  $R_0 \approx 1,2 \cdot 10^{-15}$  m. De vorm van trillende kernen kan men beschrijven met bolfuncties:

$$R = R_0 \left[ 1 + \sum_{lm} a_{lm} Y_l^m(\theta, \varphi) \right]$$

$l = 0$  geeft aanleiding tot monopoolvibraties, dichtheidsvariaties, die o.a. in de theorie van neutronensterren toegepast worden.  $l = 1$  geeft dipoolvibraties,  $l = 2$  quadropool, met  $a_{2,0} = \beta \cos \gamma$  en  $a_{2,\pm 2} = \frac{1}{2}\sqrt{2}\beta \sin \gamma$  waarin  $\beta$  de deformatiefactor is en  $\gamma$  de vormparameter. Het multipoolmoment is gegeven door  $\mu_l = Z e r^l Y_l^m(\theta, \varphi)$ . De pariteit van het elektrisch moment  $\Pi_E = (-1)^l$ , die van het magnetisch moment is  $\Pi_M = (-1)^{l+1}$ .

Het magnetisch dipoolmoment bestaat uit 2 bijdragen:  $\vec{M}_L = \frac{e}{2m_p} \vec{L}$  en  $\vec{M}_S = g_S \frac{e}{2m_p} \vec{S}$ .

waarin  $g_S$  de *spin-gyromagnetische verhouding* is. Voor protonen geldt  $g_S = 5,5855$  en voor neutronen  $g_S = -3,8263$ . De  $z$ -componenten van het magnetisch moment worden gegeven door  $M_{L,z} = \mu_N m_l$  en  $M_{S,z} = g_S \mu_N m_s$ . Het resulterende magnetische moment hangt samen met de kernspin  $I$  volgens  $\vec{M} = g_I (e/2m_p) \vec{I}$ . De  $z$ -component is dan  $M_z = \mu_N g_I m_I$ .

## 14.3 Radioactief verval

Het aantal kernen dat vervalft is recht evenredig met de hoeveelheid kernen:  $\dot{N} = -\lambda N$ . Daarom geldt voor het aantal kernen  $N$ :  $N(t) = N_0 \exp(-\lambda t)$ . De *halveringstijd* volgt uit  $\tau_{1/2} \lambda = \ln(2)$ . De gemiddelde levensduur van een kern is  $\tau = 1/\lambda$ . De kans dat  $N$  kernen vervallen binnen een tijdsperiode is gegeven door een Poisson verdeling:

$$P(N)dt = N_0 \frac{\lambda^N e^{-\lambda}}{N!} dt$$

Als een kern naar meerdere eindtoestanden kan vervallen geldt:  $\lambda = \sum \lambda_i$ . De fractie die naar toestand  $i$  vervalft is dus  $\lambda_i / \sum \lambda_i$ . Er zijn 5 soorten natuurlijk radioactief verval:

1.  $\alpha$ -verval: hierbij zendt de kern een  $\text{He}^{2+}$  kern uit. Omdat nucleonen de neiging hebben zich in groepjes van  $2p+2n$  te ordenen is dit te zien als het tunnelen van een  $\text{He}^{2+}$  kern door een potentiaalbarrière. Met de *Gamow factor*  $G$  wordt de tunnelkans  $P$  gegeven door:

$$P = \frac{\text{amplitude inval}}{\text{amplitude uittree}} = e^{-2G} \quad \text{waarin} \quad G = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \int [V(r) - E] dr}$$

2.  $\beta$ -verval. Hierbij gaat een proton in een neutron over of omgekeerd:  
 $p^+ \rightarrow n^0 + W^+ \rightarrow n^0 + e^+ + \nu_e$ , en  $n^0 \rightarrow p^+ + W^- \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}_e$ .
3. Elektronvangst: hierbij vangt een proton in de kern een elektron in (meestal uit de K-schil).
4. Spontane kernsplijting: hierbij valt een kern in meerdere delen uit elkaar.

5.  $\gamma$ -verval: hierbij zendt de kern een hoogenergetisch foton uit. De vervalconstante is:

$$\lambda = \frac{P(l)}{\hbar\omega} \sim \frac{E_\gamma}{(\hbar c)^2} \left( \frac{E_\gamma R}{\hbar c} \right)^{2l} \sim 10^{-4l}$$

met  $l$  het impulsmoment quantumgetal en  $P$  het uitgestraalde vermogen. Algemeen geldt dat de vervalconstante van elektrische multipoolmomenten groter is dan die van magnetische multipoolmomenten. De energie van het foton is  $E_\gamma = E_i - E_f - T_R$ , met  $T_R = E_\gamma^2/2mc^2$  de recoil energie, die meestal verwaarloosd kan worden. De pariteit van de uitgezonden straling is  $\Pi^l = \Pi^i \cdot \Pi^f$ . Met  $l$  het quantumgetal van impulsmoment van de kern,  $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ , geldt de selectieregel  $|\vec{I}_i - \vec{I}_f| \leq \Delta l \leq |\vec{I}_i + \vec{I}_f|$ .

## 14.4 Verstrooiing en kernreacties

### 14.4.1 Kinetisch model

Wanneer men een bundel van intensiteit  $I$  op een trefplaat laat vallen met dichtheid  $n$  en lengte  $x$  (Rutherfordverstrooiing) zal het aantal verstrooiingen  $R$  per tijdseenheid gelijk zijn aan  $R = Inx\sigma$ . Hieruit volgt dat de intensiteit van de bundel afneemt met  $-dI = In\sigma dx$ . Dit geeft  $I = I_0 e^{-n\sigma x} = I_0 e^{-\mu x}$ .

Omdat  $dR = R(\theta, \varphi)d\Omega/4\pi = Inxd\sigma$  volgt:  $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R(\theta, \varphi)}{4\pi n x I}$

Wanneer  $N$  deeltjes verstrooien aan een materiaal met dichtheid  $n$  geldt:  $\frac{\Delta N}{N} = n \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta\Omega \Delta x$

Voor Coulombbotsingen geldt:  $\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_C = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{8\pi\epsilon_0 \mu v_0^2} \frac{1}{\sin^4(\frac{1}{2}\theta)}$

### 14.4.2 Quantummechanisch model voor n-p verstrooiing

Uitgegaan wordt van een bundel neutronen die zich langs de  $z$ -as beweegt met golf functie  $\psi_{\text{inv}} = e^{ikz}$  en stroomdichtheid  $J_{\text{inv}} = v|\psi_{\text{inv}}|^2 = v$ . Op grote afstand van het verstrooiingspunt hebben de neutronen bij benadering een bolgolf functie  $\psi_{\text{verstr}} = f(\theta)e^{ikr}/r$  met  $f(\theta)$  de *verstrooiingsamplitude*. De totale golf functie is dan

$$\psi = \psi_{\text{inv}} + \psi_{\text{verstr}} = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

De deeltjesflux van de verstrooide deeltjes is  $v|\psi_{\text{verstr}}|^2 = v|f(\theta)|^2 d\Omega$ . Hieruit volgt dat  $\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$ . De golf functie van de invallende deeltjes is uit te drukken in een som van impulsmoment-golf functies:

$$\psi_{\text{inv}} = e^{ikz} = \sum_l \psi_l$$

De botsingsparameter is gerelateerd aan het impulsmoment van het invallende deeltje via  $L = bp = b\hbar k$ , dus  $b\hbar k \approx l$ . Voor zeer lage energie worden alleen de deeltjes met  $l = 0$  verstrooid, dus

$$\psi = \psi'_0 + \sum_{l>0} \psi_l \quad \text{en} \quad \psi_0 = \frac{\sin(kr)}{kr}$$

Als de potentiaal bij benadering rechthoekig is geldt:  $\psi'_0 = C \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}$

De werkzame doorsnede is dan  $\sigma(\theta) = \frac{\sin^2(\delta_0)}{k^2}$  dus  $\sigma = \int \sigma(\theta) d\Omega = \frac{4\pi \sin^2(\delta_0)}{k^2}$

Voor zeer lage energieën geldt:  $\sin^2(\delta_0) = \frac{\hbar^2 k^2 / 2m}{W_0 + W}$

met  $W_0$  de diepte van de potentiaalput. Voor hogere energieën geldt:  $\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l \sin^2(\delta_l)$

### 14.4.3 Energie en impulsbehoud bij kernreacties

Wanneer een deeltje  $P_1$  botst tegen deeltje  $P_2$  dat in rust is t.o.v. het laboratoriumsysteem waarbij andere deeltjes ontstaan, dus

$$P_1 + P_2 \rightarrow \sum_{k>2} P_k$$

is de totale energie  $Q$  die vrijkomt of nodig is  $Q = (m_1 + m_2 - \sum_{k>2} m_k)c^2$ .

De minimale kinetische energie  $T$  van  $P_1$  in het laboratoriumsysteem om de reactie te laten verlopen is

$$T = -Q \frac{m_1 + m_2 + \sum m_k}{2m_2}$$

Als  $Q < 0$  is er sprake van een drempelenergie.

## 14.5 Stralingsdosimetrie

*Radiometrische grootheden* bepalen de sterkte van de stralingsbron(nen). *Dosimetrische grootheden* hebben betrekking op de energie overdracht van straling in materie. Parameters die een relatie tussen deze 2 aangeven heten *interactie parameters*. De intensiteit van een bundel deeltjes in materie neemt af volgens  $I(s) = I_0 \exp(-\mu s)$ . Het afremproces van een zwaar deeltje wordt volgens de *Bethe-Bloch formule* beschreven als:

$$\frac{dE}{ds} \sim \frac{q^2}{v^2}$$

De *fluentie* is gegeven door  $\Phi = dN/dA$ . De *flux* is  $\phi = d\Phi/dt$ . De energiefluentie is gegeven door  $\Psi = dW/dA$ , en de energiefluxdichtheid  $\psi = d\Psi/dt$ . De *verzwakkingscoëfficiënt* is gegeven door  $\mu = (dN/N)/dx$ . De *massieke verzwakkingscoëfficiënt* is gegeven door  $\mu/\rho$ .

De *exposie*  $X$  is de door straling vrijgemaakte hoeveelheid lading per massa-eenheid, met eenheid C/kg. Een oude eenheid is de Röntgen:  $1\text{Rö} = 2,58 \cdot 10^{-4} \text{ C/kg}$ . Met de energie-absorptiecoëfficiënt  $\mu_E$  volgt:

$$X = \frac{dQ}{dm} = \frac{e\mu_E}{W\rho} \Psi$$

waarin  $W$  de energie is die nodig is om de elementaire lading vrij te maken.

De *geabsorbeerde dosis*  $D$  is gegeven door  $D = dE_{\text{geabs}}/dm$ , met eenheid Gy=J/kg. Een oude eenheid is de rad:  $1 \text{ rad} = 0,01 \text{ Gy}$ . Het *dosistempo* is gedefinieerd als  $\dot{D}$ . Men kan afleiden dat

$$D = \frac{\mu_E}{\rho} \Psi$$

De *Kerma*  $K$  is de hoeveelheid kinetische energie van secundair vrijgemaakte deeltjes die wordt vrijgemaakt per massa-eenheid van het bestraalde object.

De *equivalente dosis*  $H$  is een gewogen gemiddelde van de geabsorbeerde dosis per stralingssoort, waarbij per stralingssoort het effect op biologisch materiaal als weegfactor dient. Deze weegfactoren heten de kwaliteitsfactoren. De eenheid is Sv.  $H = QD$ . Als de absorptie niet gelijkmatig is moet er tevens gemiddeld worden met weegfactoren  $w$  per orgaan:  $H = \sum w_k H_k$ . Voor verschillende stralingssoorten geldt:

Stralingstype	$Q$
Röntgen, gammastraling	1
$\beta$ , elektronen, mesonen	1
Thermische neutronen	3 á 5
Snelle neutronen	10 á 20
protonen	10
$\alpha$ , splijtungskernen	20

# Hoofdstuk 15

## Quantumveldentheorie & Deeltjesfysica

### 15.1 Creatie en annihilatie operatoren

Een meer deeltjes toestand wordt beschreven met een verzameling bezettingsgetallen  $|n_1 n_2 n_3 \dots\rangle$ . De vacuümtoestand is dus gegeven door  $|000 \dots\rangle$ . Omdat de deeltjes ononderscheidbaar zijn is dit een volledige beschrijving. De toestanden zijn orthonormaal:

$$\langle n_1 n_2 n_3 \dots | n'_1 n'_2 n'_3 \dots \rangle = \prod_{i=1}^{\infty} \delta_{n_i n'_i}$$

De tijdsafhankelijke toestandsvector is gegeven door

$$\Psi(t) = \sum_{n_1 n_2 \dots} c_{n_1 n_2 \dots}(t) |n_1 n_2 \dots\rangle$$

De coëfficiënten  $c$  zijn als volgt te interpreteren:  $|c_{n_1 n_2 \dots}(t)|^2$  is de kans op  $n_1$  deeltjes met impuls  $\vec{k}_1$ ,  $n_2$  deeltjes met impuls  $\vec{k}_2$ , etc., en  $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \sum |c_{n_i}(t)|^2 = 1$ . De tijdsontwikkeling van de toestanden wordt gegeven door de Schrödingervergelijking

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

waarin  $H = H_0 + H_{\text{int}}$ .  $H_0$  is de Hamiltoniaan voor vrije deeltjes en laat  $|c_{n_i}(t)|^2$  constant,  $H_{\text{int}}$  is de interactie Hamiltoniaan en kan de ene  $c^2$  laten aangroeien ten koste van anderen.

Alle operatoren die bezettingsgetallen kunnen veranderen kunnen worden uitgedrukt in de basisoperatoren  $a$  en  $a^\dagger$ .  $a$  is de *annihilatieoperator* en  $a^\dagger$  de *creatieoperator*, en:

$$\begin{aligned} a(\vec{k}_i) |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle \\ a^\dagger(\vec{k}_i) |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle \end{aligned}$$

vanwege de normering geldt  $a|0\rangle = 0$  en  $a(\vec{k}_i) a^\dagger(\vec{k}_i) |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle$ .  $aa^\dagger$  is dus een bezettingsgetaloperator. De volgende commutatierelaties zijn af te leiden:

$$[a(\vec{k}_i), a(\vec{k}_j)] = 0, \quad [a^\dagger(\vec{k}_i), a^\dagger(\vec{k}_j)] = 0, \quad [a(\vec{k}_i), a^\dagger(\vec{k}_j)] = \delta_{ij}$$

Voor vrije spin-0 deeltjes geldt dus:  $H_0 = \sum_i a^\dagger(\vec{k}_i) a(\vec{k}_i) \hbar \omega_{k_i}$

### 15.2 Klassieke en quantumvelden

Uitgegaan wordt van een reëel veld  $\Phi^\alpha(x)$  (complexe velden zijn te splitsen in een reëel en imaginair deel). De *Lagrange-dichtheid*  $\mathcal{L}$  is een functie van  $x = (\vec{x}, ict)$  via de velden:  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\Phi^\alpha(x), \partial_\nu \Phi^\alpha(x))$ . De lagrangiaan is gegeven door  $L = \int \mathcal{L}(x) d^3x$ . Uitgaande van het variatieprincipe  $\delta I(\Omega) = 0$ , is met de actie-integraal  $I(\Omega) = \int \mathcal{L}(\Phi^\alpha, \partial_\nu \Phi^\alpha) d^4x$  de veldvergelijking af te leiden:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi^\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\nu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\nu \Phi^\alpha)} = 0$$

Het *geconjugeerde veld* is, in analogie met de impuls in de klassieke mechanica, gedefinieerd als

$$\Pi^\alpha(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}^\alpha}$$

Hiermee wordt de Hamiltondichtheid  $\mathcal{H}(x) = \Pi^\alpha \dot{\Phi}^\alpha - \mathcal{L}(x)$ .

Quantisatie van een klassiek veld gaat analoog aan quantisatie in de puntmassa mechanica: de veldfuncties worden beschouwd als operatoren die voldoen aan bepaalde commutatierelaties:

$$[\Phi^\alpha(\vec{x}), \Phi^\beta(\vec{x}')] = 0, \quad [\Pi^\alpha(\vec{x}), \Pi^\beta(\vec{x}')] = 0, \quad [\Phi^\alpha(\vec{x}), \Pi^\beta(\vec{x}')] = i\delta_{\alpha\beta}(\vec{x} - \vec{x}')$$

### 15.3 Het interactie beeld

Er zijn diverse equivalente formuleringen van de quantummechanica mogelijk:

1. Schrödinger beeld: tijdafhankelijke toestanden, tijdonafhankelijke operatoren.
2. Heisenberg beeld: tijdonafhankelijke toestanden, tijdafhankelijke operatoren.
3. Interactie beeld: tijdafhankelijke toestanden, tijdafhankelijke operatoren.

Het interactiebeeld kan uit het Schrödingerbeeld worden verkregen via een unitaire transformatie:

$$|\Phi(t)\rangle = e^{iH_0^S} |\Phi^S(t)\rangle \quad \text{en} \quad O(t) = e^{iH_0^S} O^S e^{-iH_0^S}$$

De index  $S$  geeft hier het Schrödinger beeld weer. Hieruit volgt

$$i \frac{d}{dt} |\Phi(t)\rangle = H_{\text{int}}(t) |\Phi(t)\rangle \quad \text{en} \quad i \frac{d}{dt} O(t) = [O(t), H_0]$$

### 15.4 Reëel scalair veld in het interactie beeld

Men kan eenvoudig afleiden dat geldt (met  $M := m_0^2 c^2 / \hbar^2$ )

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi(x) = \Pi(x) \quad \text{en} \quad \frac{\partial}{\partial t} \Pi(x) = (\nabla^2 - M^2) \Phi(x)$$

Hieruit volgt dat  $\Phi$  aan de Klein-Gordon vergelijking  $(\square - M^2)\Phi = 0$  voldoet. Met de definitie  $k_0^2 = \vec{k}^2 + M^2 := \omega_k^2$  en schrijfwijze  $\vec{k} \cdot \vec{x} - ik_0 t := kx$  is de algemene oplossing hiervan gegeven door:

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left( a(\vec{k}) e^{ikx} + a^\dagger(\vec{k}) e^{-ikx} \right), \quad \Pi(x) = \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \sqrt{\frac{1}{2}\omega_k} \left( -a(\vec{k}) e^{ikx} + a^\dagger(\vec{k}) e^{-ikx} \right)$$

De veldoperatoren bevatten een volume  $V$ , dat als normeringsfactor dient. Men kan meestal de limiet  $V \rightarrow \infty$  nemen.

Het geldt algemeen dat de term met  $e^{-ikx}$ , het positieve frequentiedeel, het creatiedeel is, en dat het negatieve frequentiedeel het annihilatiedeel is.

Omdat  $\Phi$  hermitisch is moeten de coëfficiënten elkaars hermitisch toegevoegde zijn. Omdat  $\Phi$  slechts één component heeft is dit te interpreteren als een veld dat een deeltje met spin 0 beschrijft. Hieruit volgt dat de commutatierelaties voldoen aan  $[\Phi(x), \Phi(x')] = i\Delta(x - x')$  met

$$\Delta(y) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\sin(ky)}{\omega_k} d^3 k$$

$\Delta(y)$  is een oneven functie die invariant is onder eigenlijke Lorentztransformaties (geen spiegelingen). Dit is consistent met het eerder gevonden resultaat  $[\Phi(\vec{x}, t), \Phi(\vec{x}', t)] = 0$ . In het algemeen geldt dat  $\Delta(y) = 0$  buiten de lichtkegel. Hieruit volgt dat aan het localiteitspostulaat voldaan is.

De Lagrangedichtheid is gegeven door  $\mathcal{L}(\Phi, \partial_\nu \Phi) = -\frac{1}{2}(\partial_\nu \Phi \partial_\nu \Phi + m^2 \Phi^2)$ . De energieoperator is gegeven door:

$$H = \int \mathcal{H}(x) d^3 x = \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_k a^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k})$$

## 15.5 Geladen spin-0 deeltjes, ladingsbehoud

De Lagrange dichtheid van geladen spin-0 deeltjes is gegeven door:  $\mathcal{L} = -(\partial_\nu \Phi \partial_\nu \Phi^* + M^2 \Phi \Phi^*)$ .

Het theorema van Noether geeft een verband tussen een continue symmetrie van  $\mathcal{L}$  en een additieve behoudswet. Stel dat geldt  $\mathcal{L}((\Phi^\alpha)', \partial_\nu(\Phi^\alpha)') = \mathcal{L}(\Phi^\alpha, \partial_\nu \Phi^\alpha)$  en dat er een continue transformatie bestaat tussen  $\Phi^\alpha$  en  $\Phi^{\alpha'}$  van de vorm:  $\Phi^{\alpha'} = \Phi^\alpha + \epsilon f^\alpha(\Phi)$ . Dan geldt

$$\frac{\partial}{\partial x_\nu} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu \Phi^\alpha)} f^\alpha \right) = 0$$

Dit is een continuïteitsvergelijking  $\Rightarrow$  behoudswet. Wat er behouden is, hangt af van de symmetrie. De bovenstaande Lagrangedichtheid is invariant onder een faseverandering  $\Phi \rightarrow \Phi e^{i\theta}$ : een globale ijktransformatie. De behouden grootheid is de stroomdichtheid  $J_\mu(x) = -ie(\Phi \partial_\mu \Phi^* - \Phi^* \partial_\mu \Phi)$ . Omdat deze grootheid 0 is voor reële velden is een complex veld nodig voor geladen deeltjes. Wanneer dit veld gequantiseerd wordt, worden de veldoperatoren gegeven door

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left( a(\vec{k}) e^{ikx} + b^\dagger(\vec{k}) e^{-ikx} \right) \quad \text{en} \quad \Phi^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left( a^\dagger(\vec{k}) e^{ikx} + b(\vec{k}) e^{-ikx} \right)$$

De energie operator is gegeven door:

$$H = \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_k \left( a^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k}) + b^\dagger(\vec{k}) b(\vec{k}) \right)$$

en de ladingsoperator volgt uit:

$$Q(t) = -i \int J_4(x) d^3x \Rightarrow Q = \sum_{\vec{k}} e \left( a^\dagger(\vec{k}) a(\vec{k}) - b^\dagger(\vec{k}) b(\vec{k}) \right)$$

Hieruit volgt dat  $a^\dagger a := N_+(\vec{k})$  een bezettingsgetaloperator is voor deeltjes met positieve lading en  $b^\dagger b := N_-(\vec{k})$  een bezettingsgetaloperator voor negatief geladen deeltjes.

## 15.6 Veldfuncties voor spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes

Spin wordt gedefinieerd aan de hand van het gedrag van de oplossingen  $\psi$  van de Diracvergelijking. Voor een *scalair* veld  $\Phi$  geldt, dat als het voldoet aan de Klein-Gordon vergelijking, dan ook het gerooteerde veld  $\tilde{\Phi}(x) := \Phi(\Lambda^{-1}x)$  voldoet.  $\Lambda$  staat voor 4-dimensionale draaiingen: de eigenlijke Lorentztransformaties. Dit is te schrijven als:

$$\tilde{\Phi}(x) = \Phi(x) e^{-i\vec{n} \cdot \vec{L}} \quad \text{met} \quad L_{\mu\nu} = -i\hbar \left( x_\mu \frac{\partial}{\partial x_\nu} - x_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right)$$

Voor  $\mu \leq 3, \nu \leq 3$  komt dit neer op rotaties, voor  $\nu = 4, \mu \neq 4$  op Lorentztransformaties.

Een gerooteerd veld  $\tilde{\psi}$  voldoet weer aan de Diracvergelijking als geldt:  $\tilde{\psi}(x) = D(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x)$ . Dit geeft de eis  $D^{-1}\gamma_\lambda D = \Lambda_{\lambda\mu}\gamma_\mu$ . Men vindt:  $D = e^{i\vec{n} \cdot \vec{S}}$  met  $S_{\mu\nu} = -i\frac{1}{2}\hbar\gamma_\mu\gamma_\nu$ . Dus:

$$\tilde{\psi}(x) = e^{-i(S+L)}\psi(x) = e^{-iJ}\psi(x)$$

De oplossingen van de Diracvergelijking zijn nu gegeven door

$$\psi(x) = u_\pm^r(\vec{p}) e^{-i(\vec{p} \cdot \vec{x} \pm Et)}$$

Hierin is  $r$  een indicatie voor de richting van de spin, en  $\pm$  geeft het teken van de energie aan. Met de notatie  $v^r(\vec{p}) = u_-^r(-\vec{p})$  en  $u^r(\vec{p}) = u_+^r(\vec{p})$  is voor de inproducten van deze spinoren te schrijven:

$$u_+^r(\vec{p}) u_+^{r'}(\vec{p}) = \frac{E}{M} \delta_{rr'} \quad , \quad u_-^r(\vec{p}) u_-^{r'}(\vec{p}) = \frac{E}{M} \delta_{rr'} \quad , \quad u_+^r(\vec{p}) u_-^{r'}(\vec{p}) = 0$$

Vanwege de factor  $E/M$  is dit niet relativistisch invariant. Een Lorentz-invariant inproduct wordt gedefinieerd door  $\bar{a}b := a^\dagger \gamma_4 b$ , waarin  $\bar{a} := a^\dagger \gamma_4$  een rijspinor is. Hieruit volgt:

$$\overline{u^r(\vec{p})} u^{r'}(\vec{p}) = \delta_{rr'} \quad , \quad \overline{v^r(\vec{p})} v^{r'}(\vec{p}) = -\delta_{rr'} \quad , \quad \overline{u^r(\vec{p})} v^{r'}(\vec{p}) = 0$$

Combinaties van het type  $a\bar{a}$  geven een  $4 \times 4$  matrix:

$$\sum_{r=1}^2 u^r(\vec{p}) \overline{u^r(\vec{p})} = \frac{-i\gamma_\lambda p_\lambda + M}{2M} \quad , \quad \sum_{r=1}^2 v^r(\vec{p}) \overline{v^r(\vec{p})} = \frac{-i\gamma_\lambda p_\lambda - M}{2M}$$

De Lagrangedichtheid die de Diracvergelijking oplevert en de goede energienormering geeft is:

$$\mathcal{L}(x) = -\overline{\psi(x)} \left( \gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + M \right) \psi(x)$$

en de stroomdichtheid is  $J_\mu(x) = -ie\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ .

## 15.7 Quantisatie van een spin- $\frac{1}{2}$ veld

De algemene oplossing voor de veldoperatoren is nu:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{M}{V}} \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{E}} \sum_r (c_r(\vec{p}) u^r(\vec{p}) e^{ipx} + d_r^\dagger(\vec{p}) v^r(\vec{p}) e^{-ipx})$$

en

$$\overline{\psi(x)} = \sqrt{\frac{M}{V}} \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{E}} \sum_r (c_r^\dagger(\vec{p}) \overline{u^r(\vec{p})} e^{-ipx} + d_r(\vec{p}) \overline{v^r(\vec{p})} e^{ipx})$$

Hierin zijn  $c^\dagger$  en  $c$  de creatie c.q. annihilatieoperatoren voor een elektron en  $d^\dagger$  en  $d$  de creatie c.q. annihilatieoperatoren voor een positron. De energie operator is gegeven door

$$H = \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} \sum_{r=1}^2 (c_r^\dagger(\vec{p}) c_r(\vec{p}) - d_r(\vec{p}) d_r^\dagger(\vec{p}))$$

Om te voorkomen dat de energie van de positronen negatief is moeten voor de operatoren anticommutatieregels gelden i.p.v. commutatieregels:

$$[c_r(\vec{p}), c_{r'}^\dagger(\vec{p})]_+ = [d_r(\vec{p}), d_{r'}^\dagger(\vec{p})]_+ = \delta_{rr'} \delta_{pp'} \quad , \quad \text{alle andere anticommutatoren zijn } 0.$$

De veldoperatoren voldoen aan

$$[\psi_\alpha(x), \psi_\beta(x')] = 0 \quad , \quad [\overline{\psi_\alpha(x)}, \overline{\psi_\beta(x')}] = 0 \quad , \quad [\psi_\alpha(x), \overline{\psi_\beta(x')}]_+ = -iS_{\alpha\beta}(x - x')$$

$$\text{met } S(x) = \left( \gamma_\lambda \frac{\partial}{\partial x_\lambda} - M \right) \Delta(x)$$

De anticommutatieregels leveren behalve de positief-definiete energie ook het Pauli principe en de Fermi-Dirac statistiek: omdat  $c_r^\dagger(\vec{p}) c_r^\dagger(\vec{p}) = -c_r^\dagger(\vec{p}) c_r^\dagger(\vec{p})$  geldt:  $\{c_r^\dagger(\vec{p})\}^2 = 0$ . Het is blijkbaar onmogelijk om 2 elektronen te creëren met dezelfde impuls en spin toestand. Dit is het Pauli principe. Een andere manier om dit te zien is het feit dat  $\{N_r^+(\vec{p})\}^2 = N_r^+(\vec{p})$ : de bezettingsoperatoren hebben slechts eigenwaarden 0 of 1.

Om te voorkomen dat het vacuüm  $\infty$  bijdragen levert aan de energie en de lading wordt het *normaalproduct* ingevoerd. De uitdrukking voor de stroomdichtheid wordt nu  $J_\mu = -ieN(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)$ . Dit product wordt verkregen door:

- Schrijf alle velden uit in creatie en annihilatieoperatoren,
- laat alle termen staan waarin geen annihilatieoperatoren voorkomen, of waarin deze rechts van de creatieoperatoren staan,
- in alle andere termen de factoren zodanig verwisselen dat de annihilatieoperatoren rechts komen te staan. Bij verwisseling van 2 fermion operatoren – teken toevoegen, bij verwisseling van 2 bosonoperatoren niet. Hierbij alle commutatoren 0 stellen.



## 15.8 Quantisatie van het elektromagnetische veld

Er wordt uitgegaan van de Lagrange dichtheid  $\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu}$

Voor de veldoperatoren  $A(x)$  volgt nu:

$$A(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \sum_{m=1}^4 \left( a_m(\vec{k}) \epsilon^m(\vec{k}) e^{ikx} + a^\dagger(\vec{k}) \epsilon^m(\vec{k})^* e^{-ikx} \right)$$

De operatoren voldoen aan  $[a_m(\vec{k}), a_{m'}^\dagger(\vec{k}')] = \delta_{mm'} \delta_{kk'}$ . Alle andere commutatoren zijn 0.  $m$  geeft de polarisatierichting van het foton aan:  $m = 1, 2$  geeft transversaal gepolariseerde,  $m = 3$  longitudinaal gepolariseerde en  $m = 4$  tijdachtig gepolariseerde fotonen. Verder geldt dat

$$[A_\mu(x), A_\nu(x')] = i\delta_{\mu\nu} D(x-x') \text{ met } D(y) = \Delta(y)|_{m=0}$$

Ondanks het feit dat  $A_4 = iV$  klassiek imaginair is wordt  $A_4$  toch als als een hermitische operator gedefinieerd omdat het teken van de energie anders foutief wordt. Door een gewijzigde definitie van het inproduct in de toestandsruimte worden de verwachtingswaarden voor  $A_{1,2,3}(x) \in \mathbb{R}$  en voor  $A_4(x)$  imaginair.

Wanneer de Lorentz ijkconditie  $\partial_\mu A_\mu = 0$  op te leggen is aan deze potentialen zullen de hieruit afgeleide  $E$  en  $B$  operatoren aan de Maxwellvergelijkingen voldoen. Dit geeft echter problemen met de commutatieregels. Er wordt nu geëist dat slechts die toestanden toegestaan zijn waarvoor geldt dat

$$\frac{\partial A_\mu^+}{\partial x_\mu} |\Phi\rangle = 0$$

Dit heeft tot gevolg dat:

$$\left\langle \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} \right\rangle = 0.$$

Hieruit volgt  $(a_3(\vec{k}) - a_4(\vec{k})) |\Phi\rangle = 0$ . Via een lokale ijktransformatie krijgt men dan  $N_3(\vec{k}) = 0$  en  $N_4(\vec{k}) = 0$ . Dit geldt echter alleen voor vrije EM-velden: in tussentoestanden bij interacties kunnen er wel longitudinale en tijdachtige fotonen ontstaan. Deze fotonen zijn ook verantwoordelijk voor de statische Coulombpotential.

## 15.9 Wisselwerkende velden, S-matrix

De  $S$  (scattering)-matrix geeft een verband tussen begin en eindtoestand bij een reactie:  $|\Phi(\infty)\rangle = S|\Phi(-\infty)\rangle$ . Wanneer de Schrödingervergelijking wordt geïntegreerd:

$$|\Phi(t)\rangle = |\Phi(-\infty)\rangle - i \int_{-\infty}^t H_{\text{int}}(t_1) |\Phi(t_1)\rangle dt_1$$

en storingsrekening toegepast wordt, vindt men:

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int \cdots \int T \{ \mathcal{H}_{\text{int}}(x_1) \cdots \mathcal{H}_{\text{int}}(x_n) \} d^4x_1 \cdots d^4x_n \equiv \sum_{n=0}^{\infty} S^{(n)}$$

Hierin staat de  $T$ -operator voor het *tijdgeordend product*: de factoren moeten hierin geordend worden in toenemende tijdvolgorde van rechts naar links zodat de vroegste termen het eerst voorkomen. De  $S$ -matrix is nu gegeven door:  $S_{ij} = \langle \Phi_i | S | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | \Phi(\infty) \rangle$ .

De interactiehamiltondichtheid voor de wisselwerking tussen het elektromagnetische en het elektron-positron veld is:  $\mathcal{H}_{\text{int}}(x) = -J_\mu(x) A_\mu(x) = ieN(\bar{\psi} \gamma_\mu \psi A_\mu)$

Wanneer dit wordt uitgeschreven als:  $\mathcal{H}_{\text{int}} = ieN \left( (\bar{\psi}^+ + \bar{\psi}^-) \gamma_\mu (\psi^+ + \psi^-) (A_\mu^+ + A_\mu^-) \right)$

ontstaan er acht termen. Elke term correspondeert met een mogelijk proces. De term  $ie\bar{\psi}^+\gamma_\mu\psi^+A_\mu^-$  werkend op  $|\Phi\rangle$  leidt tot overgangen waarin  $A_\mu^-$  een foton creëert,  $\psi^+$  een elektron annihileert en  $\bar{\psi}^+$  een positron annihileert. Alleen die termen met het juiste aantal deeltjes in begin- en eindtoestand dragen bij aan een matrixelement  $\langle\Phi_i|S|\Phi_j\rangle$ . Verder kunnen de factoren in  $\mathcal{H}_{\text{int}}$  deeltjes creëren en weer annihileren: de *virtuele deeltjes*.

De uitdrukkingen voor  $S^{(n)}$  bevatten nu tijdgeordende producten van normaalproducten. Dit is te schrijven als een som van normaalproducten. De hierin nog voorkomende operatoren bevatten juist de minimale veranderingen die nodig zijn om van begin- naar eindtoestand te komen. De effecten van de virtuele deeltjes zitten nu in de (anti)commutatorfuncties. Enkele tijdgeordende producten zijn:

$$\begin{aligned} T\{\Phi(x)\Phi(y)\} &= N\{\Phi(x)\Phi(y)\} + \frac{1}{2}\Delta^F(x-y) \\ T\{\psi_\alpha(x)\bar{\psi}_\beta(y)\} &= N\{\psi_\alpha(x)\bar{\psi}_\beta(y)\} - \frac{1}{2}S_{\alpha\beta}^F(x-y) \\ T\{A_\mu(x)A_\nu(y)\} &= N\{A_\mu(x)A_\nu(y)\} + \frac{1}{2}\delta_{\mu\nu}D_{\mu\nu}^F(x-y) \end{aligned}$$

Hierin is  $S^F(x) = (\gamma_\mu\partial_\mu - M)\Delta^F(x)$ ,  $D^F(x) = \Delta^F(x)|_{m=0}$  en

$$\Delta^F(x) = \begin{cases} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{ikx}}{\omega_{\vec{k}}} d^3k & \text{als } x_0 > 0 \\ \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{-ikx}}{\omega_{\vec{k}}} d^3k & \text{als } x_0 < 0 \end{cases}$$

De term  $\frac{1}{2}\Delta^F(x-y)$  noemt men ook wel de contractie van  $\Phi(x)$  en  $\Phi(y)$ , en is de verwachtingswaarde van het tijdgeordend product in de vacuümtoestand. Het theorema van Wick geeft een uitdrukking voor het tijdgeordend product van een willekeurig aantal veldoperatoren. De grafische voorstelling van deze processen noemt men *Feynmandiagrammen*. In de  $x$ -representatie bevat elk diagram een aantal processen. De contractiefuncties kan men ook schrijven als

$$\Delta^F(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-2i}{(2\pi)^4} \int \frac{e^{ikx}}{k^2 + m^2 - i\epsilon} d^4k \quad \text{en} \quad S^F(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-2i}{(2\pi)^4} \int e^{ipx} \frac{i\gamma_\mu p_\mu - M}{p^2 + M^2 - i\epsilon} d^4p$$

In de uitdrukkingen voor  $S^{(2)}$  leidt dit tot termen  $\delta(p+k-p'-k')$ . Dit betekent dat er aan energie en impulsbehoud voldaan is. Virtuele deeltjes hoeven echter niet aan de relatie tussen energie en impuls te voldoen.

## 15.10 Divergenties en renormalisatie

Hogere orde bijdragen blijken  $\infty$  bijdragen op te leveren omdat van virtuele deeltjes alleen de som  $p+k$  van de 4-impulsen vastligt. Er resteert dan een integratie over een van beide die  $\infty$  is. In de  $x$ -representatie kan men dit zien doordat het product van 2 functies die  $\delta$ -achtige singulariteiten bevatten niet goed gedefinieerd is. Men lost dit op door alle divergente diagrammen te verdisconteren in een renormalisatie van  $e$  en  $M$ . Men neemt aan dat het elektron, als er geen elektromagnetisch veld zou bestaan, een massa  $M_0$  en lading  $e_0$  zou hebben,  $\neq$  waargenomen massa  $M$  en lading  $e$ . In de Hamilton- en Lagrangedichtheid van het vrije elektron-positron veld komt dan  $M_0$  voor. Dit geeft dus, met  $M = M_0 + \Delta M$ :

$$\mathcal{L}_{e-p}(x) = -\bar{\psi}(x)(\gamma_\mu\partial_\mu + M_0)\psi(x) = -\bar{\psi}(x)(\gamma_\mu\partial_\mu + M)\psi(x) + \Delta M\bar{\psi}(x)\psi(x)$$

en  $\mathcal{H}_{\text{int}} = ieN(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi A_\mu) - i\Delta eN(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi A_\mu)$ .

## 15.11 Classificatie van elementaire deeltjes

Elementaire deeltjes zijn onder te verdelen in:

1. **Hadronen:** deze bestaan uit quarks, en zijn onder te verdelen in:

I. **Baryonen:** deze bestaan uit 3 quarks óf uit 3 antiquarks.

II. **Mesonen:** deze bestaan uit een quark én een antiquark.

2. **Leptonen:**  $e^\pm, \mu^\pm, \tau^\pm, \nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau, \bar{\nu}_e, \bar{\nu}_\mu, \bar{\nu}_\tau$ .

3. **Veldquanta:**  $\gamma, W^\pm, Z^0$ , gluonen, gravitonen (?).

4. **Higgs deeltje:**  $\phi$ .

Een overzicht van deeltjes en de bijbehorende antideeltjes is gegeven in de volgende tabel:

Deeltje	spin ( $\hbar$ )	B	L	T	$T_3$	S	C	$B^*$	lading ( $e$ )	$m_0$ (MeV)	antideeltje
u	1/2	1/3	0	1/2	1/2	0	0	0	+2/3	5	$\bar{u}$
d	1/2	1/3	0	1/2	-1/2	0	0	0	-1/3	9	$\bar{d}$
s	1/2	1/3	0	0	0	-1	0	0	-1/3	175	$\bar{s}$
c	1/2	1/3	0	0	0	0	1	0	+2/3	1350	$\bar{c}$
b	1/2	1/3	0	0	0	0	0	-1	-1/3	4500	$\bar{b}$
t	1/2	1/3	0	0	0	0	0	0	+2/3	173000	$\bar{t}$
$e^-$	1/2	0	1	0	0	0	0	0	-1	0,511	$e^+$
$\mu^-$	1/2	0	1	0	0	0	0	0	-1	105,658	$\mu^+$
$\tau^-$	1/2	0	1	0	0	0	0	0	-1	1777,1	$\tau^+$
$\nu_e$	1/2	0	1	0	0	0	0	0	0	0(?)	$\bar{\nu}_e$
$\nu_\mu$	1/2	0	1	0	0	0	0	0	0	0(?)	$\bar{\nu}_\mu$
$\nu_\tau$	1/2	0	1	0	0	0	0	0	0	0(?)	$\bar{\nu}_\tau$
$\gamma$	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$\gamma$
gluon	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	gluon
$W^+$	1	0	0	0	0	0	0	0	+1	80220	$W^-$
Z	1	0	0	0	0	0	0	0	0	91187	Z
graviton	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	graviton
Higgs	0	0	0	0	0	0	0	0	0	125600	Higgs

Waarin B het baryongetal is en L het leptongetal. Er blijken 3 afzonderlijke leptongetallen te bestaan voor  $e$ ,  $\mu$  en  $\tau$ , die elk behouden zijn. T is de isospin,  $T_3$  de projectie van de isospin op de 3e as, C de charmness, S de strangeness en  $B^*$  de bottomness. De antideeltjes hebben quantumgetallen met tegengesteld teken, behalve voor de totale isospin T. De volgende tabel geeft de quarksamenstelling van verschillende hadronen en de massa van de niet-aangeslagen toestanden in MeV:

$\pi^0$	$\frac{1}{2}\sqrt{2}(u\bar{u}+d\bar{d})$	134,9764	$J/\Psi$	$c\bar{c}$	3096,8	$\bar{\Sigma}^+$	$\bar{d}\bar{d}\bar{s}$	1197,436
$\pi^+$	$u\bar{d}$	139,56995	$\Upsilon$	$b\bar{b}$	9460,37	$\Xi^0$	$u\ s\ s$	1314,9
$\pi^-$	$d\bar{u}$	139,56995	$p^+$	$u\ u\ d$	938,27231	$\bar{\Xi}^0$	$\bar{u}\ \bar{s}\ \bar{s}$	1314,9
$K^0$	$s\bar{d}$	497,672	$p^-$	$\bar{u}\ \bar{u}\ \bar{d}$	938,27231	$\Xi^-$	$d\ s\ s$	1321,32
$K^0$	$d\bar{s}$	497,672	$n^0$	$u\ d\ d$	939,56563	$\Xi^+$	$\bar{d}\ \bar{s}\ \bar{s}$	1321,32
$K^+$	$u\bar{s}$	493,677	$\bar{n}^0$	$\bar{u}\ \bar{d}\ \bar{d}$	939,56563	$\Omega^-$	$s\ s\ s$	1672,45
$K^-$	$s\bar{u}$	493,677	$\Lambda$	$u\ d\ s$	1115,684	$\Omega^+$	$\bar{s}\ \bar{s}\ \bar{s}$	1672,45
$D^+$	$c\bar{d}$	1869,4	$\bar{\Lambda}$	$\bar{u}\ \bar{d}\ \bar{s}$	1115,684	$\Lambda_c^+$	$u\ d\ c$	2285,1
$D^-$	$d\bar{c}$	1869,4	$\Sigma^+$	$u\ u\ s$	1189,37	$\Delta^{2-}$	$\bar{u}\ \bar{u}\ \bar{u}$	1232,0
$D^0$	$c\bar{u}$	1864,6	$\bar{\Sigma}^-$	$\bar{u}\ \bar{u}\ \bar{s}$	1189,37	$\Delta^{2+}$	$u\ u\ u$	1232,0
$D^0$	$u\bar{c}$	1864,6	$\Sigma^0$	$u\ d\ s$	1192,55	$\Delta^+$	$u\ u\ d$	1232,0
$F^+$	$c\bar{s}$	1969,0	$\Sigma^0$	$\bar{u}\ \bar{d}\ \bar{s}$	1192,55	$\Delta^0$	$u\ d\ d$	1232,0
$F^-$	$s\bar{c}$	1969,0	$\Sigma^-$	$d\ d\ s$	1197,436	$\Delta^-$	$d\ d\ d$	1232,0

Verder kan elke quark nog in 2 spintoestanden voorkomen. Mesonen zijn dus bosonen met spin 0 of 1 in de grondtoestand. Baryonen zijn fermionen met spin  $\frac{1}{2}$  of  $\frac{3}{2}$  in de grondtoestand. Sommige aangeslagen toestanden hebben een hogere interne L. Neutrino's hebben altijd een heliceit van  $-\frac{1}{2}$  terwijl de heliceit van antineutrino's altijd  $+\frac{1}{2}$  is.

De quantumgetallen zijn aan behoudswetten onderhevig. Deze zijn met het theorema van Noether af te leiden uit symmetrieën in de Lagrangedichtheid: continue symmetrieën leiden tot additieve behoudswetten, discrete symmetrieën tot multiplicatieve behoudswetten.

De *geometrische behoudswetten* zijn invariant onder Lorentztransformaties én de CPT-operatie:

1. Massa/energie, vanwege de invariantie van natuurwetten onder translatie in de tijd.
2. Impuls, vanwege de invariantie van natuurwetten onder translatie.
3. Impulsmoment, vanwege de invariantie van natuurwetten onder rotatie.

De *dynamische behoudswetten* zijn invariant onder de CPT-operatie:

1. Elektrische lading, vanwege de invariantie van de Maxwellvergelijkingen onder ijktransformaties.
2. Kleurlading is behouden.
3. Isospin, vanwege de invariantie van de QCD bij rotaties in de T-ruimte.
4. Baryongetal en leptongetal zijn behouden, maar niet onder een eventuele SU(5) symmetrie van natuurwetten.
5. Quarksmaak is alleen onder de interacties van de QCD behouden.
6. Pariteit, maar de pariteit is niet behouden onder de interacties van de zwakke wisselwerking.

De elementaire deeltjes zijn in 3 generaties onder te verdelen:

	leptonen	quarks	antileptonen	antiquarks
1e generatie	$e^-$ $\nu_e$	d u	$e^+$ $\bar{\nu}_e$	$\bar{d}$ $\bar{u}$
2e generatie	$\mu^-$ $\nu_\mu$	s c	$\mu^+$ $\bar{\nu}_\mu$	$\bar{s}$ $\bar{c}$
3e generatie	$\tau^-$ $\nu_\tau$	b t	$\tau^+$ $\bar{\nu}_\tau$	$\bar{b}$ $\bar{t}$

De quarks komen weer voor in elk 3 kleuren, maar vanwege *confinement* zijn die niet los waar te nemen. De kleurkracht neemt *niet* af met de afstand. Wanneer men een (anti)quark los probeert te maken uit een hadron zal op een gegeven moment de potentiële energie hoog genoeg zijn om een quark-antiquark paar te creëren. Het resultaat zijn 2 hadronen i.p.v. een hadron en een los (anti)quark.

## 15.12 P en CP-schending

Het blijkt dat onder de zwakke wisselwerking de P-symmetrie, en zelfs de CP-symmetrie niet behouden is. Enkele processen waarbij de P symmetrie niet behouden is, maar de combinatie CP wél, zijn:

1.  $\mu^-$ -verval:  $\mu^- \rightarrow e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e$ . Linkshandige elektronen komen meer dan  $1000\times$  zo vaak voor als rechtshandige.
2.  $\beta$ -verval van spingepolariseerd  $^{60}\text{Co}$ :  $^{60}\text{Co} \rightarrow ^{60}\text{Ni} + e^- + \bar{\nu}_e$ . Er ontstaan meer elektronen met de spin parallel aan het Co dan antiparallel: (parallel-antiparallel)/(totaal)=20%.
3. Er is geen verband met het neutrino: het verval van het  $\Lambda$  deeltje via:  $\Lambda \rightarrow p^+ + \pi^-$  en  $\Lambda \rightarrow n^0 + \pi^0$  vertoont dit effect ook.

De CP-symmetrie blijkt niet behouden bij het verval van neutrale Kaonen. Dit zijn de laagst mogelijke toestanden die een s-quark bevatten en kunnen dus alleen zwak vervallen. Er geldt:  $C|K^0\rangle = \eta|\bar{K}^0\rangle$  met  $\eta$  een fasefactor. Verder is  $P|K^0\rangle = -|K^0\rangle$  omdat  $K^0$  en  $\bar{K}^0$  intrinsieke pariteit  $-1$  hebben. Hieruit volgt dat  $K^0$  en  $\bar{K}^0$  géén eigentoestanden van CP zijn:  $CP|K^0\rangle = |\bar{K}^0\rangle$ . De lineaire combinaties

$$|K_1^0\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle) \quad \text{en} \quad |K_2^0\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle)$$

zijn wel eigentoestanden van CP:  $CP|K_1^0\rangle = +|K_1^0\rangle$  en  $CP|K_2^0\rangle = -|K_2^0\rangle$ . Bij het beschrijven van zwakke processen is een basis van  $K_1^0$  en  $K_2^0$  handig. Voor kleurinteracties is een basis van  $K^0$  en  $\bar{K}^0$  handig omdat dan aantal u-aantal  $\bar{u}$  constant is. Bij zwak verval dient men het expansiepostulaat toe te passen:

$$|K^0\rangle = \frac{1}{2}(\langle K_1^0|K^0\rangle + \langle K_2^0|K^0\rangle)$$

De kans op een eindtoestand met  $CP = -1$  is  $\frac{1}{2} |\langle K_2^0 | K^0 \rangle|^2$ , de kans op  $CP = +1$  verval is  $\frac{1}{2} |\langle K_1^0 | K^0 \rangle|^2$ .

De relatie tussen de massa eigenwaarden van de quarks (ongeachteerd) en de velden die in de zwakke stromen voorkomen (geaccentueerd) is  $(u', c', t') = (u, c, t)$ , en:

$$\begin{pmatrix} d' \\ s' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_2 & \sin \theta_2 \\ 0 & -\sin \theta_2 & \cos \theta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\delta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_1 & \sin \theta_1 & 0 \\ -\sin \theta_1 & \cos \theta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_3 & \sin \theta_3 \\ 0 & -\sin \theta_3 & \cos \theta_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ s \\ b \end{pmatrix}$$

Hierin is  $\theta_1 \equiv \theta_C$  de Cabibbo hoek:  $\sin(\theta_C) \approx 0,23 \pm 0,01$ .

## 15.13 Het standaardmodel

Wanneer men de Lagrangedichtheid die een veld beschrijft invariant wil maken voor lokale ijktransformaties uit een bepaalde groep dient men hierin de transformatie

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \rightarrow \frac{D}{Dx_\mu} = \frac{\partial}{\partial x_\mu} - i \frac{g}{\hbar} L_k A_\mu^k$$

uit te voeren. Hierin zijn  $L_k$  de generatoren van de ijkgroep (de ‘‘ladingen’’) en  $A_\mu^k$  de ijkvelden.  $g$  is de betreffende koppelingsconstante. De Lagrangedichtheid voor een scalair veld is dan gegeven door

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} (D_\mu \Phi^* D^\mu \Phi + M^2 \Phi^* \Phi) - \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu}$$

waarin de veldtensoren gegeven zijn door:  $F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g c_{lm}^a A_\mu^l A_\nu^m$ .

### 15.13.1 De elektrozwakke theorie

De elektrozwakke interactie wordt veroorzaakt door de noodzaak de Lagrangedichtheid invariant te maken onder lokale ijktransformaties van de groep  $SU(2) \otimes U(1)$ . Omdat de zwakke wisselwerking de pariteit niet behoudt worden linkshandige en rechtshandige spintoestanden van de leptonen verschillend behandeld. Wanneer een vijfde Dirac matrix gedefinieerd is door:

$$\gamma_5 := \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 = - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

zijn de links- en rechtshandige oplossingen van de Diracvergelijking voor neutrino's gegeven door:

$$\psi_L = \frac{1}{2} (1 + \gamma_5) \psi \quad \text{en} \quad \psi_R = \frac{1}{2} (1 - \gamma_5) \psi$$

Het blijkt dat neutrino's altijd linkshandig zijn en antineutrino's altijd rechtshandig. De hyperlading  $Y$ , voor quarks gegeven door  $Y = B + S + C + B^* + T'$ , is gedefinieerd door:

$$Q = \frac{1}{2} Y + T_3$$

dan geldt  $[Y, T_k] = 0$ . Als symmetriegroep neemt men nu de groep  $U(1)_Y \otimes SU(2)_T$ , waarvan de generatoren commuteren. De multipletten van deze groep worden ingedeeld als volgt:

	$e_R^-$	$\nu_{eL}$	$e_L^-$	$u_L$	$d_L'$	$u_R$	$d_R$
$T$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
$T_3$	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0
$Y$	-2	-1	-1	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$	$-\frac{2}{3}$

Men koppelt nu 1 veld  $B_\mu(x)$  aan ijkgroep U(1) en 3 ijkvelden  $\vec{A}_\mu(x)$  aan ijkgroep SU(2). De totale Lagrangedichtheid (minus de veldtermen) voor het elektron-fermionveld wordt nu:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{0,EZ} = & -(\overline{\psi_{\nu e,L}}, \overline{\psi_{eL}})\gamma^\mu \left( \partial_\mu - i\frac{g}{\hbar}\vec{A}_\mu \cdot (\tfrac{1}{2}\vec{\sigma}) - \tfrac{1}{2}i\frac{g'}{\hbar}B_\mu \cdot (-1) \right) \begin{pmatrix} \psi_{\nu e,L} \\ \psi_{eL} \end{pmatrix} - \\ & \overline{\psi_{eR}}\gamma^\mu \left( \partial_\mu - \tfrac{1}{2}i\frac{g'}{\hbar}(-2)B_\mu \right) \psi_{eR} \end{aligned}$$

Hierin zijn  $\frac{1}{2}\vec{\sigma}$  de generatoren van de isospin  $T$  en  $-1$  en  $-2$  zijn de generatoren van  $Y$ .

### 15.13.2 Spontane symmetriebreking: het Higgs mechanisme

In het bovenstaande zijn de leptonen en veldquanta alle massaloos. Zij krijgen hun massa (waarschijnlijk) via het mechanisme van *spontane symmetriebreking*. Dit houdt in dat de dynamische vergelijkingen van een systeem een symmetrie bezitten die de grondtoestand van dat systeem niet vertoont. Men veronderstelt dat er een isospin-doublet van scalaire velden  $\Phi$  bestaat met elektrische ladingen  $+1$  en  $0$  en potentiaal  $V(\Phi) = -\mu^2\Phi^*\Phi + \lambda(\Phi^*\Phi)^2$ . Hun antideeltjes hebben ladingen  $-1$  en  $0$ . Verder zijn de extra termen in  $\mathcal{L}$  die hiermee corresponderen,  $\mathcal{L}_H = (D_{L\mu}\Phi)^*(D_{L\mu}\Phi) - V(\Phi)$ , globaal U(1) $\otimes$ SU(2) symmetrisch. De toestand met de laagste energie correspondeert dus met de toestand dat  $\Phi^*(x)\Phi(x) = v = \mu^2/2\lambda = \text{constant}$ . Het veld kan dan worden geschreven ( $\omega^\pm$  en  $z$  zijn weg te transformeren Nambu-Goldstone bosonen en  $m_\phi = \mu\sqrt{2}$ ) als:

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi^+ \\ \Phi^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\omega^+ \\ (v + \phi - iz)/\sqrt{2} \end{pmatrix} \text{ en } \langle 0|\Phi|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ v/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Door deze verwachtingswaarde  $\neq 0$  wordt wel de SU(2) symmetrie maar niet de U(1) symmetrie gebroken. Wanneer de ijkvelden in de nu ontstane Lagrangedichtheid worden ontkoppeld volgt:

$$\begin{aligned} W_\mu^- &= \tfrac{1}{2}\sqrt{2}(A_\mu^1 + iA_\mu^2), \quad W_\mu^+ = \tfrac{1}{2}\sqrt{2}(A_\mu^1 - iA_\mu^2) \\ Z_\mu &= \frac{gA_\mu^3 - g'B_\mu}{\sqrt{g^2 + g'^2}} \equiv A_\mu^3 \cos(\theta_W) - B_\mu \sin(\theta_W) \\ A_\mu &= \frac{g'A_\mu^3 + gB_\mu}{\sqrt{g^2 + g'^2}} \equiv A_\mu^3 \sin(\theta_W) + B_\mu \cos(\theta_W) \end{aligned}$$

waarin  $\theta_W$  de *Weinberg hoek* heet, waarvoor geldt  $\sin^2(\theta_W) = 0,255 \pm 0,010$ . Uit de overblijvende termen volgt voor de massa's van de veldquanta:  $M_W = \frac{1}{2}vg$  en  $M_Z = \frac{1}{2}v\sqrt{g^2 + g'^2}$ , terwijl voor de elementaire lading geldt:  $e = \frac{gg'}{\sqrt{g^2 + g'^2}} = g' \cos(\theta_W) = g \sin(\theta_W)$

Experimenteel vindt men dat  $M_W = 80,22 \pm 0,26 \text{ GeV}/c^2$  en  $M_Z = 91,187 \pm 0,007 \text{ GeV}/c^2$ . Volgens de elektrozwakke theorie zou dit moeten zijn  $M_W = 83,0 \pm 0,24 \text{ GeV}/c^2$  en  $M_Z = 93,8 \pm 2,0 \text{ GeV}/c^2$ .

### 15.13.3 De quantumchromodynamica

De wisselwerking tussen gekleurde deeltjes wordt veroorzaakt doordat de Lagrangedichtheid invariant is onder de SU(3) transformaties van de kleurwisselwerking. Men kan nu twee soorten deeltjes onderscheiden:

1. ‘‘Witte’’ deeltjes: deze hebben geen kleurlading, de generator  $\vec{T} = 0$ .
2. ‘‘Gekleurde’’ deeltjes: de generatoren  $\vec{T}$  zijn  $8 \times 3 \times 3$  matrices. Er zijn 3 kleuren en 3 antikleuren.

De Lagrangedichtheid voor gekleurde deeltjes is gegeven door

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = i \sum_k \overline{\Psi}_k \gamma^\mu D_\mu \Psi_k + \sum_{k,l} \overline{\Psi}_k M_{kl} \Psi_l - \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu}$$

Omdat deze Lagrangedichtheid geen spinloze deeltjes bevat blijven de gluonen massaloos. Omdat de links- en rechtshandige quarks nu tot hetzelfde multiplet behoren kan men een massaterm invoeren. Deze is in de vorm  $M_{kl} = m_k \delta_{kl}$  te brengen.

## 15.14 Padintegralen

De tijdontwikkeling van een quantummechanisch systeem is, behalve met de Schrödingervergelijking, ook te beschrijven met een *padintegraal* (Feynman):

$$\psi(x', t') = \int F(x', t', x, t) \psi(x, t) dx$$

waarin de  $F(x', t', x, t)$  de waarschijnlijkheidsamplitude is om een systeem op tijdstip  $t'$  in  $x'$  te vinden als het op  $t$  in  $x$  was. Er geldt dat

$$F(x', t', x, t) = \int \exp\left(\frac{iS[x]}{\hbar}\right) d[x]$$

waarin  $S[x]$  de actie-integraal is:  $S[x] = \int L(x, \dot{x}, t) dt$ . De notatie  $d[x]$  betekent dat men de integraal over alle mogelijke paden  $[x]$  moet nemen:

$$\int d[x] := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \prod_n \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx(t_n) \right\}$$

Hierin is  $N$  een normeringsconstante. Bij elk pad hoort een waarschijnlijkheidsamplitude  $\exp(iS/\hbar)$ . De klassieke limiet wordt gevonden door  $\delta S = 0$  te stellen: de  $e$ -macht middelt uit, behalve waar hij stationair is. In de quantumveldentheorie wordt de kans op de overgang van een veldoperator  $\Phi(\vec{x}, -\infty)$  naar  $\Phi'(\vec{x}, \infty)$  gegeven door

$$F(\Phi'(\vec{x}, \infty), \Phi(\vec{x}, -\infty)) = \int \exp\left(\frac{iS[\Phi]}{\hbar}\right) d[\Phi]$$

met de actie-integraal

$$S[\Phi] = \int_{\Omega} \mathcal{L}(\Phi, \partial_{\nu}\Phi) d^4x$$

## 15.15 Unificatie en quantumgravitatie

De sterkte van de verschillende krachten varieert met de energie, en de reciproke koppelingsconstanten naderen elkaar bij toenemende energie. Het  $SU(5)$  model voorspelt volledige unificatie van de elektromagnetische, zwakke en kleurkrachten bij  $10^{15}$  GeV. Ze voorspelt nog 12 extra X bosonen die leptonen en quarks koppelen en die o.a. kunnen zorgen voor protonverval met als dominant kanaal  $p^+ \rightarrow \pi^0 + e^+$ , met een gemiddelde levensduur van het proton van  $10^{31}$  jaar. Dit model is experimenteel achterhaald.

Supersymmetrische modellen veronderstellen een symmetrie tussen bosonen en fermionen, en voorspellen dat de huidige deeltjes partners hebben met een spin die  $\frac{1}{2}$  verschilt. Het supersymmetrische  $SU(5)$  model voorspelt unificatie pas bij een energie van  $10^{16}$  GeV en een gemiddelde levensduur van het proton van  $10^{33}$  jaar. De dominante vervalkanalen van protonen in deze theorie zijn  $p^+ \rightarrow K^+ + \bar{\nu}_{\mu}$  en  $p^+ \rightarrow K^0 + \mu^+$ .

Quantumgravitatie gaat bij deeltjesinteracties pas een rol spelen op Planck schaal, waar  $\lambda_C \approx R_S$ :  $m_{Pl} = \sqrt{\hbar c/G} = 3 \cdot 10^{19}$  GeV,  $t_{Pl} = \hbar/m_{Pl}c^2 = \sqrt{\hbar G/c^5} = 10^{-43}$  sec en  $r_{Pl} = ct_{Pl} \approx 10^{-35}$  m.

# Hoofdstuk 16

## Astrofysica

### 16.1 Afstandsbepaling

Voor afstandsbepaling in de nabije ruimte wordt de *parallax* het meest gebruikt. De parallax is het halve hoekverschil tussen 2 metingen van de positie van een object vanuit verschillende punten. Wanneer de jaarparallax  $p$  is geldt voor de afstand  $R$ :  $R = a / \sin(p)$ , waarin  $a$  de straal van de aardbaan is. De *clusterparallax* gebruikt men om de afstand van een groep sterren te bepalen d.m.v. hun beweging t.o.v. een vaste achtergrond. De tangentiële snelheid  $v_t$  en de radiële snelheid  $v_r$  van de sterren langs de hemelbol zijn gegeven door

$$v_r = V \cos(\theta) \quad , \quad v_t = V \sin(\theta) = \omega R$$

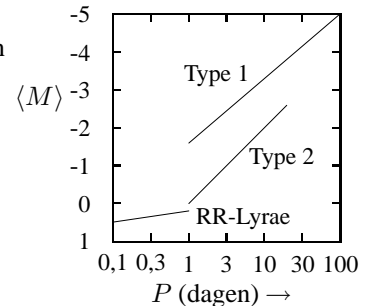
waarin  $\theta$  de hoek tussen de ster en het *convergentiepunt* is en  $\hat{R}$  de afstand in pc. Dit geeft met  $v_t = v_r \tan(\theta)$

$$R = \frac{v_r \tan(\theta)}{\omega} \Rightarrow \hat{R} = \frac{1''}{p}$$

waarin de parallax  $p$  in boogseconden is. De parallax is gegeven door

$$p = \frac{4,74\mu}{v_r \tan(\theta)}$$

met  $\mu$  de eigenbeweging van de ster in ''/jaar. Een methode voor afstandsbepaling van wat verder weg staande objecten, zoals melkwegstelsels en sterrenhopen gaat via de periode-gemiddelde lichtkracht relatie van Cepheïden. Deze relatie is voor verschillende typen sterren weergegeven in het figuur hierboven.



### 16.2 Lichtsterkte en magnituden

De *lichtsterkte* is de totale uitgestraalde energie per tijdseenheid. De aarde ontvangt van de zon  $s_0 = 1,374$  kW/m<sup>2</sup> aan energie. De lichtsterkte van de zon is dus  $L_{\odot} = 4\pi r^2 s_0 = 3,82 \cdot 10^{26}$  W. De lichtsterkte van de zon is ook gegeven door:

$$L_{\odot} = 4\pi R_{\odot}^2 \int_0^{\infty} \pi F_{\nu} d\nu$$

waarin  $\pi F_{\nu}$  de monochromatische stralingsflux is. Ter plaatse van een waarnemer is dit nog  $\pi f_{\nu}$ , met  $f_{\nu} = (R/r)^2 F_{\nu}$  als absorptie verwaarloosd wordt. Wanneer  $A_{\nu}$  de fractie van de flux is die het aardoppervlak bereikt,  $R_{\nu}$  de transmissiefactor is en  $\pi a^2$  het oppervlak van de detector is vindt men voor de *schijnbare helderheid*  $b$ :

$$b = \pi a^2 \int_0^{\infty} f_{\nu} A_{\nu} R_{\nu} d\nu$$

Omdat het oog logaritmisch werkt voor lichtperceptie is de *magnitude*  $m$  gedefinieerd als

$$\frac{b_1}{b_2} = (100)^{\frac{1}{5}(m_2 - m_1)} = (2,512)^{m_2 - m_1}$$



Hieruit volgt dat  $m_2 - m_1 = 2,5 \cdot^{10} \log(b_1/b_2)$ , ofwel  $m = -2,5 \cdot^{10} \log(b) + C$ . De schijnbare helderheid van een ster die op 10 pc zou staan noemt men de *absolute helderheid*  $B$ :  $B/b = (\hat{r}/10)^2$ . De absolute magnitude is dan gegeven door  $M = -2,5 \cdot^{10} \log(B) + C$ , ofwel:  $M = 5 + m - 5 \cdot^{10} \log(\hat{r})$ . Wanneer rekening gehouden wordt met een interstellaire absorptie van  $10^{-4}/\text{pc}$  vindt men

$$M = (m - 4 \cdot 10^{-4} \hat{r}) + 5 - 5 \cdot^{10} \log(\hat{r})$$

Wanneer de detector alle door een object uitgestraalde straling zou meten zou men de *absolute bolometrische magnitude* meten. Wanneer de *bolometrische correctie*  $BC$  gegeven is door

$$BC = 2,5 \cdot^{10} \log \left( \frac{\text{ontvangen energieflex}}{\text{geregistreerde energieflex}} \right) = 2,5 \cdot^{10} \log \left( \frac{\int f_\nu d\nu}{\int f_\nu A_\nu R_\nu d\nu} \right)$$

geldt:  $M_b = M_V - BC$  met  $M_V$  de visuele magnitude. Verder geldt

$$M_b = -2,5 \cdot^{10} \log \left( \frac{L}{L_\odot} \right) + 4,72$$

### 16.3 Straling en steratmosferen

De stralingsenergie die door een oppervlak  $dA$  stroomt is  $dE = I_\nu(\theta, \varphi) \cos(\theta) d\nu d\Omega dA dt$ , waarin  $I_\mu$  de *monochromatische intensiteit* [ $\text{Wm}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{Hz}^{-1}$ ] is. Zolang er geen sprake is van absorptie is de grootheid  $I_\nu$  onafhankelijk van de afstand tot de bron. Voor een zwart lichaam geldt de stralingswet van Planck, deze is uitgedrukt in  $I$ :

$$I_\nu(T) \equiv B_\nu(T) = \frac{c}{4\pi} w_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1}$$

Het stralingstransport door een laag is dan te schrijven als

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -I_\nu \kappa_\nu + j_\nu$$

Hierin is  $j_\nu$  de *emissiecoëfficiënt* en  $\kappa_\nu$  de *absorptiecoëfficiënt*.  $\int ds$  is de breedte van de laag. De *optische dikte*  $\tau_\nu$  van de laag is gegeven door  $\tau_\nu = \int \kappa_\nu ds$ . Als  $\tau_\nu \ll 1$  is de laag optisch dun, als  $\tau_\nu \gg 1$  is de laag optisch dik. In LTE geldt voor de steratmosfeer:  $j_\nu = \kappa_\nu B_\nu(T)$ . Dan geldt:

$$I_\nu(s) = I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + B_\nu(T)(1 - e^{-\tau_\nu})$$

### 16.4 Steropbouw en evolutie

De opbouw van een ster wordt beschreven door de volgende vergelijkingen:

$$\begin{aligned} \frac{dM(r)}{dr} &= 4\pi \varrho(r) r^2 \\ \frac{dp(r)}{dr} &= -\frac{GM(r)\varrho(r)}{r^2} \\ \frac{L(r)}{dr} &= 4\pi \varrho(r) \varepsilon(r) r^2 \\ \left( \frac{dT(r)}{dr} \right)_{\text{stral}} &= -\frac{3}{4} \frac{L(r)}{4\pi r^2} \frac{\kappa(r)}{4\sigma T^3(r)}, \quad (\text{Eddington}), \text{ of} \\ \left( \frac{dT(r)}{dr} \right)_{\text{conv}} &= \frac{T(r)}{p(r)} \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{dp(r)}{dr}, \quad (\text{convectief energietransport}) \end{aligned}$$

Verder is voor sterren van het Zon-type het samenstellende plasma te beschrijven als een ideaal gas:

$$p(r) = \frac{\varrho(r)kT(r)}{\mu m_{\text{H}}}$$

waarin  $\mu$  het gemiddelde molecuulgewicht is, dat meestal goed benaderd wordt door:

$$\mu = \frac{\rho}{nm_{\text{H}}} = \frac{1}{2X + \frac{3}{4}Y + \frac{1}{2}Z}$$

waarin  $X$  de massafractie van H is,  $Y$  de massafractie van He en  $Z$  de massafractie van de andere elementen. Verder gelden er verbanden

$$\kappa(r) = f(\rho(r), T(r), \text{samenstelling}) \quad \text{en} \quad \varepsilon(r) = g(\rho(r), T(r), \text{samenstelling})$$

Er zal convectie in de ster optreden als voldaan is aan het Schwarzschild criterium:

$$\left(\frac{dT}{dr}\right)_{\text{conv}} < \left(\frac{dT}{dr}\right)_{\text{stral}}$$

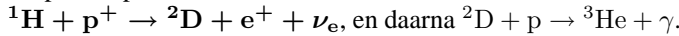
Anders zal het energietransport via straling plaatsvinden. Voor sterren in quasi-hydrostatisch evenwicht gelden de benaderingen  $r = \frac{1}{2}R$ ,  $M(r) = \frac{1}{2}M$ ,  $dM/dr = M/R$ ,  $\kappa \sim \rho$  en  $\varepsilon \sim \rho T^\mu$  (deze laatste aanname is alleen geldig voor hoofdreekssterren). Voor pp-ketens is  $\mu \approx 5$  en voor de CNO cyclus geldt  $\mu = 12$  tot 18. Men vindt dan  $L \sim M^3$ : de *massa-lichtkracht relatie*. Verder volgt dan:  $L \sim R^4 \sim T_{\text{eff}}^8$ . Dit leidt tot de vergelijking van de hoofdreeks in het Hertzsprung-Russel diagram:

$$^{10}\log(L) = 8 \cdot ^{10}\log(T_{\text{eff}}) + \text{constante}$$

## 16.5 Energieproductie in sterren

De netto reactie waaruit de meeste sterren hun energie onttrekken is:  $4\ ^1\text{H} \rightarrow\ ^4\text{He} + 2e^+ + 2\nu_e + \gamma$ . Hierbij komt 26,72 MeV vrij. Deze reactie kan verlopen via twee reactieketens. De traagste, snelheidsbepalende stap is vet weergegeven. De energie tussen haakjes is de energie die het neutrino meeneemt.

1. De proton-proton keten: deze kent twee takken:



I. pp1:  $^3\text{He} + ^3\text{He} \rightarrow\ 2\text{p}^+ + ^4\text{He}$ . Er komt 26,21 + (0,51) MeV vrij.

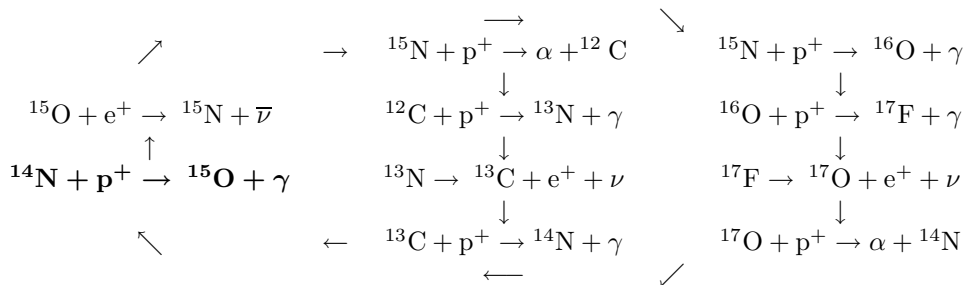
II. pp2:  $^3\text{He} + \alpha \rightarrow\ ^7\text{Be} + \gamma$

i.  $^7\text{Be} + e^- \rightarrow\ ^7\text{Li} + \nu$ , dan  $^7\text{Li} + \text{p}^+ \rightarrow\ ^4\text{He} + \gamma$ . 25,92 + (0,80) MeV.

ii.  $^7\text{Be} + \text{p}^+ \rightarrow\ ^8\text{B} + \gamma$ , dan  $^8\text{B} + e^+ \rightarrow\ ^4\text{He} + \bar{\nu}$ . 19,5 + (7,2) MeV.

De beide  $^7\text{Be}$  takken worden belangrijker bij hogere  $T$ .

2. De CNO cyclus. De eerste reactieweg geeft 25,03 + (1,69) MeV, de tweede 24,74 + (1,98) MeV. De reacties die plaatsvinden zijn hieronder weergegeven.



## De $\nabla$ -operator

In cartesische coördinaten  $(x, y, z)$  geldt:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} &= \frac{\partial}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z, \quad \text{grad} f = \vec{\nabla} f = \frac{\partial f}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z \\ \text{div } \vec{a} &= \vec{\nabla} \cdot \vec{a} = \frac{\partial a_x}{\partial x} + \frac{\partial a_y}{\partial y} + \frac{\partial a_z}{\partial z}, \quad \nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \\ \text{rot } \vec{a} &= \vec{\nabla} \times \vec{a} = \left( \frac{\partial a_z}{\partial y} - \frac{\partial a_y}{\partial z} \right) \vec{e}_x + \left( \frac{\partial a_x}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial x} \right) \vec{e}_y + \left( \frac{\partial a_y}{\partial x} - \frac{\partial a_x}{\partial y} \right) \vec{e}_z\end{aligned}$$

In cylindercoördinaten  $(r, \varphi, z)$  geldt:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} &= \frac{\partial}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z, \quad \text{grad} f = \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z \\ \text{div } \vec{a} &= \frac{\partial a_r}{\partial r} + \frac{a_r}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial a_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial a_z}{\partial z}, \quad \nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \\ \text{rot } \vec{a} &= \left( \frac{1}{r} \frac{\partial a_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial a_\varphi}{\partial z} \right) \vec{e}_r + \left( \frac{\partial a_r}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial r} \right) \vec{e}_\varphi + \left( \frac{\partial a_\varphi}{\partial r} + \frac{a_\varphi}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial a_r}{\partial \varphi} \right) \vec{e}_z\end{aligned}$$

In bolcoördinaten  $(r, \theta, \varphi)$  geldt:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} &= \frac{\partial}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi \\ \text{grad} f &= \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi \\ \text{div } \vec{a} &= \frac{\partial a_r}{\partial r} + \frac{2a_r}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial a_\theta}{\partial \theta} + \frac{a_\theta}{r \tan \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_\varphi}{\partial \varphi} \\ \text{rot } \vec{a} &= \left( \frac{1}{r} \frac{\partial a_\varphi}{\partial \theta} + \frac{a_\theta}{r \tan \theta} - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_\theta}{\partial \varphi} \right) \vec{e}_r + \left( \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial a_\varphi}{\partial r} - \frac{a_\varphi}{r} \right) \vec{e}_\theta + \\ &\quad \left( \frac{\partial a_\theta}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial a_r}{\partial \theta} \right) \vec{e}_\varphi \\ \nabla^2 f &= \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \tan \theta} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}\end{aligned}$$

Algemene kromlijnige orthonormale coördinaten  $(u, v, w)$  kunnen uit cartesische coördinaten verkregen worden door de transformatie  $\vec{x} = \vec{x}(u, v, w)$ . Dan worden de eenheidsvectoren gegeven door:

$$\vec{e}_u = \frac{1}{h_1} \frac{\partial \vec{x}}{\partial u}, \quad \vec{e}_v = \frac{1}{h_2} \frac{\partial \vec{x}}{\partial v}, \quad \vec{e}_w = \frac{1}{h_3} \frac{\partial \vec{x}}{\partial w}$$

waarin de factoren  $h_i$  zorgen voor de normering op lengte 1. Dan volgt:

$$\begin{aligned}\text{grad} f &= \frac{1}{h_1} \frac{\partial f}{\partial u} \vec{e}_u + \frac{1}{h_2} \frac{\partial f}{\partial v} \vec{e}_v + \frac{1}{h_3} \frac{\partial f}{\partial w} \vec{e}_w \\ \text{div } \vec{a} &= \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left( \frac{\partial}{\partial u} (h_2 h_3 a_u) + \frac{\partial}{\partial v} (h_3 h_1 a_v) + \frac{\partial}{\partial w} (h_1 h_2 a_w) \right) \\ \text{rot } \vec{a} &= \frac{1}{h_2 h_3} \left( \frac{\partial (h_3 a_w)}{\partial v} - \frac{\partial (h_2 a_v)}{\partial w} \right) \vec{e}_u + \frac{1}{h_3 h_1} \left( \frac{\partial (h_1 a_u)}{\partial w} - \frac{\partial (h_3 a_w)}{\partial u} \right) \vec{e}_v + \\ &\quad \frac{1}{h_1 h_2} \left( \frac{\partial (h_2 a_v)}{\partial u} - \frac{\partial (h_1 a_u)}{\partial v} \right) \vec{e}_w \\ \nabla^2 f &= \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[ \frac{\partial}{\partial u} \left( \frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial f}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( \frac{h_3 h_1}{h_2} \frac{\partial f}{\partial v} \right) + \frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial f}{\partial w} \right) \right]\end{aligned}$$

## Het SI eenhedenstelsel

### Basiseenheden

Grootheid	Eenheid	Afk.
Lengte	meter	m
Massa	kilogram	kg
Tijd	seconde	s
Therm. temp.	kelvin	K
Elektr. stroom	ampere	A
Lichtsterkte	candela	cd
Hoeveelheid stof	mol	mol

### Aanvullende eenheden

Vlakke hoek	radiaal	rad
Ruimtehoek	sterradiaal	sr

### Afgeleide eenheden met eigen naam

Grootheid	Eenheid	Afk.	Afleiding
Frequentie	hertz	Hz	$s^{-1}$
Kracht	newton	N	$kg \cdot m \cdot s^{-2}$
Druk	pascal	Pa	$N \cdot m^{-2}$
Energie	joule	J	$N \cdot m$
Vermogen	watt	W	$J \cdot s^{-1}$
Elektr. lading	coulomb	C	$A \cdot s$
Elektr. spanning	volt	V	$W \cdot A^{-1}$
Elektr. capaciteit	farad	F	$C \cdot V^{-1}$
Elektr. weerstand	ohm	$\Omega$	$V \cdot A^{-1}$
Elektr. geleiding	siemens	S	$A \cdot V^{-1}$
Magn. flux	weber	Wb	$V \cdot s$
Magn. inductie	tesla	T	$Wb \cdot m^{-2}$
Inductantie	henry	H	$Wb \cdot A^{-1}$
Lichtstroom	lumen	lm	$cd \cdot sr$
Verlichtingssterkte	lux	lx	$lm \cdot m^{-2}$
Activiteit	bequerel	Bq	$s^{-1}$
Geabs. dosis	gray	Gy	$J \cdot kg^{-1}$
Dosis equivalent	sievert	Sv	$J \cdot kg^{-1}$

## Decimale voorvoegsels

yotta	Y	$10^{24}$	giga	G	$10^9$	deci	d	$10^{-1}$	pico	p	$10^{-12}$
zetta	Z	$10^{21}$	mega	M	$10^6$	centi	c	$10^{-2}$	femto	f	$10^{-15}$
exa	E	$10^{18}$	kilo	k	$10^3$	milli	m	$10^{-3}$	atto	a	$10^{-18}$
peta	P	$10^{15}$	hecto	h	$10^2$	micro	$\mu$	$10^{-6}$	zepto	z	$10^{-21}$
tera	T	$10^{12}$	deca	da	10	nano	n	$10^{-9}$	yocto	y	$10^{-24}$