

Fysisch Compendium

W.J. van der Star

Inhoudsopgave

1. Klassieke Mechanica	1
2. Thermodynamica	22
3. Elektrodynamica	37
4. Quantum Mechanica	67
5. Atoomfysica	94
6. Molekuulfysica	107
7. Kernfysica	112
8. Elementaire deeltjes	118
9. Speciale Relativiteitstheorie	143
10. Algemene Relativiteitstheorie	149

Klassieke Mechanica

De gemiddelde snelheid \bar{v} van een pm die eenparig rechtlijnig beweegt wordt gedefinieerd als het quotiënt van de verplaatsing Δx en de daarvoor benodigde tijd Δt :

$$\bar{v} = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

Voor de snelheid op een bepaald moment $v(t)$ volgt hieruit:

$$v(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{dx}{dt} = \dot{x}(t)$$

Integratie naar t geeft:

$$x(t) = x(t_0) + \int_{t_0}^t v(t) dt$$

De **gemiddelde versnelling** \bar{a} van een pm die eenparig rechtlijnig beweegt wordt gedefinieerd als het quotiënt van de snelheidsverandering Δv en de bijbehorende tijd Δt :

$$\bar{a} = \frac{\Delta v}{\Delta t}$$

Voor de versnelling op een bepaald moment $a(t)$ volgt hieruit:

$$a(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta v}{\Delta t} = \frac{dv}{dt} = \dot{v}(t) = \frac{d^2x}{dt^2} = \ddot{x}(t)$$

Integratie naar t geeft:

$$v(t) = v(t_0) + \int_{t_0}^t a(t) dt$$

$$a(t) = \frac{dv}{dt} \Leftrightarrow dv = a(t)dt \Leftrightarrow dv \frac{dx}{dt} = a(t) \frac{dx}{dt} dt \Leftrightarrow v(t)dv = a(t)dx \rightarrow \int_{v_0}^v v(t)dv = \int_{t_0}^t a(t)dx \rightarrow$$

$$v^2(t) - v^2(t_0) = 2 \int_{t_0}^t a(t)dx$$

Als op $t = t$ een pm die een kromlijnige beweging uitvoert een positievector heeft van $\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z$ en op tijd $t = t'$ van $\vec{r}' = x'\vec{e}_x + y'\vec{e}_y + z'\vec{e}_z$, dan geldt voor de verplaatsing: $\Delta\vec{r} = (\Delta x)\vec{e}_x + (\Delta y)\vec{e}_y + (\Delta z)\vec{e}_z \rightarrow$

$$\vec{v}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta\vec{r}}{\Delta t} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \dot{\vec{r}}(t)$$

Voor de grootte van $\vec{v}(t)$ geldt:

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$$

Als s de verplaatsing is gemeten langs de baan van de pm, dan geldt:

$$\vec{v}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta s} \cdot \frac{\Delta s}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta s} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta s}{\Delta t} = \frac{d\vec{r}}{ds} \cdot \frac{ds}{dt} \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{v}(t) = \frac{ds}{dt} \vec{e}_T = v \vec{e}_T}$$

Hierin is \vec{e}_T de eenheidsraakvector aan de baan van de pm.

De versnelling van een pm die een kromlijnige beweging uitvoert volgt uit de limiet van het quotiënt van $\Delta \vec{v}$ en Δt :

$$\boxed{\vec{a}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{v}}{\Delta t} = \frac{\vec{v}}{dt} = \dot{\vec{v}}(t) = \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \ddot{\vec{r}}(t)}$$

Voor de grootte van $\vec{a}(t)$ geldt:

$$\boxed{a = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2}}$$

$$\vec{v}(t) = \text{const.} \rightarrow \int_{t_0}^t \vec{v}(t) dt = [\vec{r}(t)]_{t_0}^t = \vec{r}(t) - \vec{r}(t_0) \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{r}(t) = \vec{r}(t_0) + \vec{v}(t)t}$$

$$\vec{a}(t) = \text{const.} \rightarrow \int_{t_0}^t \vec{a}(t) dt = [\vec{v}(t)]_{t_0}^t = \vec{v}(t) - \vec{v}(t_0) \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{v}(t) = \vec{v}(t_0) + \vec{a}(t)t}$$

$$\text{Hieruit volgt: } \int_{t_0}^t \vec{v}(t) dt = \int_{t_0}^t \{ \vec{v}(t_0) + \vec{a}(t)t \} dt \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{r}(t) = \vec{r}(t_0) + \vec{v}(t_0)t + \frac{1}{2} \vec{a}(t)t^2}$$

De versnelling is bij een kromlijnige beweging te ontbinden in een tangentiële- en een normale component:

$$\vec{a}(t) = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d(v\vec{e}_T)}{dt} = \frac{dv}{dt} \vec{e}_T + v \frac{d\vec{e}_T}{dt}$$

$$\varphi = \angle(\vec{e}_T, X\text{-as}) \Rightarrow \begin{cases} \vec{e}_T = \vec{e}_x \cos \varphi + \vec{e}_y \sin \varphi \\ \vec{e}_N = -\vec{e}_x \sin \varphi + \vec{e}_y \cos \varphi \end{cases} \rightarrow$$

$$\frac{d\vec{e}_T}{dt} = -\vec{e}_x \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt} + \vec{e}_y \cos \varphi \frac{d\varphi}{dt} = \frac{d\varphi}{dt} \vec{e}_N$$

Als ds de booglengte van de baan is doorlopen in dt en ρ de kromtestraal, dan geldt: $ds =$

$$\rho d\varphi \rightarrow \frac{d\varphi}{dt} = \frac{d\varphi}{ds} \cdot \frac{ds}{dt} = \frac{v}{\rho} \rightarrow \frac{d\vec{e}_T}{dt} = \frac{v}{\rho} \vec{e}_N \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{a}(t) = \frac{dv}{dt} \vec{e}_T + \frac{v^2}{\rho} \vec{e}_N}$$

Voor de grootte van $\vec{a}(t)$ geldt dan:

$$a = \sqrt{\left(\frac{dv}{dt}\right)^2 + \frac{v^4}{\rho^2}}$$

Als de pm een cirkelbeweging uitvoert met straal R , dan geldt: $s = R\theta \rightarrow v = R\frac{d\theta}{dt}$

De **hoeksnelheid** $\omega(t)$ wordt gedefinieerd als:

$$\omega(t) = \frac{d\theta}{dt}$$

Substitutie in $v = R(d\theta/dt)$ geeft:

$$v = \omega R$$

De hoeksnelheid is op te vatten als een vector die loodrecht op het vlak van de beweging staat: $\vec{\omega} = (d\theta/dt)\vec{e}_z$; als \vec{r} de positievector van de pm is, dan geldt:

$$\vec{v}(t) = \vec{\omega}(t) \times \vec{r}(t)$$

$$\vec{\omega}(t) = \text{const.} \Rightarrow \int_{t_0}^t \vec{\omega}(t) dt = [\theta(t)]_{t_0}^t = \theta(t) - \theta(t_0) \rightarrow$$

$$\theta(t) = \theta(t_0) + \vec{\omega}(t)t$$

De **hoekversnelling** $\vec{\alpha}(t)$ wordt gedefinieerd als:

$$\alpha(t) = \frac{d\omega}{dt}$$

$$\vec{\alpha}(t) = \text{const.} \Rightarrow \int_{t_0}^t \vec{\alpha}(t) dt = [\omega(t)]_{t_0}^t = \omega(t) - \omega(t_0) \rightarrow$$

$$\vec{\omega}(t) = \vec{\omega}(t_0) + \vec{\alpha}(t)t$$

$$\text{Hieruit volgt: } \int_{t_0}^t \vec{\omega}(t) dt = \int_{t_0}^t \{\vec{\omega}(t_0) + \vec{\alpha}(t)t\} dt \rightarrow$$

$$\theta(t) = \theta(t_0) + \vec{\omega}(t_0)t + \frac{1}{2}\vec{\alpha}(t)t^2$$

$$\vec{a}(t) = \frac{dv}{dt}\vec{e}_T + \frac{v^2}{\rho}\vec{e}_N = R\frac{d\omega}{dt}\vec{e}_T + \frac{v^2}{R}\vec{e}_N \rightarrow$$

$$\vec{a}(t) = R\alpha\vec{e}_T + \omega^2 R\vec{e}_N$$

Voor een eenparige cirkelbeweging geldt: $\vec{\omega}(t) = \text{const.} \rightarrow \vec{a}(t) = \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{\omega} \times \frac{d\vec{r}}{dt} \rightarrow$

$$\vec{a}(t) = \vec{\omega}(t) \times \vec{v}(t) = \vec{\omega}(t) \times [\vec{\omega}(t) \times \vec{r}(t)]$$

Overgang op poolcoördinaten met eenheidsvectoren \vec{e}_r en \vec{e}_θ (met $\vec{r} = r\vec{e}_r$) geeft:

$$\begin{cases} \vec{e}_r = \vec{e}_x \cos \theta + \vec{e}_y \sin \theta \\ \vec{e}_\theta = -\vec{e}_x \sin \theta + \vec{e}_y \cos \theta \end{cases} \rightarrow \vec{v}(t) = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{d(r\vec{e}_r)}{dt} \Leftrightarrow$$

$$\boxed{\vec{v}(t) = \frac{dr}{dt}\vec{e}_r + r\frac{d\theta}{dt}\vec{e}_\theta}$$

De 1-ste term in het rechterlid heet de **radiale snelheid** van de pm en geeft de verandering in afstand tot O ; de 2-de term heet de **transversale snelheid** en geeft de richtingsverandering van \vec{r} t.o.v. O .

$$\vec{a}(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{dr}{dt}\vec{e}_r + r\frac{d\theta}{dt}\vec{e}_\theta \right) = \frac{d^2r}{dt^2}\vec{e}_r + \frac{dr}{dt} \cdot \frac{d\vec{e}_r}{dt} + \frac{dr}{dt} \cdot \frac{d\theta}{dt}\vec{e}_\theta + r\frac{d^2\theta}{dt^2}\vec{e}_\theta + r\frac{d\theta}{dt} \cdot \frac{d\vec{e}_\theta}{dt}$$

Substitutie van $\frac{dr}{dt} \cdot \frac{d\vec{e}_r}{dt} = \frac{dr}{dt} \cdot \frac{d\vec{e}_r}{d\theta} \cdot \frac{d\theta}{dt} = \frac{dr}{dt}(-\vec{e}_x \sin \theta + \vec{e}_y \cos \theta) \frac{d\theta}{dt} = \frac{dr}{dt} \cdot \frac{d\theta}{dt}\vec{e}_\theta$ en

$r\frac{d\theta}{dt} \cdot \frac{d\vec{e}_\theta}{dt} = r\frac{d\theta}{dt} \cdot \frac{d\vec{e}_\theta}{d\theta} \cdot \frac{d\theta}{dt} = r\frac{d\theta}{dt}(-\vec{e}_x \cos \theta - \vec{e}_y \sin \theta) \frac{d\theta}{dt} = -r\frac{d^2\theta}{dt^2}\vec{e}_r$ geeft:

$$\boxed{\vec{a}(t) = \left\{ \frac{d^2r}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \right\} \vec{e}_r + \left\{ 2\frac{dr}{dt} \cdot \frac{d\theta}{dt} + r\frac{d^2\theta}{dt^2} \right\} \vec{e}_\theta}$$

Eerste wet van Newton: een voorwerp waarop geen krachten werken is in rust of beweegt eenparig rechtlijnig.

Tweede wet van Newton: de kracht op een voorwerp uitgeoefend is evenredig met de versnelling die het voorwerp daardoor krijgt.

De evenredigheidsfactor heet de **trage massa** m van het voorwerp:

$$\boxed{\vec{F} = m\vec{a}}$$

Derde wet van Newton: actie=reactie, ofwel $\vec{F}_1 = -\vec{F}_2$.

Stel: \vec{r} resp. \vec{R} is de positievector in referentiestelsel I resp. II \rightarrow

$$\vec{F} = m\ddot{\vec{r}} \wedge \vec{F} = m\ddot{\vec{R}} \rightarrow \ddot{\vec{R}} - \ddot{\vec{r}} = 0 \rightarrow \dot{\vec{R}} - \dot{\vec{r}} = \vec{u} \rightarrow \vec{R} - \vec{r} = \vec{u}t + \vec{s} \mid \vec{u}, \vec{s} \text{ const.} \rightarrow$$

$$\vec{R} = \vec{r} + \vec{s} + \vec{u}t$$

Hierin is \vec{s} een translatie van O en $\vec{u}t$ de constante snelheid van II t.o.v. I.

De wetten van Newton zijn dus invariant onder de transformatie van I naar II. Dit heet een **Galileitransformatie**. Een referentiestelsel waarin de Wetten van Newton geldig zijn heet een **inertiaalstelsel**.

De hoeveelheid arbeid dW die een kracht \vec{F} verricht die een pm over een afstand $d\vec{r}$ verplaatst wordt gedefinieerd als: $dW = \vec{F} \cdot d\vec{r}$

Voor de arbeid W verricht door de kracht als de pm van \vec{r}_0 naar \vec{r}_1 gaat geldt dan:

$$\boxed{W = \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_1} \vec{F} \cdot d\vec{r}}$$

$$\vec{F} \cdot d\vec{r} = m\ddot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} dt = \frac{1}{2}m \frac{d}{dt}(\dot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}}) dt = \frac{1}{2}m \frac{d}{dt} \dot{r}^2 dt \rightarrow W = \frac{1}{2}m \int_{t_0}^{t_1} \frac{d\dot{r}^2}{dt} dt = \frac{1}{2}m\dot{r}_1^2 - \frac{1}{2}m\dot{r}_0^2 \rightarrow$$

$$W = \frac{1}{2}m\vec{v}_1^2 - \frac{1}{2}m\vec{v}_0^2$$

De **kinetische energie** T wordt nu gedefinieerd als:

$$T = \frac{1}{2}mv^2$$

In poolcoördinaten geldt: $v^2 = \dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 \rightarrow$

$$T = \frac{1}{2}m \left\{ \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + r^2 \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right\}$$

De door de kracht geleverde arbeid is dus:

$$W = T_1 - T_0$$

Een **conservatieve kracht** is een kracht waarbij de door de kracht verrichte arbeid onafhankelijk is van de afgelegde weg.

De arbeid verricht door een conservatieve kracht als een pm van een punt \vec{r} naar een willekeurig referentiepunt \vec{r}_0 gaat is dus een unieke scalaire functie van \vec{r} . Aan elk punt in de ruimte kan zo een bepaalde waarde worden toegekend, de **potentiële energie** $V(\vec{r})$:

$$V(\vec{r}) = \int_{\vec{r}}^{\vec{r}_0} \vec{F} \cdot d\vec{r}$$

Voor een conservatieve kracht die een pm via 2 verschillende wegen A en B van een punt \vec{r} naar punt \vec{r}_0 doet bewegen geldt: $\int_{\vec{r},A}^{\vec{r}_0} \vec{F} \cdot d\vec{r} = \int_{\vec{r},B}^{\vec{r}_0} \vec{F} \cdot d\vec{r} \rightarrow \int_{\vec{r},A}^{\vec{r}_0} \vec{F} \cdot d\vec{r} + \int_{\vec{r}_0,B}^{\vec{r}} \vec{F} \cdot d\vec{r} = 0 \rightarrow$

$$\oint \vec{F} \cdot d\vec{r} = 0$$

$$\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_1} \vec{F} \cdot d\vec{r} = \int_{\vec{r}_0}^{refpt} \vec{F} \cdot d\vec{r} - \int_{\vec{r}_1}^{refpt} \vec{F} \cdot d\vec{r} = V(\vec{r}_0) - V(\vec{r}_1) \rightarrow T_1 - T_0 = V_0 - V_1 \Leftrightarrow T_0 + V_0 = T_1 + V_1 \rightarrow$$

$$T + V = E$$

Bij *conservatieve* krachten blijft de totale energie dus behouden.

Voor een pm op hoogte h boven het aardoppervlak geldt: $V = \int_0^h F_z dh = mgh = \frac{1}{2}mv^2 \rightarrow$

$$v = \sqrt{2gh}$$

Voor het potentiaalverschil dV tussen 2 naburige punten geldt: $dV = V(\vec{r} + d\vec{r}) - V(\vec{r}) \rightarrow$

$$dV = \int_{\vec{r}}^{\vec{r} + d\vec{r}} \vec{F} \cdot d\vec{r} - \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{F} \cdot d\vec{r} = -\vec{F} \cdot d\vec{r} = -(F_x dx + F_y dy + F_z dz) \rightarrow$$

$$F_x = -\partial V / \partial x \wedge F_y = -\partial V / \partial y \wedge F_z = -\partial V / \partial z \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{F} = -\nabla V}$$

Uit $\nabla \times \vec{F} = -\nabla \times \nabla V$ volgt dan:

$$\boxed{\nabla \times \vec{F} = 0}$$

De **impuls** \vec{p} van een pm wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\vec{p} = m\vec{v}}$$

De 2-de wet van Newton is nu te schrijven als:

$$\boxed{\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \dot{\vec{p}}}$$

Er geldt dus: $\vec{F} = 0 \Rightarrow \dot{\vec{p}} = 0 \rightarrow \vec{p} = \text{const.}$

Stel: pm I met impuls \vec{p}_1 oefent een kracht \vec{F} uit op pm II met impuls $\vec{p}_2 \rightarrow$
 $\dot{\vec{p}}_1 = \vec{F} \wedge \dot{\vec{p}}_2 = -\vec{F} \rightarrow \dot{\vec{p}}_1 + \dot{\vec{p}}_2 = 0 \rightarrow \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = C$

Bij elke wisselwerking die voldoet aan de 3-de Wet van Newton blijft de totale impuls dus behouden.

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} \rightarrow \vec{r} \times \vec{F} = \vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{p}), \text{ daer } \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{p} = \vec{v} \times m\vec{v} = 0.$$

De **torsie** \vec{N} wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\vec{N} = \vec{r} \times \vec{F}}$$

het **impulsmoment** \vec{L} wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}}$$

Hieruit volgt voor de torsie:

$$\boxed{\vec{N} = \frac{d\vec{L}}{dt} = \dot{\vec{L}}}$$

Voor een pm die in het XY-vlak rondloopt geldt in poolcoördinaten:

$$\vec{r} = r(\cos \varphi \hat{i} + \sin \varphi \hat{j}) \rightarrow \vec{p} = m\dot{\vec{r}} = mr\dot{\varphi}(-\sin \varphi \hat{i} + \cos \varphi \hat{j}) \rightarrow$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ r \cos \varphi & r \sin \varphi & 0 \\ -mr\dot{\varphi} \sin \varphi & mr\dot{\varphi} \cos \varphi & 0 \end{vmatrix} \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{L} = mr^2 \frac{d\varphi}{dt} \hat{k}}$$

\vec{L} staat dus loodrecht op het vlak van de beweging.

Een **centrale kracht** is een kracht die steeds naar of van een vast punt is gericht en waarvan de grootte alleen van de afstand tot dat punt afhangt:

$$\vec{F}(r) = f(r)\hat{r} \rightarrow \vec{N} = f(r)\vec{r} \times \vec{r} = 0 \rightarrow \dot{\vec{L}} = 0 \rightarrow \vec{L} = C$$

Het impulsmoment van een pm o.i.v. een centrale kracht blijft dus behouden.

Voor een 1-dimensionale beweging van een pm geldt: $\frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + V(x) = E \rightarrow$

$$\frac{dx}{dt} = \left[\frac{2}{m}\{E - V(x)\}\right]^{1/2} \Leftrightarrow dt = \sqrt{\frac{1}{2}m} \frac{dx}{\sqrt{E - V(x)}} \rightarrow$$

$$t(x) = t(x_0) + \sqrt{\frac{1}{2}m} \int_{x_0}^x \frac{dx}{\sqrt{E - V(x)}}$$

Een **harmonische beweging** ontstaat als een kracht evenredig en tegengesteld is aan de verplaatsing. Als de beweging gebonden is, dan heeft de potentiële energiefunctie een minimum. Voor een 1-dimensionale beweging geldt: $F = -dV/dx \rightarrow dV/dx = 0 \Rightarrow F = 0$; een punt waarvoor dit geldt heet een **evenwichtspunt**. Als dit punt in O gelegen is, dan geldt:

$$V(x) = V(0) + x \left[\frac{dV}{dx}\right]_{x=0} + \frac{1}{2}x^2 \left[\frac{d^2V}{dx^2}\right]_{x=0} + \dots \approx \frac{1}{2}x^2k \quad (V(0) \text{ is een constante}) \rightarrow$$

Wet van Hooke:

$$F(x) = -kx$$

Substitutie in de 2-de Wet van Newton geeft:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0$$

Hieruit volgt voor $x(t)$:

$$x(t) = A \cos \sqrt{\frac{k}{m}}t + B \sin \sqrt{\frac{k}{m}}t$$

Voor kleine oscillaties is een harmonische beweging dus onafhankelijk van de vorm van $V(x)$. De **cirkelfrequentie** ω wordt gedefinieerd als:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$x(t)$ is dan te schrijven als:

$$x(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t$$

Als de **periode** van de harmonische beweging P is, geldt:

$$P = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{k}}$$

De **frequentie** ν is het aantal trillingen per seconde: $\nu = 1/P \rightarrow$

$$\omega = 2\pi\nu$$

Als $\omega t + \alpha$ de **fase** is, met α de fase op $t = 0$, en A de **amplitude**, zijnde de max. uitwijking van de pm, dan is $x(t)$ ook te schrijven als:

$$x(t) = A \sin(\omega t + \alpha)$$

Hieruit volgt voor de snelheid:

$$v(t) = \omega A \cos(\omega t + \alpha)$$

Hieruit volgt voor de versnelling:

$$a(t) = -\omega^2 x$$

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \cos^2(\omega t + \alpha) \rightarrow$$

$$T = \frac{1}{2}m\omega^2(A^2 - x^2)$$

$$F = -\frac{dV}{dx} = -kx \rightarrow V = \int_0^x kx dx = \frac{1}{2}kx^2 \rightarrow$$

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

De totale energie van een **harmonische oscillator** is dus:

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

Als een pm beweegt tussen de punten x_1 en x_2 dan komt t overeen met een halve trilling, d.w.z. $t = \frac{1}{2}P \rightarrow$

$$P = 2\sqrt{\frac{1}{2}m} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{E - V(x)}}$$

Als er tevens een kracht werkt die tegengesteld is aan de richting van de snelheid van de pm, $F' = -\lambda v$ | λ constant, dan treedt er een **gedempte trilling** op.

De bewegingsvergelijking wordt dan: $m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx - \lambda v \rightarrow \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\lambda}{m} \cdot \frac{dx}{dt} + \frac{k}{m}x = 0$

Stel: $2\gamma = \lambda/m \wedge \omega_0^2 = k/m \rightarrow$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = 0$$

Voor zwakke demping ($\gamma < \omega$) is de oplossing:

$$x(t) = Ae^{-\gamma t} \sin(\omega t + \alpha)$$

Hierin is $\omega^2 = \omega_0^2 - \gamma^2$, en zijn A en α willekeurige constanten die door de beginvoorwaarden worden bepaald.

Een **gedwongen trilling** ontstaat als er tevens een uitwendige kracht op de pm werkt.

Stel: $F_u = F_0 \cos \omega_f t \rightarrow$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{F_0}{m} \cos \omega_f t$$

De pm zal nu met een frequentie ω_f gaan trillen; een mogelijke oplossing is dan van de vorm $x(t) = A \sin(\omega_f t - \alpha)$; substitutie van $x(t)$ in de D.V. geeft voor A resp. α : $A = (F_0/m) / \sqrt{(\omega_f^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega_f^2} \wedge \tan \alpha = (\omega_f^2 - \omega_0^2) / 2\gamma \omega_f \rightarrow$

$$x(t) = \frac{F_0/m}{\sqrt{(\omega_f^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega_f^2}} \sin(\omega_f t - \alpha)$$

Voor centrale krachten geldt: $\frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + V(r) = E$ | μ de massa van de pm
Substitutie van $\dot{\varphi} = L/\mu r^2$ geeft:

$$\frac{1}{2}\mu \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) = E$$

Hierin heeft $L^2/2\mu r^2$ de **centrifugale potentiële energie** die een afstotende schijnkracht veroorzaakt: $V'(r) = V(r) + (L^2/2\mu r^2)$ heet de **effectieve potentiaal**.

Analoog aan $t(x)$ geldt nu:

$$t(r) = t(r_0) + \sqrt{\frac{1}{2}\mu} \int_{r_0}^r \frac{dr}{\sqrt{E - V(r) - (L^2/2\mu r^2)}}$$

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi} \cdot \frac{d\varphi}{dt} = \frac{L}{\mu r^2} \cdot \frac{dr}{d\varphi} \rightarrow \frac{L^2}{2\mu r^2} \left\{ \frac{1}{r^2} \left(\frac{dr}{d\varphi}\right)^2 + 1 \right\} + V(r) = E \rightarrow$$

$$\varphi(r) = \varphi(r_0) + \int_{r_0}^r \frac{dr}{r^2 \sqrt{(2\mu/L^2)\{E - V(r)\} - (1/r^2)}}$$

$\dot{r}^2 \geq 0 \rightarrow E \geq V(r) + (L^2/2\mu r^2)$; een gebonden beweging ontstaat als $dV/dr > 0$ is en het rechterlid een min. heeft.

$E = V'(r)_{min} \Rightarrow r = \text{const.}$, zijnde een cirkelbeweging.

$dV/dr < 0$ komt overeen met een ongebonden beweging; de waarde van r die voldoet aan $E = V(r) + (L^2/2\mu r^2)$ is de afstand van de kortste nadering.

Stel: $V(r) = -\frac{k}{r} \rightarrow \vec{F} = -\frac{dV}{dr} = -\frac{k}{r^2} \cdot \frac{\vec{r}}{r} = -\frac{k\vec{r}}{r^3}$

Hierin is k pos. voor een aantrekkende en neg. voor een afstotende kracht.

De **Runge-Lenz vector** \vec{A} wordt gedefinieerd door:

$$\vec{A} = \vec{p} \times \vec{L} - \mu k \frac{\vec{r}}{r}$$

$\vec{L} \perp$ baanvlak $\rightarrow \vec{p} \times \vec{L}$ ligt in het baanvlak en dus ook \vec{A} .

$$\vec{r} \cdot \vec{A} = \vec{r} \cdot \vec{p} \times \vec{L} - \mu k \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}}{r} \Leftrightarrow rA \cos \varphi = L^2 - \mu k r \quad (\vec{r} \cdot \vec{p} \times \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \cdot \vec{L} = \vec{L} \cdot \vec{L}) \rightarrow$$

$$\boxed{\frac{1}{r} = \frac{\mu k}{L^2} \left(1 + \frac{A}{\mu k} \cos \varphi\right)}$$

Dit is de poolvergelijking van een kegelsnede met excentriciteit $e = A/\mu k$.

Substitutie van $-\frac{1}{r^2} \cdot \frac{dr}{d\varphi} = -\frac{A}{L^2} \sin \varphi$ in de DV voor φ geeft

$$\left(\text{met } \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = \left(\frac{dr}{d\varphi}\right)^2 \left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2 = \left(\frac{dr}{d\varphi}\right)^2 \frac{L^2}{\mu^2 r^4}\right): \frac{A^2 \sin^2 \varphi}{2\mu L^2} + \frac{L^2}{2\mu r^2} - \frac{k}{r} = E$$

Substitutie van $A^2 \cos^2 \varphi = \left(\frac{L^2}{r} - \mu k\right)^2$ geeft dan:

$$\boxed{A^2 = \mu^2 k^2 + 2\mu E L^2}$$

De excentriciteit is dan te schrijven als:

$$\boxed{e = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{\mu k^2}}}$$

$E > 0 \Rightarrow e > 1 \rightarrow$ hyperbool

$E = 0 \Rightarrow e = 1 \rightarrow$ parabool

$E < 0 \Rightarrow e < 1 \rightarrow$ ellips

$E = -\mu k^2/2L^2 \Rightarrow e = 0 \rightarrow$ cirkel

Voor de kracht tussen 2 pm's m_1 en m_2 op onderlingen afstand r geldt de

Gravitatiwet van Newton:

$$\boxed{\vec{F}_g = -\frac{Gm_1m_2}{r^2}\hat{r}}$$

Hierin is $G \approx 6,67 \cdot 10^{-11} \text{Nm}^2/\text{kg}^2$ de **gravitatieconstante**. De massa gedraagt zich hier als **zware massa**; er geldt dat trage massa = zware massa.

$$V(r) = -\int_r^\infty \frac{Gm_1m_2}{r^2} dr = \left[\frac{Gm_1m_2}{r}\right]_r^\infty \rightarrow$$

$$\boxed{V(r) = -\frac{Gm_1m_2}{r}}$$

De **gravitatiepotentiaal** $V_g(r)$ op afstand r van een massa m wordt nu gedefinieerd als:

$$\boxed{V_g(r) = -\frac{Gm}{r}}$$

In bolcoördinaten geldt: $\nabla V = \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{Gm}{r}\right), 0, 0\right) = \left(\frac{Gm}{r^2}, 0, 0\right) \rightarrow$

$$\nabla \cdot \nabla V = \nabla^2 V = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{Gm}{r^2}\right) = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (Gm) = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{4}{3}\pi G \rho \frac{\partial}{\partial r} r^3 \rightarrow$$

Vergelijking van Poisson:

$$\boxed{\nabla^2 V = 4\pi G \rho}$$

Als een pm in tijd Δt een hoek $\Delta\varphi$ doorloopt op afstand r van het centrum, dan geldt voor de oppervlakte ΔS : $\Delta S = \frac{1}{2}r^2\Delta\varphi \rightarrow \frac{dS}{dt} = \frac{1}{2}r^2\frac{d\varphi}{dt} = \frac{L}{2\mu}$

Als L behouden blijft, worden dus in gelijke tijden gelijke oppervlakten doorlopen.

Stel: $A = m\vec{v} \cdot \vec{r} \rightarrow \frac{dA}{dt} = m\vec{a} \cdot \vec{r} + mv^2 = \vec{F} \cdot \vec{r} + 2T \rightarrow \frac{d\overline{A}}{dt} = \overline{\vec{F} \cdot \vec{r}} + 2\overline{T}$ Het **tijdgemiddelde** $\overline{f(t)}$ over een tijdvak τ van een functie $f(t)$ wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\overline{f(t)} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau f(t) dt}$$

Hieruit volgt: $\frac{d\overline{A}}{dt} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dA = \frac{A - A_0}{\tau} \rightarrow \tau \gg 1 \wedge A$ begrensd $\Rightarrow \frac{d\overline{A}}{dt} \approx 0 \rightarrow$

Viriaalstelling voor een pm:

$$\boxed{\overline{T} = -\frac{1}{2}\overline{\vec{F} \cdot \vec{r}}$$

Het rechterlid heet de **viriaal** van de pm. Daar het rechterlid de helft van het tijdgemiddelde van de potentiële energie voorstelt, is de viriaalstelling ook te schrijven als:

$$\boxed{2\overline{T} + \overline{V} = 0}$$

Voor een conservatieve kracht geldt: $\vec{F} \cdot \vec{r} = -\frac{dV}{dr} \hat{r} \cdot \vec{r} = -r \frac{dV}{dr} \rightarrow \overline{T} = \frac{1}{2}r \frac{d\overline{V}}{dr}$

Stel: $V = -\frac{k}{r^n} \rightarrow \frac{dV}{dr} = -n \frac{V}{r} \rightarrow$

$$\boxed{\overline{T} = -\frac{1}{2}n\overline{V}}$$

Als $\vec{F} = \sum_i \vec{F}_i$ de totale externe kracht op een voorwerp is dat opgebouwd gedacht kan worden uit een aantal pm's m_i en positievectoren \vec{r}_i , en $\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i$ de totale impuls, dan geldt: $\vec{F} = \dot{\vec{P}}$

Het **massamiddelpunt** \vec{R} van een aantal pm's wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\vec{R} = \frac{\sum_i m_i \vec{r}_i}{M}}$$

Hierin is $M = \sum_i m_i$ de totale massa.

\vec{P} is nu te schrijven als:

$$\boxed{\vec{P} = M\dot{\vec{R}}}$$

Voor de kinetische energie van een aantal pm's geldt: $T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\vec{R}}_i^2$

Stel: $\vec{R}_i = \vec{r}_i + \vec{R} \rightarrow T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\vec{R}}^2 + \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \dot{\vec{R}}$

$\sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i = \sum_i m_i \dot{\vec{R}}_i - M\dot{\vec{R}} = 0 \rightarrow \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i = 0 \rightarrow$

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i^2 + \frac{1}{2} M \dot{\vec{R}}^2$$

De 1-ste term is de kinetische energie van de pm's gemeten t.o.v. het mmp, de 2-de term die van de totale massa die met de snelheid van het mmp beweegt. Het totale impulsmoment \vec{L} van een aantal pm's wordt gedefinieerd als:

$\vec{L} = \sum_i \vec{R}_i \times \vec{p}_i = \sum_i m_i \vec{R}_i \times \dot{\vec{R}}_i$

Stel: $\vec{R}_i = \vec{r}_i + \vec{R} \rightarrow \vec{L} = \sum_i m_i \vec{r}_i \times \dot{\vec{r}}_i - \dot{\vec{R}} \times \sum_i m_i \vec{r}_i + \vec{R} \times \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i + \sum_i \vec{R} \times \dot{\vec{R}}$

Analoog aan de afleiding voor T zijn de 2-de en 3-de term nul \rightarrow

$$\vec{L} = \sum_i m_i \vec{r}_i \times \dot{\vec{r}}_i + M \vec{R} \times \dot{\vec{R}}$$

De 1-ste term is het impulsmoment van de pm's t.o.v. het mmp, de 2-de term die van het mmp.

Theorema van Euler: de rotatie-as van een stijf lichaam kan door elk punt van het lichaam gekozen worden.

Als de rotatie-as door het mmp gekozen wordt, dan worden de translatie- en rotatiebeweging gescheiden.

Stel: \vec{a} is een constante vector in een roterend frame met rotatie-as \hat{n}

$d\vec{a} \perp \vec{a} \wedge d\vec{a} \perp \hat{n} \rightarrow d\vec{a} \parallel \hat{n} \times \vec{a} \wedge |d\vec{a}| = d\Omega a \sin \theta$

Stel: $d\vec{\Omega} = d\Omega \hat{n} \rightarrow d\vec{a} \parallel d\vec{\Omega} \times \vec{a} \wedge |d\vec{a}| = |d\vec{\Omega} \times \vec{a}| \Leftrightarrow$

$d\vec{a} = d\vec{\Omega} \times \vec{a} \rightarrow \frac{d\vec{a}}{dt} = \frac{d\vec{\Omega}}{dt} \times \vec{a}$

De hoeksnelheid $\vec{\omega}$ wordt gedefinieerd als:

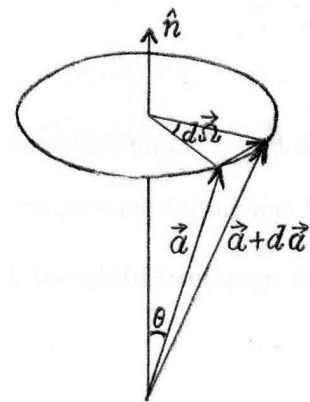
$$\vec{\omega} = \frac{d\vec{\Omega}}{dt}$$

Hieruit volgt:

$$\frac{d\vec{a}}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{a}$$

Als \vec{a} expliciet van de tijd afhangt, dan geldt:

$$\frac{d\vec{a}}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{a} + \frac{\partial \vec{a}}{\partial t}$$



Voor een stijf lichaam opgebouwd uit pm's met positievectoren \vec{r} gemeten in een referentie frame verbonden met het lichaam geldt voor de snelheid van een pm:

$$\dot{\vec{r}} = \vec{\omega} \times \vec{r} \rightarrow \vec{l} = \vec{r} \times m\dot{\vec{r}} = m\vec{r} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) \rightarrow \vec{L} = \sum_i m_i \{ \vec{\omega} r_i^2 - \vec{r}(\vec{r} \cdot \vec{\omega}) \}$$

Daar de componenten van \vec{L} lineair afhangen van de componenten van $\vec{\omega}$ is dit te schrijven als:

$$L_i = \sum_j I_{ij} \omega_j \quad | \quad j = x, y, z$$

Hierin is I_{ij} de **traagheidstensor** waarvoor geldt:

$$I_{ij} = I_{ji} = \begin{pmatrix} \sum m(y^2 + z^2) & -\sum mxy & -\sum mxz \\ -\sum myx & \sum m(x^2 + z^2) & -\sum myz \\ -\sum mxz & -\sum mzy & \sum m(x^2 + y^2) \end{pmatrix}$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \dot{\vec{r}}_i = \frac{1}{2} \sum_i m_i (\vec{\omega} \times \vec{r}) \cdot (\vec{\omega} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \sum_i m_i \{ \vec{r} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) \} \rightarrow$$

$$T = \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \vec{L}$$

Daar $I_{ij} = I_{ji}$ is het mogelijk een stel coördinaatassen te vinden zo, dat de matrix van I_{ij} diagonaal is; zulke assen heten **hoofdassen** en zijn verbonden met de symmetrie-assen van het lichaam. De diagonaalelementen, de eigenwaarden van I_{ij} , zijn de **hoofdtraagheidsmomenten**.

Voor de afgeleide van het impulsmoment van een stijf lichaam in een inertiaalstelsel geldt: $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{N}$; als $\frac{\partial}{\partial t}$ de afgeleide is in een roterend stelsel, dan geldt: $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{L} + \frac{\partial \vec{L}}{\partial t} \rightarrow$

$$\frac{\partial \vec{L}}{\partial t} = -\vec{\omega} \times \vec{L} + \vec{N}$$

De term $-\vec{\omega} \times \vec{L}$ is een *schijnkracht* (centrifugale torsie) t.g.v. het roteren van het lichaam.

Voor een coördinatenstelsel bestaande uit de hoofdassen geldt:

$$L_1 = I_1 \omega_1 \wedge L_2 = I_2 \omega_2 \wedge L_3 = I_3 \omega_3, \text{ met } I_1, I_2 \text{ en } I_3 \text{ de hoofdtraagheidsmomenten.}$$

$$I \dot{\vec{\omega}} = -\vec{\omega} \times I \vec{\omega} + \vec{N} \rightarrow \text{Eulervergelijkingen:}$$

$$\begin{cases} I_1 \dot{\omega}_1 = \omega_2 \omega_3 (I_2 - I_3) + N_1 \\ I_2 \dot{\omega}_2 = \omega_3 \omega_1 (I_3 - I_1) + N_2 \\ I_3 \dot{\omega}_3 = \omega_1 \omega_2 (I_1 - I_2) + N_3 \end{cases}$$

Deze differentiaalvergelijkingen zijn vanwege de $\omega_n \omega_m$ -factoren niet-lineair.

Een **sferische top** is een stijf lichaam met $I_1 = I_2 = I_3 = I \rightarrow \dot{\omega}_1 = N_1/I \wedge \dot{\omega}_2 = N_2/I \wedge \dot{\omega}_3 = N_3/I \Leftrightarrow \dot{\omega} = \vec{N}/I \rightarrow$

$$\vec{\omega}(t) = \frac{1}{I} \int_0^t N dt$$

Niet-holonomische nevenvoorwaarden zijn van de vorm:

$$\sum_{i=1}^n a_{ji} dq_i + a_{jt} dt = 0 \quad | \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Hierin is $a_{ji} = a_{ji}(q_1, q_2, \dots, q_n, t)$ en is de differentiaalvorm *niet* integreerbaar.

Niet-holonomische nevenvoorwaarden beperken de mogelijke snelheden van een systeem, daar de differentiaalvorm te schrijven is als

$$\sum_{i=1}^n a_{ji} \dot{q}_i + a_{jt} = 0 \quad | \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Als \vec{F}_i de kracht is die op een deeltje werkt met positievector \vec{r}_i , dan wordt de door \vec{F}_i verrichte hoeveelheid **virtuele arbeid** δW op een systeem van N deeltjes gedefinieerd als:

$$\delta W = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i \cdot \delta \vec{r}_i$$

Hierin is $\delta \vec{r}_i$ de virtuele verplaatsing van een deeltje met positievector \vec{r}_i , waarbij $dt = 0$.

Als een systeem van N deeltjes in statisch evenwicht verkeert, dan geldt:

$$\vec{F}_i + \vec{R}_i = 0 \quad | \quad i = 1, 2, \dots, N$$

Hierin is \vec{F}_i de som van de uitwendige - en \vec{R}_i de som van de inwendige krachten. Voor de verrichte hoeveelheid virtuele arbeid geldt dan:

$$\delta W = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i \cdot \delta \vec{r}_i + \sum_{i=1}^N \vec{R}_i \cdot \delta \vec{r}_i = 0$$

Als de inwendige krachten geen arbeid verrichten, dan is $\sum_{i=1}^N \vec{R}_i \cdot \delta \vec{r}_i = 0 \rightarrow$

$$\delta W = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i \cdot \delta \vec{r}_i = 0$$

Uit $\vec{F}_i - \dot{\vec{p}}_i = 0$ volgt dat de hoeveelheid verrichte virtuele arbeid door een systeem als dit over een afstand $\delta \vec{r}_i$ beweegt ook nul is \rightarrow

Principe van D'Alembert:

$$\sum_i (\vec{F}_i - \dot{\vec{p}}_i) \cdot \delta \vec{r}_i = 0$$

Daar voor virtuele verplaatsingen geldt dat $\delta t = 0$, geldt voor de differentiaal van

$$x_i = x_i(q_1, \dots, q_n, t) : \delta x_i = \sum_{j=1}^n \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \delta q_j \quad | \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$\text{Substitutie in } \delta W = \sum_{i=1}^{3N} F_i \delta x_i \text{ geeft: } \delta W = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n F_i \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \delta q_j$$

De **gegeneraliseerde kracht** Q_j corresponderend met de gegeneraliserende coördinaat q_j wordt nu gedefinieerd als:

$$Q_j = \sum_{i=1}^{3N} F_i \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \quad | \quad j = 1, 2, \dots, N$$

De hoeveelheid verrichte virtuele arbeid is nu te schrijven als:

$$\delta W = \sum_{j=1}^n Q_j \delta q_j$$

De dimensie van Q_j hangt af van de dimensie van de corresponderende q_j ; $Q_j \delta q_j$ heeft echter altijd de dimensie van arbeid.

Substitutie van $\delta \vec{r}_i = \sum_j \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} \delta q_j$ en Q_j in $\sum_i (\vec{F}_i - \dot{\vec{r}}_i) \cdot \delta \vec{r}_i = 0$ geeft: $\sum_j Q_j \delta q_j - \sum_{i,j} m_i \ddot{\vec{r}}_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} \delta q_j$

$$\vec{r}_i = \vec{r}_i(q_j, t) \Rightarrow \dot{\vec{r}}_i = \sum_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} = \vec{v}_i \rightarrow \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j}$$

Substitutie van $\frac{\partial \vec{v}_i}{\partial \dot{q}_j}$ en $\frac{\partial \vec{v}_i}{\partial q_j} = \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial q_j} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} \right)$ in

$$\sum_i m_i \ddot{\vec{r}}_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} = \sum_i \left\{ \frac{d}{dt} \left(m_i \dot{\vec{r}}_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} \right) - m_i \dot{\vec{r}}_i \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} \right) \right\} \text{ geeft:}$$

$$\sum_i m_i \ddot{\vec{r}}_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} = \sum_i \left\{ \frac{d}{dt} \left(m_i \vec{v}_i \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial \dot{q}_j} \right) - m_i \vec{v}_i \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial q_j} \right\} \rightarrow$$

$$\sum_j \left[Q_j - \frac{d}{dt} \left\{ Q_j \sum_i \frac{1}{2} m_i \vec{v}_i^2 \right\} + \frac{\partial}{\partial q_j} \sum_i \frac{1}{2} m_i \vec{v}_i^2 \right] \delta q_j = 0 \Leftrightarrow$$

$$\sum_j \left[Q_j - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) + \frac{\partial T}{\partial q_j} \right] \delta q_j = 0 \rightarrow$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_j} = Q_j$$

Voor conservatieve systemen geldt: $\vec{F}_i = -\nabla V_i \rightarrow Q_j = \sum_i \vec{F}_i \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} = -\sum_i \nabla V_i \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_j} \rightarrow$

$$Q_j = -\frac{\partial V}{\partial q_j}$$

Substitutie in de DV voor T geeft: $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial}{\partial q_j} (T - V) = 0$

De **Lagrangiaan** L wordt gedefinieerd als:

$$L = T - V$$

In het algemeen hangt L af van q , \dot{q} en t : $L = L(q, \dot{q}, t)$

Als V niet expliciet van de tijd afhangt, dan geeft substitutie in de DV de

Vergelijking van Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0$$

Voor een systeem met nevenvoorwaarden $\sum_{i=1}^n a_{ji}dq_i + a_{jt}dt = 0 \mid j = 1, 2, \dots, m$ geldt dat op elk tijdstip de variaties van de afzonderlijke gegeneraliseerde coördinaten in een virtuele verplaatsing (met $\delta t = 0$) moeten voldoen aan: $\sum_{i=1}^n a_{ji}\delta q_i = 0$

Als $\lambda_j \in \mathbb{R}$ een Lagrange multiplicator is, dan geldt: $\lambda_j \sum_{i=1}^n a_{ji}\delta q_i = 0 \mid j = 1, 2, \dots, m$

Als C_i de gegeneraliseerde inwendige kracht is corresponderend met q_i die geen arbeid verricht, dan geldt: $\sum_{i=1}^n C_i\delta q_i = 0 \rightarrow$

$$\lambda_j \sum_{i=1}^n a_{ji}\delta q_i - \sum_{i=1}^n C_i\delta q_i = 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^n \left(C_i - \sum_{j=1}^m \lambda_j a_{ji} \right) \delta q_i = 0$$

Stel: $C_i = \sum_{j=1}^m \lambda_j a_{ji} \rightarrow$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = \sum_{j=1}^m \lambda_j a_{ji} \mid i = 1, 2, \dots, n}$$

De **canonieke** - ofwel **geconjugeerde impuls** p_j wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}}$$

Substitutie in de vergelijking van Lagrange geeft:

$$\boxed{\dot{p}_j - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0}$$

De **Hamiltoniaan** H wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{H(q_i, p_i, t) = \dot{q}_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i, t)}$$

Differentiatie van beide leden van $H(q_i, p_i, t)$ geeft:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt = p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \rightarrow$$

Vergelijkingen van Hamilton:

$$\boxed{\frac{\partial H}{\partial q_i} = -p_i \wedge \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \wedge \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}}$$

De **actie** S wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{S = \int_{t_1}^{t_2} L dt}$$

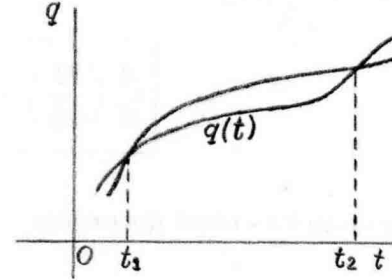
Principe van Hamilton: Een dynamisch systeem evolueert van tijdstip t_1 naar t_2 zo, dat de actie een *functionaal* is m.b.t. willekeurige kleine veranderingen in de afgelegde weg:

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0$$

S en L zijn, i.t.t. de wetten van Newton, scalaire grootheden en dus onafhankelijk van het gebruikte coördinatenstelsel.

De vergelijking van Lagrange is ook af te leiden uitgaande van het principe van Hamilton.

Stel: $L = L\{q(t), \dot{q}(t), t\}$ | $q(t)$ de baan zo, dat S min. is. Als $q(t) + \varepsilon\varphi(t)$ | $\varepsilon \ll 1$ en $\varphi(t)$ een willekeurige functie met nevenvoorwaarden $\varphi(t_1) = \varphi(t_2) = 0$ een baan is dicht bij $q(t)$, dan moet dus gelden: $dS/d\varepsilon = 0$



Hierin is $S = \int_{t_1}^{t_2} L\{q(t) + \varepsilon\varphi(t), \dot{q}(t) + \varepsilon\dot{\varphi}(t), t\} dt \rightarrow$

$$\int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial q} \cdot \frac{\partial(q + \varepsilon\varphi)}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \cdot \frac{\partial(\dot{q} + \varepsilon\dot{\varphi})}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial L}{\partial t} \cdot \frac{\partial t}{\partial \varepsilon} \right\} dt = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial q} \varphi + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{\varphi} \right\} dt = 0 \Leftrightarrow$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial q} \varphi dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \varphi \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \varphi \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right\} dt = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right\} \right] \varphi dt = 0 \rightarrow \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right\} = 0$$

Een symmetrie in een dynamisch systeem manifesteert zich als een afwezigheid van een coördinaat. Uit de Lagrangevergelijking volgt dan een behoudswet.

Stel: L is onafhankelijk van $q_i \rightarrow \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right\} = 0 \rightarrow \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = C$

Als L dus onafhankelijk is van q_i is, dan blijft p_i dus behouden.

Voor de kinetische energie van een systeem met N deeltjes geldt: $T = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N} m_j \dot{x}_j^2$

$$x_j = x_j(q_1, q_2, \dots, q_n, t) \rightarrow \dot{x}_j = \sum_{i=1}^n \frac{\partial x_j}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial x_j}{\partial t} \rightarrow T = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N} m_j \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial x_j}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial x_j}{\partial t} \right)^2$$

De kinetische energie is dus een functie van q, \dot{q} en t : $T = T(q, \dot{q}, t)$

Stel: $j = k \rightarrow$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N} m_k \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial x_k}{\partial q_j} \dot{q}_i \dot{q}_j + 2 \sum_{i=1}^n \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial x_k}{\partial t} \dot{q}_i + \left(\frac{\partial x_k}{\partial t} \right)^2 \right\}$$

Als $\partial x_k / \partial t \neq 0$, dan heeft het corresponderende deeltje m_k een snelheid ongelijk nul, ook al zijn alle q_i 's wel nul. Dit komt i.h.a. overeen met bewegende nevenvoorwaarden. Als voor elke k geldt dat $\partial x_k / \partial t = 0$, dan is de totale kinetische energie te schrijven als:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n m_k \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial x_k}{\partial q_j} \dot{q}_i \dot{q}_j$$

De **inertiecoëfficiënt** m_{ij} wordt gedefinieerd als:

$$m_{ij} = m_{ji} = \sum_{k=1}^{3N} m_k \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial x_k}{\partial q_j}$$

Substitutie in T geeft:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n m_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j$$

Een **conservatief systeem** is een systeem waarvoor geldt:

1. $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$
2. De Lagrangiaan hangt niet expliciet van t af: $L = L(q, \dot{q})$
3. Nevenvoorwaarden van de vorm: $\sum_{i=1}^n a_{ji} \dot{q}_i = 0$ ($a_{jt} = 0$)

$$L = L(q_i, \dot{q}_i) \rightarrow \frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i$$

$$\text{Substitutie van } \frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \sum_{j=1}^n \lambda_j a_{ji} \text{ geeft:}$$

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^n \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \dot{q}_i - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_j a_{ji} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \Leftrightarrow \frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i$$

Integratie geeft de **Jacobi integraal** $\sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L = h$, die dus de Hamiltoniaan van het systeem voorstelt en die constant is.

$$\text{Stel: } T = \sum_{j,k} m_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k \mid m_{jk} = m_{kj}$$

$$\sum_{j,k} m_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k = \sum_{j,k \neq i} m_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k + \sum_{j=i, k \neq i} m_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k + \sum_{j \neq i, k=i} m_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k + \sum_{j,k=i} m_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k \Leftrightarrow$$

$$\sum_{j,k} m_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k = \sum_{j,k \neq i} m_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k + \left(\sum_{k \neq i} m_{ik} \dot{q}_k \right) \dot{q}_i + \left(\sum_{j \neq i} m_{ji} \dot{q}_j \right) \dot{q}_i + m_{ii} (\dot{q}_i)^2$$

Als V onafhankelijk van \dot{q}_i is, dan volgt hieruit:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \sum_{k \neq i} m_{ik} \dot{q}_k + \sum_{j \neq i} m_{ji} \dot{q}_j + 2m_{ii} \dot{q}_i = \sum_k m_{ik} \dot{q}_k + \sum_j m_{ji} \dot{q}_j = 2 \sum_j m_{ij} \dot{q}_j \rightarrow$$

$$\sum_i \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 2 \sum_{i,j} m_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j = 2T \rightarrow$$

$$\boxed{H = T + V}$$

Als L dus niet expliciet van de tijd afhangt, dan is H constant en als V onafhankelijk van \dot{q}_i is, dan is H tevens de totale energie.

Een gegeneraliseerde coördinaat q_i heet cyclisch als deze een constante canonieke impuls heeft. als alle q_i 's cyclisch zijn, dan kan p_i gedefinieerd worden als: $p_i = \alpha_i \rightarrow$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial H}{\partial \alpha_i} = \omega_i \rightarrow q_i = \omega_i t + \beta_i$$

Canonieke coördinaten zijn coördinaten waarvoor geldt:

$$\boxed{\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \wedge \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}}$$

Als $P_i = P_i(q_i, p_i, t)$ en $Q_i = Q_i(q_i, p_i, t)$ canonieke coördinaten zijn, dan is er een functie $K = K(Q_i, P_i, t)$ zo, dat geldt: $\dot{P}_i = \frac{\partial K}{\partial Q_i} \wedge \dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}$

Daar voor de oude coördinaten p_i en q_i geldt dat $\delta \int_{t_1}^{t_2} [\dot{q}_i p_i - H(q_i, p_i, t)] dt = 0$, volgt hieruit

voor de nieuwe coördinaten: $\delta \int_{t_1}^{t_2} [\dot{Q}_i P_i - K(Q_i, P_i, t)] dt = 0$

Aan beide voorwaarden wordt voldaan als geldt: $\lambda(\dot{q}_i p_i - H) = \dot{Q}_i P_i - K + \frac{dF}{dt}$

Hierin kan F een functie zijn van q_i, p_i, Q_i, P_i en t en heet de **voortbrengende functie**, λ is een constante.

Voor $\lambda = 1$ ontstaat een zgn. **canonieke transformatie**:

$$\boxed{\dot{q}_i p_i - H = \dot{Q}_i P_i - K + \frac{dF}{dt}}$$

De **Poissonhaken** $\{U, V\}$ van 2 dynamische variabelen $U(p_i, q_i)$ en $V(p_i, q_i)$ worden gedefinieerd als:

$$\boxed{\{U, V\} = \sum_i \left(\frac{\partial U}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial V}{\partial p_i} - \frac{\partial U}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial V}{\partial q_i} \right)}$$

Daar de Poissonhaken antisymmetrisch zijn, geldt:

$$\boxed{\{U, V\} = -\{V, U\}}$$

Hieruit volgt:

$$\boxed{\{U, U\} = 0}$$

Stel: $V = H$; substitutie van de Hamiltonvergelijkingen geeft dan:

$$\boxed{\{U, H\} = \sum_i \left(\frac{\partial U}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial U}{\partial p_i} \dot{p}_i \right)}$$

Daar het rechterlid de impliciete mate van verandering van U voorstelt t.g.v. zijn afhankelijkheid van q_i en p_i , is de totale mate van verandering ofwel de bewegingsvergelijking van U te schrijven als:

$$\boxed{\frac{dU}{dt} = \{U, H\} + \frac{\partial U}{\partial t}}$$

Stel: $U = q_j \wedge V = p_k \rightarrow \{q_j, p_k\} = \sum_i \left(\frac{\partial q_j}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial p_k}{\partial p_i} - \frac{\partial q_j}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial p_k}{\partial q_i} \right) = \sum_i \frac{\partial q_j}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial p_k}{\partial p_i} \rightarrow$

$$\boxed{\{q_j, p_k\} = \delta_{jk}}$$

Een oneindig lange elastische staaf waarin kleine longitudinale vibraties in op kunnen treden is te benaderen d.m.v. een oneindige keten van gelijke massapunten met massa m op onderlinge afstand a die verbonden zijn door uniforme massalose veren met veerconstante k . Voor de kinetische energie geldt dan: $T = \frac{1}{2} \sum_i m \dot{\eta}_i^2$, waarbij η_i de positie van de i -de pm is.

Voor de potentiële energie geldt: $V = \frac{1}{2} \sum_i k(\eta_{i+1} - \eta_i)^2 \rightarrow$

$$L = \frac{1}{2} \sum_i [m \dot{\eta}_i^2 - k(\eta_{i+1} - \eta_i)^2] = \frac{1}{2} \sum_i a \left[\frac{m}{a} \dot{\eta}_i^2 - ka \left(\frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a} \right)^2 \right]$$

Tevens geldt: $a \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a} = \frac{\eta(x+a) - \eta(x)}{a} \rightarrow \frac{d\eta}{dx}$

Substitutie van $\mu = m/a$, zijnde de massa/lenkte-eenheid, en $Y = ka$, zijnde Youngs modulus die een maat is voor de rekbaarheid van een stof, geeft dan:

$$L = \frac{1}{2} \int \left\{ \mu \dot{\eta}^2 - Y \left(\frac{d\eta}{dx} \right)^2 \right\} dx$$

De Lagrangiaan die voor een discreet systeem gedefinieerd is, is nu voor een continu systeem te schrijven als een **Lagrangedichtheid** \tilde{L} :

$$\tilde{L} = \mu \left(\frac{d\eta}{dt} \right)^2 - Y \left(\frac{d\eta}{dx} \right)^2$$

Voor de Lagrangedichtheid $\tilde{L} = \tilde{L} \left(\eta, \frac{d\eta}{dx}, \frac{d\eta}{dt}, x, t \right)$ geldt: $\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \tilde{L} dx dt = 0$

Stel: $\eta(x, t, \alpha) = \eta(x, t, 0) + \alpha \xi(x, t) \rightarrow$

$$\left(\frac{dS}{d\alpha} \right)_{\alpha=0} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left\{ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial \alpha} + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dx)} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\eta}{dx} \right) + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dt)} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\eta}{dt} \right) \right\} dx dt = 0$$

Partiële integratie geeft:

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dt)} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\eta}{dt} \right) dt = - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dt)} \right\} \frac{\partial \eta}{\partial \alpha} dt \text{ en}$$

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dx)} \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\eta}{dx} \right) dx = - \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx} \left\{ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dx)} \right\} \frac{\partial \eta}{\partial \alpha} dx$$

plus resttermen van t_1 naar t_2 en x_1 naar x_2 die nul zijn \rightarrow

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \eta} - \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dx)} \right\} - \frac{d}{dx} \left\{ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dt)} \right\} \right] \left(\frac{\partial \eta}{\partial \alpha} \right)_{\alpha=0} dx dt = 0 \rightarrow$$

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dx)} \right\} + \frac{d}{dx} \left\{ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial (d\eta/dt)} \right\} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \eta} = 0$$

Thermodynamica

Een (geïsoleerd) stelsel van een groot aantal deeltjes is in **statistisch evenwicht** als het in de meest waarschijnlijke verdeling verkeert.

Als alle energieniveaus dezelfde waarschijnlijkheid hebben om bezet te worden, dan is de waarschijnlijkheid van een bepaalde verdeling evenredig met het aantal verschillende manieren waarop de deeltjes over de energieniveaus verdeeld kunnen worden om de betreffende verdeling te realiseren.

Als de N deeltjes identiek en toch onderscheidbaar zijn geldt dat voor het energieniveau W_1 er N verschillende manieren (dus deeltjes) zijn om in W_1 te plaatsen. Het 2-de deeltje kan uit $N - 1$ deeltjes gekozen worden, het 3-de uit $N - 2$ deeltjes, enz. Voor n_1 deeltjes zijn er dus $N!/(N - n_1)!$ manieren.

Daar de volgorde van de deeltjes niet van invloed is op de verdeling, moet dit gedeeld worden door $n_1!$. Het totaal aantal verschillende manieren om n_1 deeltjes in energieniveau W_1 te plaatsen is dus:

$$\frac{N!}{n_1!(N - n_1)!}$$

Voor het 2-de energieniveau W_2 zijn er nog $N - n_1$ deeltjes over; het aantal manieren om n_2 deeltjes in W_2 te plaatsen is dan:

$$\frac{(N - n_1)!}{n_2!(N - n_1 - n_2)!}$$

Het totaal aantal verschillende manieren P om de verdeling n_1, n_2, n_3, \dots te krijgen is het produkt van deze (en de volgende) uitdrukkingen: $P = \frac{N!}{n_1!n_2!n_3!\dots}$

Hierbij moet voldaan worden aan $W = \sum_i n_i W_i$ zijnde de totale energie van het stelsel deeltjes als de onderlinge wisselwerking tussen de deeltjes verwaarloosbaar is.

Als de waarschijnlijkheid een deeltje in W_i te vinden g_i is, dan geldt voor n_i deeltjes een waarschijnlijkheid $g_i^{n_i} \rightarrow P = \frac{N!g_1^{n_1}g_2^{n_2}g_3^{n_3}\dots}{n_1!n_2!n_3!\dots} = N! \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$

De verdeling met de grootste P is de meest waarschijnlijke verdeling, die overeenkomt met de **evenwichtstoestand**.

$$\ln P = N \ln N - N + n_1 \ln g_1 + \dots - (n_1 \ln n_1 - n_1) - \dots = N \ln N - \sum_i n_i \ln(n_i/g_i) \rightarrow$$

$$d \ln P = - \sum_i \ln(n_i/g_i) dn_i - \sum_i dn_i \quad (dg_i = 0)$$

$$N = n_1 + \dots + n_i \rightarrow dN = dn_1 + \dots + dn_i = 0 \quad (N = \text{const.}) \rightarrow$$

$$-d \ln P = -\frac{dP}{P} = \sum_i \ln(n_i/g_i) dn_i$$

$$dW = \sum_i dn_i W_i + \sum_i n_i dW_i \quad (W = \text{const.}) \rightarrow \sum_i W_i dn_i = 0$$

Vermenigvuldiging van $\sum_i dn_i = 0$ met α en $\sum_i W_i dn_i = 0$ met β , optelling bij het rechterlid van $-dP/P$ en toepassing van de stelling van Lagrange geeft dan:

$$-\frac{dP}{P} = \sum_i (\ln(n_i/g_i) + \alpha + \beta W_i) dn_i$$

$$\text{Voor een max. moet dit nul zijn} \rightarrow \ln(n_i/g_i) + \alpha + \beta W_i = 0 \rightarrow n_i = g_i e^{-\alpha - \beta W_i} \rightarrow$$

$$N = e^{-\alpha} \sum_i g_i e^{-\beta W_i}$$

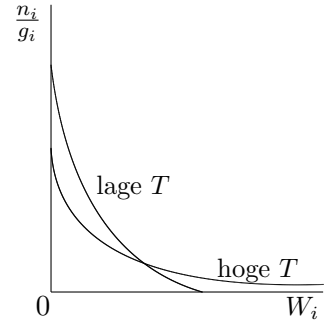
De **toestandssom** ofwel **partitiefunctie** Z wordt nu gedefinieerd als:

$$Z = \sum_i g_i e^{-\beta W_i}$$

Hieruit volgt: $N = e^{-\alpha} Z \rightarrow$

Verdelingswet van Maxwell-Boltzmann:

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta W_i}$$



$$W = \sum_i n_i W_i = \frac{N}{Z} \sum_i g_i W_i e^{-\beta W_i} = -\frac{N}{Z} \cdot \frac{d}{d\beta} \sum_i g_i e^{-\beta W_i} = -\frac{N}{Z} \cdot \frac{dZ}{d\beta} = -N \frac{d \ln Z}{d\beta} \rightarrow$$

De gemiddelde energie van een deeltje: $\bar{W} = -\frac{d \ln Z}{d\beta}$

De **absolute temperatuur** T van een stelsel deeltjes wordt gedefinieerd als:

$$kT = \frac{1}{\beta}$$

Hierin is $k \approx 1,410^{-23}$ J/K de **constante van Boltzmann** en wordt T uitgedrukt in Kelvin.

De toestandssom en de Maxwell-Boltzmann vergelijking zijn nu te schrijven als:

$$Z = \sum_i g_i e^{-W_i/kT} \wedge n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-W_i/kT}$$

$$d\beta = -\frac{dT}{kT^2} \rightarrow W = kNT^2 \frac{d \ln Z}{dT} \rightarrow$$

$$\bar{W} = kT^2 \frac{d \ln Z}{dT}$$

Nulde hoofdwet van de thermodynamica: Als 2 verschillende stelsels met elkaar in wisselwerking staan en in statistisch evenwicht verkeren, dan hebben ze dezelfde temperatuur; de stelsels zijn dan in **thermisch evenwicht**.

Voor een ideaal gas geldt dat alle energie kinetische translatie-energie is. Voor een redelijk groot volume V is de kinetische energie als een continu spectrum op te vatten. Als $g(W)dW$ dan het aantal toestanden tussen W en $W + dW$ is, dan geldt:

$$Z = \int_0^{\infty} e^{-W/kT} g(W) dW = \frac{4\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} \int_0^{\infty} W^{1/2} e^{-W/kT} dW = \frac{4\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\pi (kT)^3} \rightarrow$$

$$Z_{\text{ideaal gas}} = \frac{(2\pi m kT)^{3/2} V}{h^3}$$

$$\ln Z = C + \frac{3}{2} \ln kT \rightarrow$$

$$W = \frac{3}{2} kT$$

De totale energie van een ideaal gas van N moleculen is dan:

$$U_{\text{ideaal gas}} = \frac{3}{2}kNT$$

Als $\text{cal}N$ het aantal mol van een gas is, geldt: $N = \mathcal{N}N_A \rightarrow$

$$U_{\text{ideaal gas}} = \frac{3}{2}\mathcal{N}RT$$

Hierin is $R = kN_A$ de **gasconstante** ofwel **constante van Regnault**.

Voor het aantal moleculen dn met energie tussen W en $W + dW$ geldt nu:

$$dn = \frac{N}{Z} e^{-W/kT} g(W) dW = \frac{N}{Z} \cdot \frac{4\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} W^{1/2} e^{-W/kT} dW$$

Substitutie van $Z = [V(2\pi mkT)^{3/2}]/h^3$ geeft dan de energieverdeling van de moleculen van een ideaal gas:

$$\frac{dn}{dW} = \frac{2\pi N}{(\pi kT)^{3/2}} W^{1/2} e^{-W/kT}$$

$$W = \frac{1}{2}mv^2 \rightarrow \frac{dn}{dv} = \frac{dn}{dW} \cdot \frac{dW}{dv} = mv \frac{dn}{dW}$$

Substitutie van W en dn/dv in dn/dW geeft, als dv het aantal moleculen met snelheid tussen v en $v + dv$ is, de snelheidsverdeling van de moleculen:

$$\frac{dn}{dv} = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT}$$

Voor de totale inwendige energie van een stelsel deeltjes geldt: $U = U_i + T_i = \sum_{(i,j)} U_{ij} + \sum_i \frac{1}{2}mv_i^2$

Als er op het stelsel een uitwendige kracht werkt zal de inwendige energie veranderen en wel zo, dat deze gelijk is aan de arbeid die door de kracht op het stelsel verricht wordt:

$$\Delta U = A_u$$

De **druk** \vec{p} van een gas wordt gedefinieerd als de gemiddelde kracht per oppervlakte-eenheid en uitgedrukt in Pascal (1Pa=1N/m²):

$$\vec{p} = \frac{\vec{F}}{O}$$

Als een gas een zuiger over een afstand dx verplaatst geldt voor de door de kracht verrichte arbeid: $dA = Fdx = pOdx = pdV \rightarrow$

$$A = \int_{V_1}^{V_2} pdV$$

Als een gas bij constante temperatuur expandeert, dan geldt de **Wet van Boyle**:

$$pV = C$$

voor de verrichte arbeid geldt dan: $A = C \int_{V_1}^{V_2} \frac{dV}{V} = \ln \frac{V_2}{V_1}$; hierin heet V_2/V_1 de **expansie-verhouding**.

Warmte is de gemiddelde uitwendige arbeid of overgedragen energie tussen een systeem en de omgeving t.g.v. individuele energie-uitwisseling t.g.v. botsingen tussen de moleculen van het systeem en die van de omgeving, waarbij geen macroscopische verplaatsingen optreden. Hieruit volgt de **Eerste hoofdwet van de thermodynamica**:

De verandering van de inwendige energie van een systeem is gelijk aan de opgenomen warmte en de op het systeem verrichte uitwendige arbeid:

$$\Delta U = Q + A_u$$

Als de dóór een systeem verrichte arbeid A is, dan geldt: $A = -A_u \rightarrow$

$$\Delta U = Q - A$$

Bij een **kringproces** is $\Delta U = 0 \rightarrow Q = A$

Voor infinitesimale veranderingen geldt:

$$dU = \delta Q - \delta A$$

Daar U een toestandsgrootheid is (ΔU hangt alleen van de begin- en eindtoestand af) is dU - i.t.t. δQ en δA - een totale differentiaal.

Een **quasi-statisch proces** is een proces dat bij verandering van toestand 1 naar toestand 2 bij benadering een reeks continue evenwichtstoestanden doorloopt. een dergelijk proces is **reversibel**. Bij een kringproces zijn er dan geen waarneembare veranderingen opgetreden in het systeem of de omgeving. Bij een irreversibel kringproces zijn begin- en eindtoestand wel dezelfde, maar is er een verandering in de omgeving opgetreden.

Als de arbeid alleen het gevolg is van een expansie, dan geldt: $dU = \delta Q - p dV$

Een **isochoor proces** is een proces waarbij het volume constant blijft: $dV = 0 \rightarrow$

$$dU_V = \delta Q_V \rightarrow \Delta U = Q_V$$

De **molaire warmte bij constant volume** C_v wordt gedefinieerd als de hoeveelheid opgenomen warmte door 1 mol stof per graad temperatuurstijging: $C_v = \frac{1}{\mathcal{N}} \cdot \frac{\delta Q_V}{dT} \rightarrow$

$$C_v = \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

Een **isobaar proces** is een proces waarbij de druk constant blijft: $dp = 0 \rightarrow$

$$dU_p = \delta Q_p - d(pV)_p \Leftrightarrow d(U + pV)_p = \delta Q_p$$

De **enthalpie** H wordt gedefinieerd als:

$$H = U + pV$$

Hieruit volgt: $dH_p = \delta Q_p \rightarrow \Delta H = Q_p$

De **molaire warmte bij constante druk** C_p wordt gedefinieerd als de hoeveelheid opgenomen warmte door 1 mol stof per graad temperatuurstijging: $C_p = \frac{1}{\mathcal{N}} \cdot \frac{dQ_p}{dT} \rightarrow$

$$C_p = \frac{1}{\mathcal{N}} \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$$

C_v en C_p heten **soortelijke warmte**.

Een **isotherm proces** is een proces waarbij de temperatuur constant blijft. Voor een ideaal gas geldt: $U = \frac{3}{2}\mathcal{N}RT \rightarrow dU = 0 \rightarrow dQ_T = dA_T \rightarrow Q_T = A_T$

Een **adiabatisch proces** is een proces waarbij geen warmte-uitwisseling met de omgeving plaatsvindt: $dQ_a = 0 \rightarrow dU_a = -dA_a$

De verrichte arbeid gaat dus ten koste van de inwendige energie \rightarrow bij adiabatische expansie (compressie) daalt (stijgt) de temperatuur.

Een afgesloten systeem dat niet in evenwicht is zal in de loop van de tijd trachten dit te bereiken. Als dit bereikt is, zal P niet verder toenemen (P maximaal).

De **entropie** S van een systeem wordt nu gedefinieerd als:

$$S = k \ln P$$

Hierin is P weer het aantal manieren waarop een bepaalde energieverdeling kan worden verkregen. De entropie van een afgesloten systeem dat in statistisch evenwicht verkeert is dus maximaal.

Daar S een toestandsgrrootheid is, is de entropieverandering van een systeem als dit van toestand 1 naar toestand 2 gaat, onafhankelijk van het gevolgde proces.

Een **isentropisch proces** is een reversibel proces waarbij de entropie constant is.

Tweede hoofdwet van de thermodynamica: In een afgesloten systeem treden alleen processen op zo, dat $dS \geq 0$.

$dS = 0 \equiv$ evenwichtstoestand en reversibele processen.

$dS > 0 \equiv$ niet-evenwichtstoestand en irreversibele processen om de evenwichtstoestand te bereiken.

De 2-d hoofdwet bepaalt zo welke processen zullen optreden en welke hoogstwaarschijnlijk niet, ook al zijn de laatste b.v. niet in strijd met behoudswetten.

Voor een systeem in statistisch evenwicht dat voldoet aan de Maxwell-Boltzmann statistiek geldt: $P = N! \prod_i (g_i^{n_i} / n_i!)$

Voor een juiste berekening van S moet het rechterlid door $N!$ gedeeld worden \rightarrow
 $S = k \ln P = k \sum_i [n_i \ln g_i - k \sum_i n_i \ln n_i + k \sum_i n_i] = -k \sum_i n_i \ln(n_i / g_i) + kN$

Substitutie van $\ln \frac{n_i}{g_i} = -\frac{W_i}{kT} - \ln \frac{Z}{N}$ geeft: $S = \sum_i \frac{n_i W_i}{T} + k \sum_i n_i \ln \frac{Z}{N} + kN \rightarrow$

$$S = \frac{U}{T} + kN \ln ZN + kN$$

Toepassing van de formule van Stirling geeft:

$$S \approx \frac{U}{T} + kN \ln Z^N N!$$

Substitutie van U en Z van een ideaal gas in statistisch evenwicht in de voorlaatste vergelijking geeft de **Vergelijking van Sackur-Tetrode**:

$$S = \frac{5}{2}kN + kN \ln \frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3 N}$$

$$U = \sum_i n_i W_i \rightarrow dU = \sum_i W_i dn_i + \sum_i n_i dW_i$$

De 1-ste term correspondeert met een verandering van W_i t.g.v. een herverdeling van de moleculen over de beschikbare energieniveaus, de 2-de term met een verandering van W_i t.g.v. de verandering van de energieniveaus.

Bij de expansie van een gas is $\sum_i n_i dW_i$ het gevolg van de volumeverandering en dus van de door het systeem verrichte arbeid: $\bar{d}A = -\sum_i n_i dW_i \rightarrow$

$$\sum_i W_i dn_i + \sum_i n_i dW_i = \bar{d}Q + \sum_i n_i dW_i \rightarrow \bar{d}Q = \sum_i W_i dn_i$$

Voor een infinitesimaal reversibel proces dat aan de Maxwell-Boltzmann statistiek voldoet geldt: $dS = \frac{dU}{T} - \frac{U}{T^2} dT + kN \frac{dZ}{Z}$

$$dZ = -\sum_i \frac{dW_i}{kT} g_i e^{-W_i/kT} + \sum_i \frac{W_i}{kT^2} g_i e^{-W_i/kT} dT$$

Substitutie van dZ en $n_i = (N/Z)g_i e^{-W_i/kT}$ in $kN(dZ/Z)$ geeft:

$$kN \frac{dZ}{Z} = -\frac{1}{T} \sum_i n_i dW_i + \frac{1}{T^2} \sum_i n_i W_i dT = \frac{\bar{d}A}{T} + \frac{U}{T^2} dT \rightarrow dS = \frac{dU + \bar{d}A}{T} \rightarrow$$

$$dS = \frac{\bar{d}Q}{T}$$

S kan dus uitgedrukt worden in J/K.

Substitutie van $\bar{d}Q = TdS$ in dU geeft: $dU = TdS - \bar{d}A$; als alleen expansie arbeid verricht wordt, is dit te schrijven als:

$$dU = TdS - pdV$$

Deze vergelijking geldt zowel voor reversibele als irreversibele processen.

Bij een isotherm reversibel proces blijft de temperatuur constant \rightarrow

$$\Delta S = \frac{Q}{T}$$

Bij een adiabatisch reversibel proces geldt $\bar{d}Q_a = 0 \rightarrow$

$$\Delta S = 0$$

Uit $dS = \frac{\bar{d}Q}{T}$ volgt:

$$Q = \int_1^2 T dS$$

Voor een kringproces geldt:

$$\Delta S = \oint \frac{dQ}{T} = 0 \wedge Q = \oint T dS$$

$$dU = TdS - pdV \rightarrow T = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V \wedge p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S \rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S} \wedge$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V = -\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} \rightarrow$$

Eerste relatie van Maxwell:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V$$

$$dH = dU + Vdp + pdV = TdS + Vdp \rightarrow T = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_p \wedge V = \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_S \rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial S} \wedge \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p = \frac{\partial^2 H}{\partial S \partial p} \rightarrow$$

Tweede relatie van Maxwell:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p$$

De **vrije energie** F wordt gedefinieerd als:

$$F = U - TS$$

$$dF = dU - TdS - SdT = -SdT - pdV \rightarrow S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \wedge p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T} \wedge \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} \rightarrow$$

Derde relatie van Maxwell:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$$

De **vrije enthalpie** wordt gedefinieerd als:

$$G = F + pV$$

$$dG = dF + pdV + Vdp = -SdT + Vdp \rightarrow S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p \wedge V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T \rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\frac{\partial G}{\partial p \partial T} \wedge \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{\partial G}{\partial T \partial p} \rightarrow$$

Vierde relatie van Maxwell:

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

Wet van Nernst: Het is onmogelijk om in een eindig aantal stappen het absolute nulpunt te bereiken:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(T) = 0$$

Voor een gas dat alleen expansie-arbeid verricht volgt uit $kN \frac{dZ}{Z} = \frac{dA}{T} + \frac{U}{T^2} dT$ dat $kN d \ln Z = \frac{pdV}{T} \rightarrow$

$$p = kNT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_T$$

Substitutie van Z voor een ideaal gas geeft de **toestandsvergelijking van een ideaal gas**:

$$p = \frac{kNT}{V}$$

Voor \mathcal{N} mol gas is dit te schrijven als:

$$p = \frac{\mathcal{N}RT}{V}$$

Bij reële gassen moeten de intermoleculaire krachten en afmetingen van de moleculen in rekening gebracht worden. Daar de wisselwerkingen tussen de moleculen snel afnemen met de onderlinge afstand, is de toestandsvergelijking van een reëel gas te schrijven als een reeks met negatieve machten van V/\mathcal{N} :

$$p = RT \left(\frac{\mathcal{N}}{V} + \frac{\mathcal{N}^2}{V^2} B_2 + \frac{\mathcal{N}^3}{V^3} B_3 + \dots \right)$$

B_2, B_3, \dots heten de **viriaalcoëfficiënten** en hangen van de temperatuur en de moleculaire wisselwerking af.

De **grote toestandssom** ofwel **grote partitiefunctie** z van een stelsel deeltjes zonder wisselwerking wordt gedefinieerd als:

$$z = \frac{Z^N}{N!}$$

Uit $\ln z = N \ln Z - \ln N!$ volgt dan:

$$p = kT \left(\frac{\partial \ln z}{\partial V} \right)_T$$

Voor een reëel gas wordt z :

$$z = \frac{1}{N!} \left\{ \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \right\}^N \int \dots \int e^{-U/kT} dV_1 \dots dV_N$$

Hierin correspondeert elke volume-integraal met 1 deeltje.

Voor een ideaal gas is $U = 0 \rightarrow \int \dots \int dV_1 \dots dV_N = V^N \rightarrow$

$$z_{\text{ideaal gas}} = \frac{1}{N!} \left\{ \frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \right\}^N$$

De potentiële energie van een reëel gas is te schrijven als: $U = \sum_{\text{alle paren}} U_{ij}$, welke uit

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}N(N-1) \text{ termen bestaat} &\rightarrow e^{-U/kT} = e^{-\sum_{\text{alle paren}} U_{ij}/kT} = \prod_{\text{alle paren}} e^{-U_{ij}/kT} \Leftrightarrow \\ e^{-U/kT} &= \prod_{\text{alle paren}} \left(1 - \frac{U_{ij}}{kT} + \dots\right) \approx \prod_{\text{alle paren}} (1 + f_{ij}) = 1 + \sum_{\text{alle paren}} f_{ij} + \dots \rightarrow \\ \int \dots \int e^{-U/kT} dV_1 \dots dV_N &= \int \dots \int \left(1 + \sum_{\text{alle paren}} f_{ij} + \dots\right) dV_1 \dots dV_N \end{aligned}$$

De term 1 geeft V^N ; de overige $\frac{1}{2}N(N-1)$ termen zijn gelijk, daar f_{ij} dezelfde voor alle paren is. Voor 2 moleculen op onderlinge afstand r zijn deze te schrijven als:

$$\frac{1}{2}N(N-1)V^{N-2} \int \int_1^2 f_{12}(r) dV_1 dV_2$$

(De factor V^{N-2} komt van de integralen van de overige $N-2$ moleculen.)

$$\text{Stel: } dV_2 = 4\pi r^2 dr \rightarrow I = \int \int_1^2 f_{12}(r) dV_1 dV_2 = \int \int_1^2 f_{12}(r) 4\pi r^2 dr dV_1$$

$$\text{Stel: } \beta = \int_2 f_{12}(r) 4\pi r^2 dr \rightarrow I = \int \beta dV_1 = \beta V \quad N \gg 1 \Rightarrow \frac{1}{2}N(N-1) \approx \frac{1}{2}N^2 \rightarrow$$

$$\int \dots \int \left(1 + \sum_{\text{alle paren}} f_{ij} + \dots\right) dV_1 \dots dV_N = V^N + \frac{1}{2}N^2 V^{N-1} \beta = V^N \left(1 + \frac{N^2 \beta}{2V}\right)$$

Als ook de volgende termen in de reksontwikkeling van $e^{-U/kT}$ in rekening worden gebracht, dan is de integraal te schrijven als $V^N \left(1 + \frac{N\beta}{2V}\right)^N \rightarrow$

$$z_{\text{reëel gas}} = \frac{1}{N!} \left\{ \frac{V(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \right\}^N \left(1 + \frac{N\beta}{2V}\right)^N$$

$$\ln z = \ln \frac{1}{N!} + N \ln V + N \ln \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} + N \ln \left(1 + \frac{N\beta}{2V}\right)$$

De laatste term is ongeveer gelijk aan $N^2\beta/2V \rightarrow$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial V}\right)_T = \frac{N}{V} - \frac{N^2\beta}{2V^2} \rightarrow p = \frac{kNT}{V} - \frac{kTN^2\beta}{2V^2} \rightarrow$$

Eerste orde benadering van de toestandsvergelijking van een reëel gas:

$$p = \frac{\mathcal{N}RT}{V} - \frac{\mathcal{N}^2 RT N_A \beta}{2V^2}$$

Voor een ideaal 1-atomig gas geldt: $U = \frac{3}{2}\mathcal{N}RT \rightarrow C_v = \mathcal{N}^{-1} \cdot \frac{3}{2}\mathcal{N}R = \frac{3}{2}R$
 $H = U + pV = \frac{3}{2}\mathcal{N}RT + \mathcal{N}RT = \frac{5}{2}\mathcal{N}RT \rightarrow C_p = \mathcal{N}^{-1} \cdot \frac{5}{2}\mathcal{N}R = \frac{5}{2}R \rightarrow$

$$C_p - C_v = R$$

Als p constant is en T neemt toe tot $T + 1$, dan geldt:

$$A = \int_T^{T+1} p dV = \int_T^{T+1} \mathcal{N} R dT = \mathcal{N} R \rightarrow \frac{A}{\mathcal{N}} = R \rightarrow$$

$C_p - C_v = R$ geldt dus ook voor meeratomige ideale gassen.

Voor de verhouding γ van C_p en C_v geldt:

$$\boxed{\gamma = \frac{C_p}{C_v} = \frac{5}{3}}$$

$$pV = \mathcal{N}RT \rightarrow \ln p + \ln V = \ln \mathcal{N}R + \ln T \rightarrow \frac{dp}{p} + \frac{dV}{V} = \frac{dT}{T}$$

$$U = \frac{3}{2}\mathcal{N}RT \rightarrow dU = \mathcal{N}c_v dT = TdS - pdV \Leftrightarrow \mathcal{N}C_v \frac{dT}{T} = dS - \mathcal{N}R \frac{dV}{V}$$

Eliminatie van dT/T en substitutie van $C_p - C_v = R$ geeft:

$$\frac{dp}{p} + \gamma \frac{dV}{V} = \frac{dS}{\mathcal{N}C_v} \rightarrow \ln p + \gamma \ln V = \frac{S}{\mathcal{N}C_v} + c'$$

$$\boxed{pV^\gamma = C e^{S/\mathcal{N}C_v}}$$

Voor een adiabatisch en reversibel proces volgt hieruit:

$$\boxed{pV^\gamma = C'}$$

Fermionen zijn deeltjes die aan het Pauliprincipe voldoen en waarbij de golffunctie van het gehele stelsel antisymmetrisch is. Tevens hebben ze een halfvallige spin.

De a-priori waarschijnlijkheid g_i geeft nu het aantal verschillende quantumtoestanden dat bij een bepaalde energie hoort, ofwel de **ontaarding** van het energieniveau, ofwel de g_i 's geven de max. aantallen fermionen in een bepaald energieniveau zonder het Pauliprincipe te overtreden. Er geldt dan: $n_i \leq g_i$

Als er n_i fermionen zijn om een energieniveau W_i te vullen, dan kan het 1-ste fermion in elk van de g_i beschikbare toestanden geplaatst worden, het 2-de fermion in elk van de $g_i - 1$ resterende toestanden, enz. Het totale aantal verschillende manieren om n_i fermionen over de g_i toestanden met energie W_i te verdelen is dan: $g_i(g_i-1)(g_i-2) \dots (g_i-n_i+1) = g_i!/(g_i-n_i)!$ Daar de deeltjes ononderscheidbaar zijn, moet dit gedeeld worden door $n_i!$ →

$$P = g_i! / n_i!(g_i - n_i)!$$

Het totaal aantal verschillende manieren om de verdeling n_1, n_2, n_3, \dots te verkrijgen is dan gelijk aan het produkt van gelijksoortige uitdrukkingen voor elk energieniveau:

$$P = \prod_i \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!} \rightarrow \ln P = \sum_i \{g_i \ln g_i - n_i \ln n_i - (g_i - n_i) \ln(g_i - n_i)\}$$

Analoog aan de Maxwell-Boltzmann verdeling geldt dat de meest waarschijnlijke verdeling volgt uit: $d \ln P = 0 \rightarrow \sum_i \{\ln g_i - \ln(g_i - n_i)\} dn_i = 0$

Met de nevenvoorwaarden $\sum_i dn_i = 0$ en $\sum_i W_i dn_i = 0$ en de multiplicatorenmethode van

Lagrange volgt dan:

$$\sum_i \{\ln n_i - \ln(g_i - n_i) + \alpha + \beta W_i\} dn_i = 0 \rightarrow \ln n_i - \ln(g_i - n_i) + \alpha + \beta W_i = 0 \rightarrow$$

Verdelingswet van Fermi-Dirac:

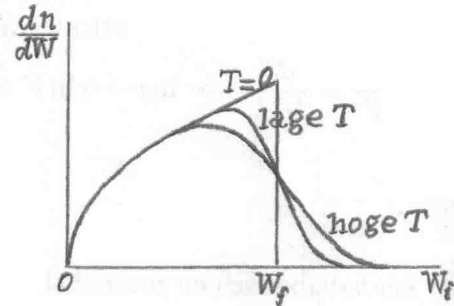
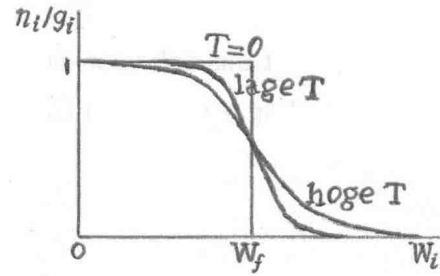
$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta W_i} + 1}$$

Stel: $kT = 1/\beta \wedge W_f = -\alpha/kT \rightarrow$

$$n_i = \frac{g_i}{e^{(W_i - W_f)/kT} + 1}$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} e^{(W_i - W_f)/kT} = \begin{cases} 0 & \text{voor } W_i - W_f < 0 \\ \infty & \text{voor } W_i - W_f > 0 \end{cases}$$

In de Maxwell-Boltzmann statistiek bevinden alle deeltjes bij $T=0$ zich in het laagste energieniveau. In de Fermi-Dirac statistiek wordt dit verhinderd door het Pauliprincipe: de deeltjes bezetten alle beschikbare energieniveaus tot W_f . W_f is dus de max. energie van de fermionen en heet de **Fermi-energie**. De temperatuur Θ_f waarvoor geldt dat $k\Theta_f = W_f$ heet de **Fermitemperatuur**.



Daar het energiespectrum van elektronen in de geleidingsband van een metaal vrijwel continu is, geldt: $g_i = g(W)dW$. Het aantal elektronen dn met energie tussen W en $W + dW$ is dan: $dn = \frac{g(W)dW}{e^{(W - W_f)/kT} + 1}$; tevens geldt: $g(W)dW = 2 \cdot \frac{4\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} W^{1/2} dW$

(De factor 2 komt van de 2 mogelijke spinrichtingen.)

Het aantal vrije elektronen per eenheid van energie-interval (**elektronengas**) ofwel de energieverdeling van vrije fermionen i.h.a. is dan:

$$\frac{dn}{dW} = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} \cdot \frac{W^{1/2}}{e^{(W - W_f)/kT} + 1}$$

Voor $T = 0$ volgt W_f uit: $\frac{h^3}{8\pi V(2m^3)^{1/2}} \int_0^N dn = \int_0^{W_f} W^{1/2} dW \rightarrow$

$$W_{f,T=0} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3N}{\pi V} \right)^{2/3}$$

Voor de totale energie van een verzameling van N fermionen met $T = 0$ geldt:

$$U = \int W dn = \int W \frac{dn}{dW} dW = \frac{8\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} \int_0^{W_f} W^{3/2} dW = \frac{16\pi V(2m^3)^{1/2}}{5h^3} W_f^{5/2} \rightarrow$$

$$U_{f,T \approx 0} = \frac{3}{5} N W_f$$

Bosonen zijn deeltjes die niet aan het Pauliprincipe voldoen en waarbij de golffunctie van het gehele stelsel symmetrisch is. Tevens hebben ze een heeltallig spin.

Voor het aantal verschillende manieren waarop n_i deeltjes over de g_i toestanden die bij energieniveau W_i horen verdeeld kunnen worden geldt nu geen beperking m.b.t. het aantal deeltjes in een bepaalde toestand g_i ; n_i deeltjes kunnen dan over $g_i - 1$ toestanden worden verdeeld. Het totaal aantal mogelijke verdelingen is dan $(n_i + g_i - 1)!$. Daar de deeltjes identiek en ononderscheidbaar zijn moet dit door $n_i!$ gedeeld worden en, daar de volgorde van de g_i 's niet van belang is m.b.t. de verdeling, ook nog door $(g_i - 1)!$ → $P = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}$ →

$$\ln P = \sum_i \{ (n_i + g_i - 1) \ln(n_i + g_i - 1) - n_i \ln n_i - (g_i - 1) \ln(g_i - 1) \}$$

De meest waarschijnlijke verdeling volgt weer uit $d \ln P = 0$ →

$$\sum_i \{ -\ln(n_i + g_i - 1) + \ln n_i \} dn_i = 0$$

Met de nevenvoorwaarden $\sum_i dn_i = 0$ en $\sum_i W_i dn_i = 0$ en de multiplicatorenmethode van Lagrange volgt dan: $\sum_i \{ -\ln(n_i + g_i - 1) + \ln n_i + \alpha + \beta W_i \} dn_i = 0$

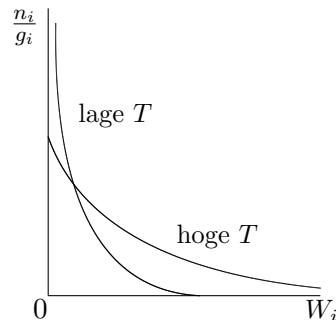
Daar $(n_i + g_i) \gg 1$ is dit te schrijven als: $-\ln(n_i + g_i) + \ln n_i + \alpha + \beta W_i = 0$ →

Verdelingswet van Bose-Einstein:

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta W_i} - 1}$$

Stel: $kT = 1/\beta$ →

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + (W_i/kT)} - 1}$$



Daar $n_i > 0$, is $\alpha > 0$.

De straling van een zwart lichaam gedraagt zich als een **fotonengas** dat de Bose-Einstein statistiek volgt. Echter, het aantal fotonen is t.g.v. absorptie en emissie niet constant; de nevenvoorwaarde $\sum_i dn_i = 0$ geldt hier dus niet, waardoor de α -parameter vervalt →

$$n_i = \frac{g_i}{e^{W_i/kT} - 1}$$

Als het fotonenenergiespectrum bij benadering als continu wordt genomen, dan kan g_i vervangen worden door $g(W)dW$ → $dn = \frac{g(W)dW}{e^{W/kT} - 1}$

Daar $W_{\text{foton}} = h\nu$ is $g(\nu)d\nu = g(W)dW$, waarbij $g(\nu)d\nu$ het aantal trillingswijzen $d\nu$ is dat met dW correspondeert. Voor transversale golven in een volume V geldt dan:

$$g(\nu)d\nu = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu \rightarrow dn = \frac{8\pi V}{c^3} \cdot \frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

De energie per volume-eenheid van dn fotonen tussen ν en $\nu + d\nu$ is $h\nu/V$ →

$$\text{energiedichtheid } w(\nu) = \frac{h\nu}{V} \cdot \frac{dn}{d\nu} \rightarrow$$

Stralingswet van Planck:

$$w(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

In een vaste stof kunnen longitudinale en transversale golven optreden. Het aantal verschillende trillingswijzen $g(\nu)$ tussen ν en $\nu + d\nu$ komt in veel gevallen bij benadering overeen met dat van staande golven in een holte $\rightarrow g_t(\nu)d\nu = \frac{8\pi V}{v_t^3} \nu^2 d\nu$

Daar longitudinale golven 1 i.p.v. 2 vrijheidsgraden hebben, geldt: $g_l(\nu)d\nu = \frac{4\pi V}{v_l^3} \nu^2 d\nu \rightarrow$
 $g(\nu)d\nu = 4\pi V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3} \right) \nu^2 d\nu$

Als een vaste stof uit N atomen bestaat, dan is het totaal aantal onafhankelijke trillingswijzen $3N \rightarrow 3N = 4\pi V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3} \right) \int_0^{\nu_0} \nu^2 d\nu = \frac{4}{3}\pi V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3} \right) \nu_0^3 \rightarrow g(\nu)d\nu = \frac{9N}{\nu_0^3} \nu^2 d\nu$

De trillingen in een vaste stof zijn gequantiseerd in de vorm van **fononen** met energie $h\nu$ en volgen de Bose-Einstein statistiek. Daar hun aantal niet constant is, is α nu \rightarrow

$$dn = \frac{g(\nu)d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \frac{9N}{\nu_0^3} \cdot \frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \rightarrow U = \int_0^{\nu_0} h\nu dn = \frac{9N}{\nu_0^3} \int_0^{\nu_0} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \rightarrow$$

$$C_v = \frac{9N_A h^2}{\nu_0^3 k T^2} \int_0^{\nu_0} \frac{\nu^4 e^{h\nu/kT} d\nu}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}$$

De **Debijetemperatuur** Θ_D wordt gedefinieerd als:

$$\Theta_D = \frac{h\nu_0}{k}$$

stel: $x = \frac{h\nu}{kT} \rightarrow C_v = 9R \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}; T \ll \Theta_D \Rightarrow \frac{\Theta_D}{T} \approx \infty \rightarrow$

$$C_v = 9R \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} = 9R \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \cdot \frac{4\pi^4}{15} \rightarrow$$

$$C_{v, T \ll \Theta_D} = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

$$T \gg \Theta_D \Rightarrow \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} = \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 (1 + x + \dots)}{(1 + x + \dots - 1)^2} dx = \int_0^{\Theta_D/T} x^2 dx = \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^3 \rightarrow$$

Wet van Dulong-Petit:

$$C_{v, T \gg \Theta_D} = 3R$$

Voor een ideaal gas dat de Bose-Einstein statistiek volgt, geldt:

$$dn = \frac{4\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} \cdot \frac{W^{1/2} dW}{e^{\alpha + (W/kT)} - 1}$$

Substitutie van $x = \frac{W}{kT}$ en $Z = \frac{V(2\pi mkT)^{1/2}}{h^3}$ geeft: $N = \frac{2Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{e^{\alpha+x} - 1} \Leftrightarrow$

$$N = \frac{2Z}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-\alpha} (e^{-x} + e^{-\alpha-2x} + \dots) dx = \frac{2Z}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha} \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\pi} + \left(\frac{1}{2}\right)^{5/2} \sqrt{\pi} e^{-\alpha} + \dots \right\} \Leftrightarrow$$

$$N = Ze^{-\alpha} \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} e^{-\alpha} + \dots \right) \Big| \alpha > 0 \rightarrow e^{-\alpha} = \frac{N}{Z} \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} e^{-\alpha} + \dots \right)^{-1} \Leftrightarrow$$

$$N = \frac{N}{Z} \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} \cdot \frac{N}{Z} + \dots \right)$$

$$U = \int_0^{\infty} W dn = \int_0^{\infty} W \frac{dn}{dW} dW = \frac{2ZkT}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{e^{\alpha+x} - 1} \Leftrightarrow$$

$$U = \frac{2ZkT}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-\alpha} (e^{-x} + e^{-\alpha-2x} + \dots) dx \Leftrightarrow$$

$$U = \frac{2ZkT}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha} \left\{ \frac{3}{4} \sqrt{\pi} + \left(\frac{1}{2}\right)^{5/2} \cdot \frac{3}{4} \sqrt{\pi} e^{-\alpha} + \dots \right\} = \frac{3}{2} kT Z e^{-\alpha} \left(1 + \frac{1}{2^{5/2}} e^{-\alpha} + \dots \right) \Leftrightarrow$$

$$U = \frac{3}{2} kNT \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} \cdot \frac{N}{Z} - \dots \right)$$

Voor een ideaal gas in een kubus met $V = a^3$ geldt: $W_i = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mV^{2/3}} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \rightarrow$
 $p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S = -n_i \sum_i \frac{\partial W_i}{\partial V} = -n_i \sum_i -\frac{2}{3} \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mV^{5/3}} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = \frac{2}{3} \sum_i \frac{n_i W_i}{V} \rightarrow$

$$p = \frac{2U}{3V}$$

Voor de druk van een ideaal Bose-Einstein gas volgt hieruit:

$$p = \frac{kNT}{V} \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} \cdot \frac{N}{Z} - \dots \right)$$

De druk is dus kleiner dan die van een klassiek ideaal gas; dit heet **gasdegeneratie**. Voor de meeste gassen bij normale druk en temperatuur is $N/Z \approx 10^{-5}$.

Een Fermi-Dirac gas heeft, i.t.t. een gas dat de Maxwell-Boltzmann - of Bose-Einstein statistiek volgt, een **nulpuntsdruk** die niet-nul is. Dit komt doordat fermionen bij het absolute nulpunt een nulpuntsenergie bezitten van $U = \frac{3}{5} N W_f \rightarrow$

$$p_{f,T=0} = -\frac{3}{5} N \frac{\partial W_f}{\partial V} = -\frac{3}{5} N \cdot -\frac{2}{3} \cdot \frac{W_f}{V} \rightarrow$$

$$p_{f,T=0} = \frac{2N W_f}{5V}$$

Voor een ideaal gas dat de Fermi-Dirac statistiek volgt kan α pos. of neg. zijn. Voor $\alpha > 0 \equiv T \gg 1$ geldt:

$$p = \frac{kNT}{V} \left(1 + \frac{1}{2^{5/2}} \cdot \frac{N}{Z} - \dots \right)$$

Voor $\alpha < 0 \equiv T \ll 1$ geldt:

$$p = \frac{2N W_f}{5V} \left\{ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{W_f} \right)^2 - \dots \right\}$$

De 3 statistieken kunnen geschreven worden als:

$$\frac{g_i}{n_i} + \delta = e^{\alpha + (W_i/kT)}$$

Hierin is $\delta = 0$ voor de Maxwell-Boltzmann statistiek, $\delta = -1$ voor de Fermi-Dirac statistiek en $\delta = 1$ voor de Bose-Einstein statistiek. Voor $n_i \ll g_i$ zijn de statistieken vrijwel identiek.

Elektrodynamica

De **elektrische ladingsdichtheid** $\rho(t, \vec{x})$ wordt gedefinieerd als:

$$\rho(t, \vec{x}) = -en(t, \vec{x})$$

Hierin is $e \approx 1,60 \cdot 10^{-19}$ Coulomb en $n(t, \vec{x})$ het aantal elektronen per volume eenheid op tijdstip t .

De **elektrische stroomdichtheid** $\vec{j}(t, \vec{x})$ wordt gedefinieerd als:

$$\vec{j}(t, \vec{x}) = \rho(t, \vec{x})\vec{v}(t, \vec{x})$$

$\int_V \int_S \nabla \cdot \vec{j} dV = \int_S \vec{J} \cdot d\vec{S} = \int_S dS \hat{n} \cdot \vec{j} \equiv$ hoeveelheid lading die per sec. door dS naar buiten stroomt, ofwel: $-\frac{d}{dt} \int_V \int_V \rho dV = - \int_V \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV$

Uit de wet van behoud van lading volgt dan: $\int_V \int_V \nabla \cdot \vec{j} dV = - \int_V \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV \rightarrow$

Continuïteitsvergelijking:

$$\nabla \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

Voor de elektrische kracht \vec{F} van een puntlading q' in O op een puntlading q op afstand r geldt de **Wet van Coulomb**:

$$\vec{F} = qq' \frac{\hat{r}}{r^2}$$

Alle grootheden zijn in CGS eenheden uitgedrukt, d.w.z. 1 dyne $(1 \text{ esu})^2 / (1 \text{ cm})^2 = 10^{-5} \text{ N}$, en $3 \cdot 10^9 \text{ esu} \Leftrightarrow 1 \text{ C}$.

De elektrische lading q is gequantiseerd:

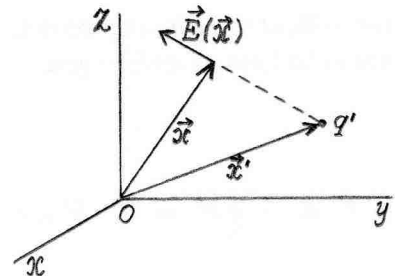
$$q = ne \mid n \in \mathbb{Z}$$

Het **elektrische veld** $\vec{E}(r)$ van een puntlading q' in O op afstand r wordt gedefinieerd als:

$$\vec{E}(r) = q' \frac{\hat{r}}{r^2}$$

Hieruit volgt voor de kracht die q' op q uitoefent:

$$\vec{F} = q\vec{E}$$



Als q' zich in punt \vec{x}' bevindt, dan geldt voor het elektrisch veld in punt \vec{x} :

$$\vec{E}(\vec{x}) = q' \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3}$$

Elektrische velden voldoen aan het lineaire superpositieprincipe, d.w.z. voor het elektrische veld van een aantal puntladingen q_1, q_2, \dots op posities $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots$ geldt:

$$\vec{E}(\vec{x}) = \sum_j q_j \frac{\vec{x} - \vec{x}_j}{|\vec{x} - \vec{x}_j|^3}$$

Voor het elektrische veld van een continue ladingsverdeling $\rho(\vec{x})$ geldt:

$$\int \int \int_{V'} \rho(\vec{x}') \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} dV'$$

Als S een gesloten oppervlak is rond een puntlading q' in O , $\hat{n} \perp S$ en \hat{r} radiaal van q' af gericht, met $\angle(\hat{n}, \hat{r}) = \theta$, dan geldt:

$$\int \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \int \int_S q' \frac{\hat{r}}{r^2} \cdot \hat{n} dS = \int \int_S q' \frac{\cos \theta dS}{r^2} = \int \int_S q' d\Omega = 4\pi q'$$

Algemeen geldt voor een gesloten oppervlak dat een aantal ladingen $q_1, q_2, \dots = Q$ omvat met een totaal elektrisch veld \vec{E} de **Wet van Gauss**:

$$\int \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = 4\pi Q$$

$$\int \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \int \int \int_V \nabla \cdot \vec{E} dV = 4\pi Q = 4\pi \int \int \int_V \rho(\vec{x}) dV \rightarrow$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi \rho$$

$$(\nabla \times \vec{E})_x = \left\{ \nabla \times \left(q' \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} \right) \right\}_x = 0; \text{ analoog geldt: } (\nabla \times \vec{E})_y = (\nabla \times \vec{E})_z = 0$$

Daar een willekeurige ladingsverdeling op te vatten is als een verzameling puntladingen, geldt voor statische ladingsverdelingen:

$$\nabla \times \vec{E} = 0$$

$$\int \int_S \nabla \times \vec{E} \cdot s\vec{S} = \oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} \rightarrow \nabla \times \vec{E} = 0 \rightarrow \oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} = 0 \rightarrow$$

Het elektrostatische veld is conservatief. $\vec{E}(\vec{x})$ kan dus geschreven worden als de gradiënt van een scalaire functie, de **elektrostatische potentiaal** Φ :

$$\vec{E} = -\nabla \Phi(\vec{x})$$

Hieruit volgt voor Φ :

$$\Phi(\vec{x}) = - \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}_1} \vec{E}(\vec{x}) \cdot d\vec{x}$$

Hierbij geldt $\Phi(\vec{x}_0) \equiv 0$; Φ wordt uitgedrukt in statvolt, met 1 statvolt = 1 erg/1 esu \approx 300 volt. Voor de potentiaal van een puntlading in \vec{x} geldt dan:

$$\Phi(\vec{x}) = \frac{q'}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

Als q' in O is, dan geldt: $\Phi(\vec{x}) = \frac{q'}{|\vec{x}|} = \frac{q'}{r}$

Voor een ladingsverdeling $\rho(\vec{x})$ geldt:

$$\Phi(\vec{x}) = \int \int \int_{V'} \frac{\rho(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'$$

Voor de potentiële energie $U(\vec{x})$ van een puntlading q in een gegeven elektrisch veld \vec{E} geldt:

$$U(\vec{x}) = q\Phi(\vec{x})$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \Leftrightarrow \nabla \cdot (-\nabla\Phi) = 4\pi\rho \rightarrow$$

Vergelijking van Poisson:

$$\nabla^2\Phi(\vec{x}) = -4\pi\rho(\vec{x})$$

Voor $\rho(\vec{x}) = 0$ volgt hieruit de Vergelijking van Laplace:

$$\nabla^2\Phi(\vec{x}) = 0$$

Een **elektrische dipool** bestaat uit 2 tegengestelde ladingen $\pm q$ op kleine afstand b van elkaar. Als ze op de Z -as liggen ($z = \pm\frac{1}{2}b$), dan is de potentiaal in \vec{x} : $\Phi(\vec{x}) = (q/r_1) - (q/r_2)$, met r_1 de afstand van q tot \vec{x} en r_2 van $-q$ tot \vec{x} .

$$b \ll d(O, \vec{x}) = r \Rightarrow \frac{1}{r_1} \approx \frac{1}{r} + \frac{b}{2r^2} \cos\theta \wedge \frac{1}{r_2} \approx \frac{1}{r} - \frac{b}{2r^2} \cos\theta \quad \left| \quad \angle(Z\text{-as}, r) = \theta \rightarrow$$

$$\Phi(r, \theta) \approx \frac{qb \cos\theta}{r^2}$$

Het **dipoolmoment** p wordt gedefinieerd als:

$$p = qb$$

Hieruit volgt voor $\Phi(r, \theta)$:

$$\Phi(r, \theta) \approx \frac{p \cos\theta}{r^2}$$

Voor de kracht \vec{F} die een willekeurig (inhomogeen) elektrisch veld op een in het veld geplaatste “starre” elektrische dipool $\pm q(b)$ op afstand \vec{x} van O gelegen, uitoefent, geldt:

$$\vec{F} = (\vec{p} \cdot \nabla) \vec{E}(\vec{x}) = \nabla[\vec{p} \cdot \vec{E}(\vec{x})]$$

Hierin is $\vec{p} = q\vec{b}$, gericht van $-\vec{q}$ naar \vec{q} .

De potentiële energie van de dipool is dan:

$$U = -\vec{p} \cdot \vec{E}(\vec{x})$$

$$U = -pE \cos\alpha \rightarrow dU/d\alpha = pE \sin\alpha = \vec{p} \times \vec{E} \rightarrow$$

$$\vec{\tau} = \vec{p} \times \vec{E}$$

Het uitwendige elektrische veld oefent dus een translatie- en een rotatiekracht op de dipool uit.

Een puntlading q op de Z -as op afstand $\vec{x}' = r$ van O schept in een punt $\vec{x} \equiv r$ een potentiaal

$$\text{van: } \Phi(r, \theta) = \frac{q}{|\vec{x} - \vec{x}'|} = \frac{q}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta}} \quad \angle \vec{x}, \vec{x}' = \theta$$

Stel: $\frac{1}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta}} = \sum_{l=0}^{\infty} (A_l r^l + B_l r^{-l-1}) P_l(\cos \theta)$; $r > r' \Rightarrow A_l = 0$ (het rechterlid moet naar nul naderen voor $r \rightarrow \infty$)

$$\text{Stel: } \cos \theta = 1 \rightarrow P_l(1) = 1 \rightarrow \frac{1}{r - r'} = \frac{1}{r} \left\{ 1 + \frac{r'}{r} + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 + \dots \right\} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{r^{l+1}} \rightarrow$$

$$b_l = (r')^l \rightarrow$$

Multipool expansie:

$$\Phi(r, \theta) = \frac{q}{r} + \frac{qr'}{r^2} \cos \theta + \frac{qr'^2}{r^3} \cdot \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} + \dots$$

Hierin is qr' en qr'^2 het **dipoolmoment** resp. **quadrupoolmoment** van de puntlading q . Als q zich bevindt in een punt \vec{x}' dat niet op de Z -as ligt, dan geldt: $\cos \theta = \vec{x} \cdot \vec{x}' / rr' \rightarrow$

$$\Phi(\vec{x}) = \frac{q}{r} + \frac{q}{r^3} \vec{x}' \cdot \vec{x} + \frac{q}{r^5} \cdot \frac{1}{2} [3(\vec{x}' \cdot \vec{x})^2 - r'^2 r^2] + \dots$$

Voor een ladingsverdeling $\rho(\vec{x})$ (met $\vec{x} > \vec{x}'$, \vec{x} buiten ρ) geldt:

$$\Phi(\vec{x}) = \frac{1}{r} \int \int \int_{V'} \rho dV' + \frac{1}{r^3} \int \int \int_{V'} \vec{x} \cdot \vec{x}' \rho dV' + \frac{1}{r^5} \cdot \frac{1}{2} \int \int \int_{V'} [3(\vec{x}' \cdot \vec{x})^2 - r'^2 r^2] \rho dV' + \dots$$

$$\text{Stel: } Q = \int \int \int_{V'} \rho dV' \wedge \vec{p} = \int \int \int_{V'} \vec{x}' \rho dV'$$

De **quadrupoolmomententensor** Q^{ij} wordt gedefinieerd als:

$$Q^{ij} = \int \int \int_{V'} (3x'^i x'^j - \delta^{ij} r'^2) \rho(\vec{x}') dV'$$

Substitutie in $\Phi(\vec{x})$ geeft:

$$\Phi(\vec{x}) = \frac{Q}{r} + \frac{\vec{x} \cdot \vec{p}}{r^3} + \frac{1}{r^5} \cdot \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 x^i x^j Q^{ij} + \dots$$

Als $r \rightarrow \infty$, dan wordt $\Phi(\vec{x}) \approx Q/r$.

Een **diëlectricum** is een stof die, geplaatst in een elektrisch veld, een polarisatie verkrijgt t.g.v. een verplaatsing van de gebonden ladingen t.o.v. elkaar. Er ontstaat op die manier een **geïnduceerd dipoolmoment** in de atomen.

Als \vec{p} het gemiddelde dipoolmoment van een atoom of molecuul is in de richting van een uitwendig elektrisch veld en N het aantal atomen danwel moleculen per m^3 , dan wordt de polarisatie \vec{P} gedefinieerd als:

$$\vec{P} = n\vec{p}$$

Voor een elektrische dipool is $Q = 0 \wedge Q^{ij} = 0$; verwaarlozing van de hogere orde dipolen geeft een zuivere dipool: $\Phi(\vec{x}) = \frac{\vec{x} \cdot \vec{p}}{r^3} = \frac{(\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \nabla' \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rightarrow$

Potentiaal van een aantal dipolen in een volume V' van een diëlectricum is dan:

$$\int \int \int_{V'} \vec{P}(\vec{x}) \cdot \nabla' \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'$$

Als er over het diëlectricum tevens een hoeveelheid vrije lading $\rho_f(\vec{x})$ is verdeeld, dan geldt

$$\text{voor de totale potentiaal: } \Phi(\vec{x}) = \int \int \int_{V'} \frac{\rho_f(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' + \int \int \int_{V'} \vec{P}(\vec{x}) \cdot \nabla' \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'$$

$$\text{De 2-de integraal is te schrijven als: } \int \int \int_{V'} \nabla' \cdot \frac{\vec{P}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' - \int \int \int_{V'} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \nabla' \cdot \vec{P} dV'$$

Toepassing van het theorema van Gauss op de eerste integraal en substitutie in $\Phi(\vec{x})$ geeft

$$\text{dan: } \Phi(\vec{x}) = \int \int \int_{V'} \frac{\rho_f}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' + \int \int_{S'} \frac{\vec{P} \cdot \hat{n}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dS' + \int \int \int_{V'} -\frac{\nabla' \cdot \vec{P}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'$$

De **polarisatie ladingsdichtheid** $\rho_p(\vec{x}')$ wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\rho_p(\vec{x}') = -\nabla' \cdot \vec{P}(\vec{x}')}$$

De **polarisatie oppervlakte ladingsdichtheid** $\sigma_p(\vec{x}')$ wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\sigma_p(\vec{x}') = \vec{P}(\vec{x}') \cdot \hat{n}}$$

$\Phi(\vec{x})$ is dus de som van 1 potentiaal t.g.v. vrije lading en 2 potentialen t.g.v. gebonden lading:

$$\boxed{\Phi(\vec{x}) = \int \int \int_{V'} \frac{\rho_f(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' + \int \int_{S'} \frac{\sigma_p(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dS' + \int \int \int_{V'} \frac{\rho_p(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'}$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi(\rho_f + \rho_p) = 4\pi(\rho_f - \nabla \cdot \vec{P}) \rightarrow \nabla \cdot (\vec{E} + 4\pi\vec{P}) = 4\pi\rho_f$$

De **elektrische verplaatsing** \vec{D} wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}}$$

Hieruit volgt voor de Wet van Gauss in een diëlectricum:

$$\boxed{\nabla \cdot \vec{D} = 4\pi\rho_f}$$

Dit is in integraalvorm te schrijven als:

$$\boxed{\int_S \vec{D} \cdot d\vec{S} = 4\pi Q_f}$$

Voor veel stoffen geldt: $\vec{P} \propto \vec{E} \rightarrow$

$$\boxed{\vec{P} = \chi\vec{E}}$$

Hierin is χ de **elektrische susceptibiliteit**; diëlectrica waarvoor geldt $\vec{P} \propto \vec{E}$ zijn lineair en isotroop.

Er geldt dan: $\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\chi\vec{E}$, ofwel:

$$\boxed{\vec{D} = (1 + 4\pi\chi)\vec{E}}$$

De **diëlectrische constante** ε van een stof wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\varepsilon = 1 + 4\pi\chi}$$

Hieruit volgt:

$$\boxed{\vec{D} = \varepsilon\vec{E}}$$

Voor de potentiële energie van een aantal puntladingen q_1, q_2, \dots, q_n in $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$ geldt dat deze gelijk is aan de som van alle wederzijdse potentiële energieën $q_i q_j / |\vec{x}_j - \vec{x}_i|$ voor alle mogelijke paren q_i en q_j :

$$U = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{j-1} \frac{q_j q_i}{|\vec{x}_j - \vec{x}_i|} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1, i \neq j}^n \frac{q_j q_i}{|\vec{x}_j - \vec{x}_i|} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n q_j \Phi_j(\vec{x}_j) \quad \left| \quad \Phi_j(\vec{x}_j) = \sum_{i=1, i \neq j}^n \frac{q_i}{|\vec{x}_j - \vec{x}_i|} \right.$$

Voor een ladingsverdeling $\rho(\vec{x})$ geldt analogoog:

$$U = \int_V \int_V \int_V \int_V \int_V \int_V \frac{\rho(\vec{x}) \rho(\vec{x}')}{|\vec{x}_j - \vec{x}_i|} dV dV' = \frac{1}{2} \int_V \int_V \rho(\vec{x}) \Phi(\vec{x}) dV$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \rightarrow U = \frac{1}{2} \int_V \int_V \int_V \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot \vec{E} \Phi dV = \frac{1}{8\pi} \int_V \int_V \int_V \{\nabla \cdot (\vec{E}\Phi) - \vec{E} \cdot \nabla\Phi\} dV \Leftrightarrow$$

$$U = \frac{1}{8\pi} \int_S (\vec{E}\Phi) \cdot d\vec{S} + \frac{1}{8\pi} \int_V \int_V \int_V \vec{E} \cdot \vec{E} dV$$

Daar velden zich i.h.a. tot in het oneindige uitstrekken, ligt het oppervlak S in het oneindige. Daar $\vec{E} \propto r^{-2}$, $\Phi \propto r^{-1}$, en $S \propto r^2$, gaat de integraal naar nul als $r \rightarrow \infty$; hieruit volgt voor de energie van het elektrische veld:

$$\boxed{U = \frac{1}{8\pi} \int_V \int_V \int_V E^2 dV}$$

De **energiedichtheid** T^{00} van het elektrisch veld wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{T^{00} = \frac{E^2}{8\pi}}$$

Voor het elektrische veld van een bol met straal R en lading Q uniform over het volume verdeeld geldt: $\vec{E}_{r \geq R} = Q \frac{\hat{r}}{r^2} \wedge \vec{E}_{r \leq R} = Q \frac{r\hat{r}}{R^3} \rightarrow$

$$U_{bol} = \frac{1}{8\pi} \left\{ \int_V \int_V \int_V \frac{Q^2 r^2 \hat{r}^2}{R^6} dV + \int_V \int_V \int_V \frac{Q^2 \hat{r}^2}{r^4} dV \right\} \Leftrightarrow$$

$$U_{bol} = \frac{1}{8\pi} \left\{ \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{Q^2 r^4}{R^6} \sin \theta d\theta d\phi dr + \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{Q^2}{r^2} \sin \theta d\theta d\phi dr \right\} \rightarrow$$

$$U_{bol} = \frac{3Q^2}{5R}$$

Het totale elektrische veld van een puntlading q in O en q' in \vec{x}' is gelijk aan de som van de afzonderlijke velden: $\vec{E}(\vec{x}) = \frac{q\vec{x}}{|\vec{x}|^3} + \frac{q'(\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} \rightarrow$

$$U = \frac{1}{8\pi} \left\{ \int_V \int_V \int_V \frac{q^2}{r^4} dV + \int_V \int_V \int_V \frac{q'^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|^4} dV + \int_V \int_V \int_V \frac{2qq'\vec{x} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x}|^3 |\vec{x} - \vec{x}'|^3} dV \right\}$$

De 1-ste en 2-de term is de **zelfenergie** van q resp. q' :

$$U_{z,q} = \frac{1}{8\pi} \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{q^2}{r^2} \sin \theta d\theta d\phi dr = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{q^2}{r^2} dr = \infty$$

De zelfenergie van een puntlading is dus oneindig. Daar deze echter constant is, is U te schrijven als:

$$U = C + \frac{qq'}{4\pi} \int_V \int_V \int_V \frac{\vec{x} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x}|^3 |\vec{x} - \vec{x}'|^3} dV = C + \frac{qq'}{4\pi} \int_V \int_V \int_V \nabla \frac{1}{|\vec{x}|} \cdot \nabla \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV \Leftrightarrow$$

$$U = -\frac{qq'}{4\pi} \int_V \int_V \int_V \left(\nabla^2 \frac{1}{|\vec{x}|} \right) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV + C$$

$$\vec{x} \neq 0 \Rightarrow \nabla^2 \frac{1}{|\vec{x}|} = 0 \rightarrow \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \approx \frac{1}{|\vec{x}'|} = \text{constant} \rightarrow$$

$$U = -\frac{qq'}{4\pi} \cdot \frac{1}{|\vec{x}'|} \int_V \int_V \int_V \nabla \cdot \nabla \frac{1}{|\vec{x}|} dV + C = -\frac{qq'}{4\pi} \cdot \frac{1}{|\vec{x}'|} \int_S \int_S \nabla \frac{1}{|\vec{x}'|} \cdot d\vec{S} = \frac{qq'}{|\vec{x}'|} + C$$

De potentiële energie tussen de ladingen is dus de veldenergie.

Om een ladingsverdeling $\rho_f(\vec{x})$ op een diëlectricum te plaatsen is een hoeveelheid arbeid nodig van: $\delta W = \int_V \int_V \int_V \delta \rho_f(\vec{x}) \Phi(\vec{x}) dV = (4\pi)^{-1} \int_V \int_V \int_V \vec{E} \cdot \delta \vec{D} dV$ ($\delta \sigma_f(\vec{x}) = \nabla \cdot \delta \vec{D} / 4\pi$)

$$\vec{E} \propto \vec{D} \Rightarrow \vec{E} \cdot \delta \vec{D} = \frac{1}{2} \delta(\vec{E} \cdot \vec{D}) \rightarrow W = (8\pi)^{-1} \int_V \int_V \int_V \vec{E} \cdot \vec{D} dV \rightarrow$$

Energie in een **lineair diëlectricum**:

$$U = \frac{1}{8\pi} \int_V \int_V \int_V \vec{E} \cdot \vec{D} dV$$

Hieruit volgt voor de energiedichtheid u in een lineair diëlectricum:

$$u = \frac{1}{8\pi} \vec{E} \cdot \vec{D}$$

De **capaciteit** C van een condensator wordt gedefinieerd als:

$$C = \frac{Q}{\Phi}$$

C wordt uitgedrukt in cm in CGS-eenheden en in farad in SI-eenheden.

Uit de lengtecontractieformule volgt dat het volume waarin zich een aantal deeltjes bevindt kleiner is als dit beweegt dan wanneer het in rust is. De dichtheid van het bewegende volume is dus groter dan in rust:

$$n = \frac{n_0}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \rightarrow \rho = qn = \frac{qn_0}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \wedge \vec{j} = qn\vec{v} = \frac{qn_0\vec{v}}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}$$

De **stroomviervector** j^μ wordt gedefinieerd als:

$$j^\mu = (c\rho, j_x, j_y, j_z)$$

Dit is equivalent met: $j^\mu = qn_0 \left(\frac{c}{\gamma}, \frac{v_x}{\gamma}, \frac{v_y}{\gamma}, \frac{v_z}{\gamma} \right) \mid \gamma = \sqrt{1 - (v^2/c^2)} \rightarrow$

$$j^\mu = qn_0 u^\mu$$

De continuïteitsvergelijking is dan te schrijven als:

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

Om het effect van bewegende elektrischhe ladingen in rekening te brengen, d.w.z. als $\vec{j} \neq 0$, moet de Poissonvergelijking van de elektrostatica $\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho$, zo worden aangepast dat:

1. aan het relativiteitsprincipe voldaan wordt. 2. ρ en Φ van de tijd kunnen afhangen. 3. als ρ en Φ tijdonafhankelijk zijn, de Poissonvergelijking weer geldt.

Vervanging van $-\nabla^2$ door $\partial_\mu \partial^\mu$ en ρ door j^0/c geeft $\partial_\mu \partial^\mu \Phi = (4\pi/c)j^0$.

Daar het rechterlid de tijdcomponent van een viervector is, moet het linkerlid dat ook zijn, d.w.z. Φ is de tijdcomponent van de **viervectorpotentiaal** A^ν :

$$A^\nu = (A^0, A^1, A^2, A^3) = (\Phi, A_x, A_y, A_z)$$

De ruimtcomponenten $\vec{A} = (A_x, A_y, A_z)$ vormen de **vectorpotentiaal**.

De relativistische ‘‘Poissonvergelijking’’ die *invariant* is onder een Lorentztransformatie wordt dan:

$$\partial_\mu \partial^\mu A^\nu = \frac{4\pi}{c} j^\nu$$

In deze golfvergelijking treedt j^ν op als bron van golven.

$\partial_\nu \partial_\mu \partial^\mu A^\nu = (4\pi/c)\partial_\nu j^\nu \rightarrow \partial_\mu \partial^\mu (\partial_\nu A^\nu) = 0 \Leftrightarrow \partial_\mu \partial^\mu \Psi = 0 \rightarrow$ In deze golfvergelijking zijn de ‘‘ Ψ ’’-golven dus onafhankelijk van ρ en \vec{j} en treden dus niet in wisselwerking met geladen deeltjes $\rightarrow \Psi = 0 \rightarrow$ **Lorentzvoorwaarde**:

$$\partial_\nu A^\nu = 0$$

Dit is de relativistische veralgemenisering van de voorwaarde in de elektrostatica dat Φ onafhankelijk van t is: $\partial\Phi/\partial t = 0$

Een equivalente relativistisch invariante vergelijking voor A^ν is:

$$\partial_\mu \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu \partial_\mu A^\mu = \frac{4\pi}{c} j^\nu$$

Hieruit volgt: $\partial_\mu \partial^\mu \partial_\nu A^\nu - \partial_\nu \partial^\nu \partial_\mu A^\mu = (4\pi/c) \partial_\nu j^\nu = 0 \Leftrightarrow (4\pi/c) \partial_\nu j^\nu = 0 \Leftrightarrow \partial_\nu j^\nu = 0$, zoals vereist is.

Daar in de elektrostatica geldt dat $\vec{E} = -\nabla\Phi$, is dit te schrijven als:

$$E^1 = \partial^1 A^0 \wedge E^2 = \partial^2 A^0 \wedge E^3 = \partial^3 A^0$$

E^1 , E^2 en E^3 zijn dus de componenten van de tensor $\partial^\mu A^\nu$; in geval van elektrostatische velden geldt dus: $E^k = F^{k0} = \partial^k A^0$, m.a.w. E^k is een deel van de zgn. **veldtensor** $F^{\mu\nu}$, die *antisymmetrisch* is: $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$.

De kracht op een bewegende lading t.g.v. een ladings- en stroomverdeling, gemeten in het

ruststelsel S van het deeltje, is: $\frac{dp'^k}{dt'} = qE'^k$; daar in S $\vec{v} = 0$, is $dt' = d\tau \rightarrow$

$$\frac{dp'^k}{d\tau} = qE'^k = qF'^{k0}$$

F'^{k0} zijn de componenten van $F'^{\mu\nu}$; de component F'^{00} wordt dan gedefinieerd als:

$$\frac{dp'^0}{d\tau} = qF'^{00}$$

$$\frac{dp'^0}{d\tau} = \frac{d(cp)}{d\tau} = \frac{d}{d\tau} \left\{ \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \right\} = \frac{m_0 v}{1 - (v^2/c^2)^{3/2}} = 0 \rightarrow F'^{00} = 0 \rightarrow \frac{dp'^\mu}{d\tau} = qF'^{\mu 0}$$

$$\text{Daar in } S \text{ geldt: } p'_\nu = (m_0 c, 0, 0, 0) \rightarrow \frac{dp'^\mu}{d\tau} = \frac{q}{m_0 c} p'_\nu F^{\mu\nu} \rightarrow$$

Relativistische bewegingsvergelijking van een geladen deeltje in een elektromagnetisch veld:

$$\frac{dp^\mu}{d\tau} = \frac{q}{m_0 c} p_\nu F^{\mu\nu}$$

Uitgaande van $F^{k0} = \partial^k A^0$, $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$ en een lineaire uitdrukking van $F^{\mu\nu}$ in A^ν , is het enig mogelijke verband tussen $F^{\mu\nu}$ en A^ν :

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$$

In matrixvorm is dit te schrijven als:

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \partial^0 A^1 - \partial^1 A^0 & \partial^0 A^2 - \partial^2 A^0 & \partial^0 A^3 - \partial^3 A^0 \\ \partial^1 A^0 - \partial^0 A^1 & 0 & \partial^1 A^2 - \partial^2 A^1 & \partial^1 A^3 - \partial^3 A^1 \\ \partial^2 A^0 - \partial^0 A^2 & \partial^2 A^1 - \partial^1 A^2 & 0 & \partial^2 A^3 - \partial^3 A^2 \\ \partial^3 A^0 - \partial^0 A^3 & \partial^3 A^1 - \partial^1 A^3 & \partial^3 A^2 - \partial^2 A^3 & 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow$$

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial\Phi}{\partial x} + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial A_x}{\partial t} & \frac{\partial\Phi}{\partial y} + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial A_y}{\partial t} & \frac{\partial\Phi}{\partial z} + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial A_z}{\partial t} \\ -\frac{\partial\Phi}{\partial x} - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial A_x}{\partial t} & 0 & -(\nabla \times A)_z & (\nabla \times A)_y \\ -\frac{\partial\Phi}{\partial y} - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial A_y}{\partial t} & (\nabla \times A)_z & 0 & -(\nabla \times A)_x \\ -\frac{\partial\Phi}{\partial z} - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial A_z}{\partial t} & -(\nabla \times A)_y & (\nabla \times A)_x & 0 \end{pmatrix}$$

Uit $E^k = F^{k0}$ volgt hieruit voor \vec{E} :

$$\vec{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

Het **magnetisch veld** \vec{B} wordt nu gedefinieerd als:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Substitutie in $F^{\mu\nu}$ geeft:

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

Stel: $\varepsilon^{123} = \varepsilon^{231} = \varepsilon^{312} = 1 \wedge \varepsilon^{213} = \varepsilon^{132} = \varepsilon^{321} = -1$ en alle andere componenten nul \rightarrow

$$\begin{cases} F^{k0} = E^k \\ F^{mn} = -\varepsilon^{mnl} B^l \end{cases}$$

Het elektrische - en magnetische veld zijn dus verschillende componenten van de vierdimensionale veldtensor. De CGS-eenheid van \vec{B} is de gauss, die dimensioneel hetzelfde is als statvolt/cm. In CGS-eenheden worden \vec{E} en \vec{B} dus in essentie dezelfde eenheden uitgedrukt (i.t.t. SI-eenheden).

Onder een Lorentztransformatie worden \vec{E} en \vec{B} gemengd:

$$\begin{cases} \vec{E}'_{\parallel} = \vec{E}_{\parallel} \wedge \vec{E}'_{\perp} = \gamma[\vec{E}_{\perp} + (\vec{v}/c)x\vec{B}] \\ \vec{B}'_{\parallel} = \vec{B}_{\parallel} \wedge \vec{B}'_{\perp} = \gamma[\vec{B}_{\perp} + (\vec{v}/c)x\vec{E}] \end{cases}$$

Wat men waarneemt hangt dus van het coördinatenstelsel af waarin men zich bevindt.

$$\partial_{\mu} F^{\mu\nu} = \partial_{\mu} \partial^{\mu} A^{\nu} - \partial^{\nu} \partial_{\mu} A^{\mu} \rightarrow$$

$$\partial_{\mu} F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^{\nu}$$

$$\partial^{\sigma} \partial^{\mu} A^{\nu} - \partial^{\sigma} \partial^{\nu} A^{\mu} + \partial^{\mu} \partial^{\nu} A^{\sigma} - \partial^{\mu} \partial^{\sigma} A^{\nu} + \partial^{\nu} \partial^{\sigma} A^{\mu} - \partial^{\nu} \partial^{\mu} A^{\sigma} = 0 \rightarrow$$

$$\partial^{\sigma} F^{\mu\nu} + \partial^{\mu} F^{\nu\sigma} + \partial^{\nu} F^{\sigma\mu} = 0$$

De vergelijkingen voor het elektrische- en magnetische veld zijn uit de vergelijkingen voor de veldtensor af te leiden:

$$\partial_{\mu} F^{\mu 0} = \frac{4\pi}{c} j^0 \Leftrightarrow \frac{\partial E^k}{\partial x^k} = 4\pi\rho \rightarrow \nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho$$

$$\partial_{\mu} F^{\mu 1} = \frac{4\pi}{c} j^1 \Leftrightarrow \frac{\partial(-E_x)}{\partial x^0} + \frac{\partial B_x}{\partial x^2} + \frac{\partial(-B_y)}{\partial x^3} = \frac{4\pi}{c} j_x \rightarrow (\nabla \times \vec{B})_x = \frac{4\pi}{c} j_x + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial E_x}{\partial t}$$

Analoog voor $(\nabla \times \vec{B})_y$ en $(\nabla \times \vec{B})_z$.

$$\partial^3 F^{12} + \partial^1 F^{23} + \partial^2 F^{31} = 0 \Leftrightarrow -\frac{\partial(-B_z)}{\partial x^3} - Q(-B_z)x^1 - Q(-B_y)x^2 = 0 \rightarrow \nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\partial^0 F^{12} + \partial^1 F^{20} + \partial^2 F^{01} = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial(-B_z)}{\partial x^0} - \frac{\partial(E_y)}{\partial x^1} - \frac{\partial(-E_x)}{\partial x^2} = 0 \rightarrow$$

$$(\nabla \times \vec{E})_z = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial B_z}{\partial t}$$

Analoog voor $(\nabla \times \vec{E})_x$ en $(\nabla \times \vec{E})_y$.

De Maxwellvergelijkingen voor het elektromagnetische veld zijn dus:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 4\pi\rho \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

In *vacuüm* zijn de Maxwellvergelijkingen te schrijven als:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} &= \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

$$\frac{dp^1}{d\tau} = \frac{q}{m_0 c} p_\nu F^{1\nu} = \frac{q}{m_0 c} (p_0 F^{10} + p_1 F^{11} + p_2 F^{12} + p_3 F^{13}) = \frac{q}{m_0 c} (p_0 E^x - p^2 \cdot -B_z - p^3 B_y) \Leftrightarrow$$

$$\frac{dp^1}{d\tau} = \frac{q}{m_0 c} \left(\frac{m_0 c}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} E_x + \frac{m_0 v_y}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} B_x + \frac{m_0 v_z}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} B_y \right) \Leftrightarrow$$

$$\frac{dp_x}{dt} = q \left(E_x + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right)_x$$

Analoog voor dp_y/dt en $dp_z/dt \rightarrow$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = q \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right)$$

Hierin is $\vec{p} = m_0 \vec{v} / \sqrt{1 - (v^2/c^2)}$; het rechterlid heet de **Lorentzkracht** \vec{F}_l die op het geladen deeltje werkt, waarbij deze loodrecht op \vec{B} en \vec{v} staat:

$$\vec{F}_l = q \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right)$$

De **krachtdichtheid** \vec{f} wordt gedefinieerd als de totale kracht per volume-eenheid werkend op een aantal geladen deeltjes met dichtheid n :

$$\vec{f} = n \vec{F}_l$$

Hieruit volgt: $\vec{f} = nq\vec{E} + nq(\vec{v}/c) \times \vec{B} \rightarrow$

$$\vec{f} = \rho\vec{E} + \frac{\vec{j}}{c} \times \vec{B}$$

$$f_x = f^1 = \rho E^1 + (j^2 B^3 - j^3 B^2)/c = \rho F^{10} + (-j^2 F^{12} - j^3 F^{13})/c \Leftrightarrow$$

$$F^1 = (F^{10} j_0 + F^{12} j_2 + F^{13} j_3)/c = (F^{10} j_0 + F^{11} j_1 + F^{12} j_2 + F^{13} j_3)/c = c^{-1} F^{1\nu} j_\nu$$

Stel: $f^0 = c^{-1} F^{0\nu} j_\nu \rightarrow$

$$f^\nu = \frac{1}{c} F^{\mu\nu} j_\mu$$

$$f^\mu = c^{-1} F^{\mu\nu} (c/4\pi) \partial_\alpha F^{\alpha\nu} = (4\pi)^{-1} F^{\mu\nu} \partial_\alpha F^{\alpha\nu} = (4\pi)^{-1} \{ \partial_\alpha (F^{\mu\nu} F^{\alpha\nu}) - \partial_\alpha (F^{\mu\nu}) F^{\alpha\nu} \}$$

$$\partial_\alpha F^{\mu\nu} F^{\alpha\nu} = \partial^\alpha F^{\mu\nu} F_{\alpha\nu} = \partial^\nu F^{\mu\alpha} F_{\nu\alpha} = \partial^\nu F^{\alpha\mu} F_{\alpha\nu} = \frac{1}{2} (\partial^\nu F^{\alpha\mu} + \partial^\alpha F^{\mu\nu}) F_{\alpha\nu} \Leftrightarrow$$

$$\partial_\alpha F^{\mu\nu} F^{\alpha\nu} = -\frac{1}{2} \partial^\mu F^{\nu\alpha} F_{\alpha\nu} = \frac{1}{2} \partial^\mu F^{\nu\alpha} F_{\nu\alpha} = \frac{1}{4} \partial^\mu (F^{\nu\alpha} F_{\nu\alpha}) \rightarrow$$

$$f^\mu = \frac{1}{4\pi} \{ \partial^\alpha (F^{\mu\nu} F^{\alpha\nu}) - \frac{1}{4} \partial^\mu (F^{\nu\alpha} F_{\nu\alpha}) \}$$

De **energie-impulstensor** $T^{\mu\alpha}$ van het elektromagnetische veld wordt gedefinieerd als:

$$T^{\mu\alpha} = \frac{1}{4\pi} (F^{\mu\alpha} F^{\alpha\nu} - \frac{1}{4} \eta^{\alpha\mu} F^{\nu\beta} F_{\nu\beta})$$

Hieruit volgt voor f^μ :

$$f^\mu = -\frac{\partial}{\partial x^\alpha} T^{\mu\alpha}$$

De **Maxwell spanningstensor** T^{mn} wordt nu gedefinieerd als:

$$T^{mn} = \frac{1}{4\pi} \{ -E^m E^n - B^m B^n + \frac{1}{2} \delta^{mn} (E^2 + B^2) \} \mid m, n = 1, 2, 3$$

$T^{\mu\alpha}$ is nu te schrijven als:

$$T^{\mu\alpha} = \begin{pmatrix} (1/8\pi)(E^2 + B^2) & (1/4\pi)(\vec{E} \times \vec{B})_x & (1/4\pi)(\vec{E} \times \vec{B})_y & (1/4\pi)(\vec{E} \times \vec{B})_z \\ (1/4\pi)(\vec{E} \times \vec{B})_x & & & \\ (1/4\pi)(\vec{E} \times \vec{B})_y & & T^{mn} & \\ (1/4\pi)(\vec{E} \times \vec{B})_z & & & \end{pmatrix}$$

De T^{0k} (of T^{k0})-componenten vermenigvuldigd met c vormen de zgn. **Poyntingvector** \vec{S} :

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \times \vec{B}$$

$$f^m = -\frac{\partial T^{m\alpha}}{\partial x^\alpha} = -\frac{\partial T^{mn}}{\partial x^n} - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial T^{m0}}{\partial t} = -\frac{\partial t^{mn}}{\partial x^n} - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial S^m}{\partial t} \rightarrow$$

$$\int \int \int_V f^m dV = -\int \int \int_V \frac{\partial T^{mn}}{\partial x^n} dV - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{d}{dt} \int \int \int_V S^m dV = F^m = \frac{dP^m}{dt}$$

$$\text{Stel: } G^m = \frac{1}{c^2} \int \int \int_V S^m dV \rightarrow \frac{dP^m}{dt} = -\int \int \int_V \frac{\partial T^{mn}}{\partial x^n} dV - \frac{dG^m}{dt} \rightarrow$$

$$\frac{d}{dt}(P^m + G^m) = - \int_S T^{mn} dS^n$$

Als V alle velden omvat, dan zijn \vec{E} en \vec{B} nul op de rand, zodat $(d/dt)(P^m + G^m) = 0$, d.w.z. impulsverlies in de deeltjes (dP^m/dt) wordt gecompenseerd door impulsinstroom in het elektromagnetisch veld (dG^m/dt) \rightarrow

$$\vec{G} = \frac{1}{c^2} \int_V \int_V \int_V \vec{S} dV = \frac{1}{4\pi c} \int_V \int_V \int_V \vec{E} \times \vec{B} dV$$

Hierin is $(1/4\pi c)(\vec{E} \times \vec{B})$ de **impulsdichtheid** van het elektromagnetische veld.

Als V niet alle velden omvat, dan is $(d/dt)(P^m + G^m) \neq 0 \rightarrow - \int_S T^{mn} dS^n$ is de impulsinstroom in $V \rightarrow T^{mn} dS^n$ is de hoeveelheid m -impuls die per sec. naar buiten stroomt door het oppervlak $dS^n \rightarrow T^{mn}$ is dus de flux van de m -component van de impuls in de n -richting.

$$cf^0 = -c \frac{\partial T^{0\alpha}}{\partial x^\alpha} = -\frac{\partial T^{00}}{\partial t} - \frac{\partial S^n}{\partial x^n} \rightarrow \int_V \int_V \int_V cf^0 dV = -\frac{d}{dt} \int_V \int_V \int_V T^{00} dV - \int_V \int_V \int_V \frac{\partial S^n}{\partial x^n} dV \Leftrightarrow$$

$$\int_V \int_V \int_V cf^0 dV = \frac{dP^0}{dt}$$

$$\text{Stel: } U = \int_V \int_V \int_V T^{00} dV \rightarrow \frac{d}{dt}(P^0 + U) = - \int_S S^n dS^n$$

Als V alle velden omvat, dan geldt: $(d/dt)(P^0 + U) = 0 \rightarrow U$ is de energie in het elektromagnetische veld: $U = (4\pi)^{-1} \int_V \int_V \int_V \frac{1}{2}(E^2 + B^2) dV \rightarrow$

$$U = \frac{1}{8\pi} \int_V \int_V \int_V (E^2 + B^2) dV$$

De **energiedichtheid** T^{00} van het elektromagnetische veld is dan:

$$T^{00} = \frac{1}{8\pi} (E^2 + B^2) dV$$

$S^n ds^n$ is dus de energie die per sec. naar buiten stroomt door een oppervlak $ds^n \rightarrow \vec{S} = (c/4\pi)(\vec{E} \times \vec{B})$ is de energieflex in het elektromagnetische veld.

De componenten van $T^{\mu\alpha}$ zijn dus:

$$T^{\mu\alpha} = \begin{pmatrix} \text{energiedichtheid} & (1/c)\text{energieflex} \\ (1/c)\text{energieflex} & \text{impulsflux} \end{pmatrix}$$

(De componenten $(1/c) \times$ energieflex zijn equivalent met $(c) \times$ impulsdichtheid.)

Voor het magnetisch veld van een lading q' met snelheid \vec{v} geldt: $\vec{B} = \gamma \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{E}'$, met

$$\vec{E}' = q' \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3}$$

als q' in O is, en $O'(x', y', z', t')$ het ruststelsel van q' ($\vec{v}_{q'} = 0$).
 $v \ll c \Rightarrow \gamma \approx 1 \wedge \vec{x}' \approx \vec{x} - \vec{v}t \equiv \vec{x} - \vec{x}_{q'} \rightarrow$

$$\vec{B} = q' \frac{\vec{v}}{c} \times \frac{\vec{x} - \vec{x}_{q'}}{|\vec{x} - \vec{x}_{q'}|^3}$$

Een eenparig bewegende lading heeft als veldlijnen concentrische cirkels met de baan van de lading, en waarvan de richting past bij de bewegingsrichting via de kurketrekkerregel.

Uit $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ volgt dan dat magnetische veldlijnen altijd gesloten zijn, hetgeen betekent dat er geen magnetische ladingen bestaan.

Voor de kracht die het magnetisch veld van q' uitoefent op een lading q die met snelheid \vec{u} beweegt, geldt:

$$\vec{F}_{q' \text{ op } q} = q \frac{\vec{u}}{c} \times \vec{B}$$

Voor de stroomdichtheid in een materiaal geldt de **Wet van Ohm**:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}$$

Hierin is σ de **conductiviteit** van het materiaal.

De **resistentie** ρ wordt gedefinieerd als het omgekeerde van de conductiviteit \rightarrow

$$\vec{j} = \frac{\vec{E}}{\rho}$$

Hierbij hangen σ en ρ af van het materiaal.

In een geleider met uniforme doorsnede is $j = \frac{I}{A}$ en $E = \frac{\Delta V}{\Delta l} \rightarrow I = \Delta V \frac{A}{\rho \Delta l}$

De **weerstand** R van een geleider wordt gedefinieerd als:

$$R = \rho \frac{\Delta l}{A}$$

Voor de stroomsterkte geldt dan:

$$I = \frac{\Delta V}{R}$$

Voor een tijdsafhankelijk magnetisch veld opgewekt door een constante stroom geldt:

$\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial E}{\partial t} = 0 \rightarrow$ **Wet van Ampère**:

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}$$

$\int_S \nabla \times \vec{B} \cdot d\vec{S} = (4\pi/c) \int_S \vec{j} \cdot d\vec{S} \rightarrow$

$$\oint_C \vec{B} \cdot d\vec{l} = \frac{4\pi}{c} \int_S \vec{j} \cdot d\vec{S}$$

Bij een rechte stroomdraad zijn de magnetische veldlijnen concentrische cirkels \rightarrow
 $2\pi rB = (4\pi/c)I \rightarrow$

$$B_{\text{stroomdraad}} = \frac{2I}{cr}$$

Voor tijdsafhankelijke velden geldt: $\nabla^2 \vec{S}(\vec{x}) = \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{x}) \rightarrow \vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{c} \int \int \int_{V'} \frac{\vec{j}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' \rightarrow$

$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{1}{c} \int \int \int_{V'} \nabla \times \frac{\vec{j}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'$; daar ∇ alleen op \vec{x} werkt, is dit te schrijven als:

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{1}{c} \int \int \int_{V'} \vec{j}(\vec{x}') \times \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} dV'$$

Voor een dunne stroomdraad is $(\vec{x} - \vec{x}')/|\vec{x} - \vec{x}'|^3 \approx \text{constant} \rightarrow$

Wet van Biot-Savart:

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{1}{c} \int_{V'} d\vec{x}' \times \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3}$$

$\vec{j}(\vec{x}) = 0 \Rightarrow \nabla \times \vec{B}(\vec{x}) = 0 \rightarrow \int_C \vec{B} \cdot d\vec{l} = 0 \rightarrow$ Er bestaat een functie $\Phi_m(\vec{x})$ zo, dat geldt:

$$\vec{B}(\vec{x}) = -\nabla \Phi_m(\vec{x})$$

$\Phi_m(\vec{x})$ heet de **magnetische scalaire potentiaal**; uit $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ volgt:

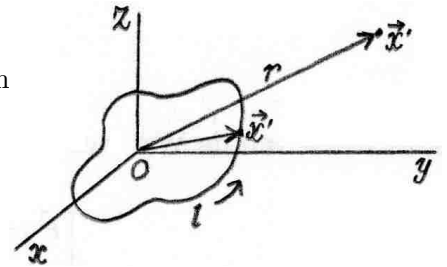
$$\nabla^2 \Phi_m(\vec{x}) = 0$$

$\vec{x} \gg \vec{x}' \Rightarrow \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} \approx \frac{1}{r^3} + \frac{3\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r^5} \rightarrow$

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{I}{c} \left\{ \int_{V'} \frac{1}{r^3} d\vec{x}' \times \vec{x} + \int_{V'} \frac{3\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r^5} d\vec{x}' \times \vec{x} - \int_{V'} \frac{1}{r^3} d\vec{x}' \times \vec{x}' - \int_{V'} \frac{3\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r^5} d\vec{x}' \times \vec{x}' \right\}$$

De eerste term is nul voor een gesloten draad, en de laatste term is te verwaarlozen. Het magnetisch veld van een **magnetische dipool** is nu te schrijven als:

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{3(\vec{m} \cdot \vec{x})\vec{x}}{r^5} - \frac{\vec{m}}{r^3}$$



Hierin is \vec{m} het **magnetische dipoolmoment**:

$$\vec{m}(\vec{x}) = \frac{I}{2c} \int_{V'} \vec{x}' \times d\vec{x}'$$

$\vec{B}(\vec{x})$ volgt ook uit $\vec{B}(\vec{x}) = -\nabla\Phi_m(\vec{x})$ als $\Phi_m(\vec{x})$ van de vorm is:

$$\Phi_m(\vec{x}) = \frac{\vec{m} \cdot \vec{x}}{r^3}$$

Voor het magnetisch dipoolmoment van een cirkelvormige stroomkring is de integraal $2\pi R^2 \rightarrow$

$$m_{\text{cirkel}} = \frac{\pi R^2 I}{c}$$

$$\vec{E} = 0 \Rightarrow \frac{d\vec{p}}{dt} = q \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \rightarrow \vec{v} \cdot \frac{d\vec{p}}{dt} = 0 \Leftrightarrow \vec{v} \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \right) = 0 \rightarrow \vec{v} \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} = 0 \rightarrow$$

v^2 is const.; $d\vec{p}/dt$ wordt dus alleen veroorzaakt door de verandering van de richting van de snelheid $\rightarrow \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \cdot \frac{d\vec{v}}{dt}$

De bewegingsvergelijking van een geladen deeltje in een magnetisch veld is dus:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{q}{m_0 c} \sqrt{1 - (v^2/c^2)} \vec{v} \times \vec{B}$$

De magnetische kracht van een uitwendig magnetisch veld op een draadstuk met stroom dq en snelheid \vec{u} is: $d\vec{F} = dq \frac{\vec{u}}{c} \times \vec{B} = \frac{1}{c} dq \frac{d\vec{x}}{dt} \times \vec{B} = \frac{I}{c} d\vec{x} \times \vec{B} \Rightarrow \vec{F} = \frac{I}{c} \int_l d\vec{x} \times \vec{B}$

Voor een gesloten stroomkring geldt: $\int_l d\vec{x} = 0 \rightarrow \vec{F} = 0$

De stroomkring ondervindt echter wel een torsie: $d\vec{\tau} = \vec{x} \times d\vec{F} = (I/c) \vec{x} \times (d\vec{x} \times \vec{B}) \rightarrow$

$$\vec{\tau} = \frac{I}{c} \int_l \vec{x} \times (d\vec{x} \times \vec{B})$$

$\vec{B} = \text{constant} \Rightarrow \vec{\tau} = (I/2c) \int_l (\vec{x} \times d\vec{x}) \times \vec{B} \rightarrow$

$$\vec{\tau} = \vec{m} \times \vec{B}$$

Substitutie van de Wet van Biot-Savart in \vec{F} geeft de kracht tussen 2 stroomdraden:

$$\vec{F} = \frac{II'}{c^2} \int_l \int_{l'} d\vec{x} \times \left(d\vec{x}' \times \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} \right)$$

Voor een **magnetische monopool** in O met magnetische lading g geldt:

$$\vec{B} = g \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3}$$

Een totale symmetrie in de Maxwellvergelijkingen vereist een toevoeging van een magnetische ladingsdichtheid ρ_m en magnetische stroomdichtheid $\vec{j}_m \rightarrow$

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \wedge \nabla \cdot \vec{B} = 4\pi\rho_m \\ \nabla \times \vec{E} = -(4\pi/c)\vec{j}_m - (1/c)\partial\vec{B}/\partial t \wedge \nabla \times \vec{B} = (4\pi/c)\vec{j} + (1/c)\partial\vec{E}/\partial t \end{cases}$$

De vergelijkingen zijn nu invariant onder een zgn. **dualiteitstransformatie**, d.w.z.:

$$\begin{cases} \vec{E} \rightarrow \vec{B} \wedge \vec{j} \rightarrow \vec{j}_m \wedge \rho \rightarrow \rho_m \\ \vec{B} \rightarrow -\vec{E} \wedge \vec{j}_m \rightarrow -\vec{j} \wedge \rho_m \rightarrow -\rho \end{cases}$$

Echter, integratie van $\nabla \cdot \vec{B} = 4\pi\rho_m$ over het volume van een bol met daarin een monopool geeft: $\int_V \int \nabla \cdot \vec{B} dV = 4\pi g \Leftrightarrow \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 4\pi g \Leftrightarrow \int_S \nabla \times \vec{A} \cdot d\vec{S} = 4\pi g$

Integratie over het boloppervlak minus een kleine cirkel met straal δ geeft via de Wet van Stokes:

$$\int_S \nabla \times \vec{A} \cdot d\vec{S} = \int_l \vec{A} d\vec{l} \rightarrow \delta \rightarrow 0 \Rightarrow \int_l \vec{A} \cdot d\vec{l} = 0 \rightarrow \int_S \nabla \times \vec{A} \cdot d\vec{S} \rightarrow 0 \neq 4\pi g$$

Om de contradictie te vermijden moet er op elk gesloten oppervlak rond de monopool minstens 1 punt zijn waar $\vec{A}(\vec{x})$ een singulariteit heeft zo, dat geldt: $\delta \rightarrow 0 \Rightarrow \int_l \vec{A} \cdot d\vec{l} = 4\pi g$

De zo gevormde lijn singulariteiten heet een **Diracsnaar**.

Voor de impulsdichtheid van het elektromagnetische veld van een monopool in O en een elektrische lading q op de Z -as geldt: $(\vec{E} \times \vec{B})/4\pi c \perp \vec{E}$ en \vec{B} ; de impuls draait dus in cirkels rond de Z -as. Voor het impulsmoment langs de Z -as geldt dan:

$$\vec{J} = \int_V \int \int \vec{r} \times \left(\frac{\vec{E} \times \vec{B}}{4\pi c} \right) dV = \frac{1}{4\pi c} \int_V \int \int [\vec{E}(\vec{r} \cdot \vec{B}) - \vec{B}(\vec{r} \cdot \vec{E})] dV \Leftrightarrow$$

$$\vec{J} = \frac{g}{4\pi c} \int_V \int \int \left[\vec{E} \left(\vec{r} \cdot \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right) - \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} (\vec{r} \cdot \vec{E}) \right] dV$$

Daar $\vec{r} \equiv \vec{x}$, en $\vec{x} \cdot \vec{x} = |\vec{x}|^2$ volgt hieruit:

$$J^k = \frac{g}{4\pi c} \int_V \int \int \left(E^k \frac{1}{|\vec{x}|} - \frac{x^k x^n}{|\vec{x}|^3} E^n \right) dV = \frac{g}{4\pi c} \int_V \int \int E^n \frac{\partial}{\partial x^n} \left(\frac{x^k}{|\vec{x}|} \right) dV \Leftrightarrow$$

$$J^k = -\frac{g}{4\pi c} \int_V \int \int \frac{x^k}{|\vec{x}|} \cdot \frac{\partial}{\partial x^n} E^n dV$$

$\partial E^n / \partial x^n = \nabla \cdot \vec{E} = 0$ m.u.v. de positie van $q \rightarrow x^k / |\vec{x}| = z/z = 1 \rightarrow$

$$J_z = -\frac{g}{4\pi c} \int_V \int \int \nabla \cdot \vec{E} dV = -\frac{g}{4\pi c} \cdot 4\pi q = -\frac{gq}{c}$$

Tevens geldt: $J_z = \frac{1}{2}n\hbar \mid n \in \mathbb{Z} \rightarrow$

Dirac kwantisatievoorwaarde:

$$\boxed{\frac{gq}{c} = \frac{1}{2}n\hbar \mid n \in \mathbb{Z}}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \rightarrow \int_S \nabla \times \vec{E} \cdot d\vec{S} = -\frac{1}{c} \int_S \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{S} \Leftrightarrow \oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S}$$

De **magnetische flux** Φ_B wordt gedefinieerd als:

$$\Phi_B = \int \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S}$$

Hieruit volgt voor de **elektromotorische kracht** \mathcal{E} de **Wet van Faraday**:

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{d\Phi_B}{dt}$$

Een tijdsafhankelijk magnetisch veld induceert dus een elektrisch veld. Als l samenvalt met een geleider, geldt de **Wet van Lenz**:

De geïnduceerde stroom wekt een magnetisch veld op waarvan de flux tegengesteld is aan de oorspronkelijke verandering in de flux.

Daar $\vec{B} \sim \vec{j}$ en het magnetisch veld van de afzonderlijke circuits voldoet aan het superpositiebeginsel, geldt voor de magnetische flux in circuit n geïnduceerd door de andere circuits:

$$\Phi_{B,n} = c \sum_k M_{nk} I_k$$

Hierin zijn de afzonderlijke M_{nk} 's de **inductiecoëfficiënten** waarvoor geldt: $M_{nk} = M_{kn}$

Voor starre, tijdsafhankelijke circuits geldt: $\mathcal{E}_n = -\frac{1}{c} \cdot \frac{d\Phi_{B,n}}{dt} = -\sum_k M_{nk} \frac{dI_k}{dt}$

$n = k \Rightarrow$ **zelfinductiecoëfficiënten** L_n :

$$L_n = M_{nn}$$

Voor de magnetische energie in het systeem van circuits geldt:

$$U = \frac{1}{2} \sum_n \sum_k M_{nk} I_n I_k$$

Voor 1 circuit geldt - met $M_{nk} = L$ - :

$$U = \frac{1}{2} I^2$$

Een LCR-stroomkring bestaat uit een in serie geschakelde wisselspanningsbron, spoel, condensator en weerstand. Daar volgens de regel van Kirchhoff de som van de elektromotorische krachten van de componenten nul is, volgt hieruit: $L \frac{dI}{dt} + RI + \frac{Q}{C} - V_0 \cos \omega t = 0 \rightarrow$

$$L \frac{d^2 I}{dt^2} + R \frac{dI}{dt} + \frac{I}{C} = -\omega V_0 \sin \omega t$$

Het rechterlid is te schrijven als $-i\omega V_0 e^{-i\omega t}$; substitutie van $I = A e^{-i\omega t}$ geeft:

$$A = \frac{-i\omega V_0}{-\omega^2 L - i\omega R + C^{-1}} \rightarrow I = \frac{V_0 e^{-i\omega t}}{-i\omega L + R + (i/\omega C)}$$

De **impedantie** Z wordt gedefinieerd als:

$$Z = -i\omega L + R + \frac{i}{\omega C}$$

De fysische stroom is gelijk aan het reële deel van I :

$$I = \frac{V_o \cos(\omega t - \phi)}{\sqrt{R^2 + \{\omega L - (1/\omega C)^2\}}}$$

Hierin is $\tan \phi = \frac{1}{R} \left(\omega L - \frac{1}{\omega C} \right)$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \rightarrow \iint_S \nabla \times \vec{B} \cdot d\vec{S} = \frac{4\pi}{c} \iint_S \vec{j} \cdot d\vec{S} + \frac{1}{c} \iint_S \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \cdot d\vec{S}$$

De **elektrische flux** Φ_E wordt gedefinieerd als:

$$\Phi_E = \iint_S \vec{E} \cdot d\vec{S}$$

$$\text{Hieruit volgt: } \oint_C \vec{B} \cdot d\vec{l} = \frac{4\pi}{c} \iint_S \vec{j} \cdot d\vec{S} + \frac{1}{c} \cdot \frac{d\Phi_E}{dt}$$

De **verplaatsingsstroomdichtheid** \vec{j}_D wordt gedefinieerd als:

$$\vec{j}_D = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Substitutie in $\oint_C \vec{B} \cdot d\vec{l}$ geeft:

$$\oint_C \vec{B} \cdot d\vec{l} = \frac{4\pi}{c} \iint_S (\vec{j} + \vec{j}_D) \cdot d\vec{S}$$

Dit is een generalisering van de Wet van Ampère, waarbij \vec{j}_D opgevat kan worden als de voortzetting van de reële stroom die als een bron van het magnetische veld werkt.

Analoog aan een elektrische dipool geldt voor de kracht die een magnetisch veld waarvan de sterkte in de ruimte verandert (inhomogeen veld) op een gesloten stroomdraad uitoefent:

$$\vec{F} = \nabla[\vec{m} \cdot \vec{B}(\vec{x})]$$

Voor een continue verdeling van constante stromen binnen een begrensd volume gelden dezelfde formules met magnetisch moment:

$$m = \frac{1}{2c} \iiint_{V'} \vec{x} \times \vec{j}(\vec{x}') dV'$$

Atomen met een *permanent* magnetisch dipoolmoment worden door een uitwendig magnetisch veld t.g.v. de torsie gedraaid in de richting van het uitwendige veld, en wekken zo een eigen magnetisch veld op dat het uitwendige veld versterkt. Bij **paramagnetische** stoffen is deze toename klein, bij **ferromagnetische** stoffen zeer groot. Bij atomen zonder permanent magnetisch dipoolmoment ontstaat een magnetisch veld t.g.v. geïnduceerde dipoolmomenten, die echter het uitwendige veld verzwakken; dit zijn de **diamagnetische** stoffen.

Als n het aantal atomen of moleculen per volume eenheid is en \vec{m} het gemiddeld magnetisch dipoolmoment per atoom, dan geldt, bij een aangelegd uitwendig magnetisch veld, voor het magnetisch moment per volume eenheid, de **magnetisatie** \vec{M} :

$$\boxed{\vec{M} = n\vec{m}}$$

Voor een enkele atomaire magnetische dipool in punt \vec{x} geldt voor de magnetische potentiaal:

$$\Phi_M(\vec{x}) = \frac{\vec{m} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} = -\vec{m} \cdot \nabla \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \rightarrow$$

$$\vec{B} = \nabla \left(\vec{m} \cdot \nabla \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right) = \vec{m} \nabla^2 \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} - \nabla \times \left(\vec{m} \times \nabla \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right) = -\nabla \times \left(\vec{m} \times \nabla \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right) \rightarrow$$

$$\vec{A}(\vec{x}) = -\vec{m} \times \nabla \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

Het dipoolmoment van een volume dV' is $\vec{M}(\vec{x}')dV' \rightarrow d\vec{A}(\vec{x}) = -\vec{M}(\vec{x}') \times \nabla \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' \rightarrow$

$$\vec{A}(\vec{x}) = - \int \int \int_{V'} \vec{M}(\vec{x}') \times \nabla \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' = \int \int \int_{V'} \vec{M}(\vec{x}') \times \nabla' \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' \Leftrightarrow$$

$$\vec{A}(\vec{x}) = \int \int_{S'} \frac{\vec{M}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \times dS' + \int \int \int_{V'} \frac{\nabla' \times \vec{M}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'$$

Hier moet nog de vectorpotentiaal aan toegevoegd worden die hoort bij de stromen t.g.v. de

vrije ladingen van de stof: $\vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{c} \int \int \int_{V'} \frac{\vec{j}_F(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' \rightarrow$

$$\vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{c} \int \int \int_{V'} \frac{\vec{j}_F(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' + \int \int_{S'} \frac{\vec{M}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \times dS' + \int \int \int_{V'} \frac{\nabla' \times \vec{M}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'$$

Vergelijking van de 1-ste term met de 2-de en 3-de laat zien dat de gemagnetiseerde stof reageert alsof het een oppervlakte stroomdichtheid heeft van $c\vec{M}(\vec{x}') \times \hat{n}$, en een volume stroomdichtheid van $c\nabla' \times \vec{M}(\vec{x}')$, de zgn. **magnetische stroomdichtheden**:

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{k}_M(\vec{x}') &= c\vec{M}(\vec{x}') \times \hat{n} \\ \vec{j}_M(\vec{x}') &= c\nabla' \times \vec{M}(\vec{x}') \end{aligned}}$$

Voor de rotatie van een gemagnetiseerde stof geldt:

$$\nabla \times \vec{B} = (4\pi/c)(\vec{j}_F + \vec{j}_M) = (4\pi/c)\vec{j}_F + 4\pi\nabla \times \vec{M} \Leftrightarrow \nabla \times (\vec{B} - 4\pi\vec{M}) = (4\pi/c)\vec{j}_F$$

Het **magnetisch \vec{H} -veld** wordt nu gedefinieerd als:

$$\boxed{\vec{H} = \vec{B} - 4\pi\vec{M}}$$

Hieruit volgt:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}_F$$

\vec{H} is het magnetische analogon van \vec{D} . Voor lineaire, isotrope magnetische stoffen geldt:

$$\vec{M} = \chi \vec{H}$$

Hierin is χ de **magnetische susceptibiliteit**; er geldt nu: $\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M} = (1 + 4\pi\chi)\vec{H}$

De **magnetische permittiviteit** μ wordt gedefinieerd als:

$$\mu = 1 + 4\pi\chi$$

Hieruit volgt:

$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

$\vec{M} = \chi \vec{H}$ geldt voor paramagnetische stoffen ($\chi > 0 \wedge \mu > 1$) en diamagnetische stoffen ($\chi < 0 \wedge \mu < 1$), maar niet voor ferromagnetische stoffen, waarbin **hysteresis** optreedt, d.w.z. het verloop van \vec{B} hangt van de voorgeschiedenis van de stof af.

De magnetisatie in ferromagnetische stoffen is een gevolg van de spinmagnetische momenten van elektronen, die ook zonder uitwendig magnetisch veld over kleine gebieden, de **domeinen**, parallel lopen. Het gemiddelde over grote schaal is nul, maar een uitwendig magnetisch veld richt de domeinen, hetgeen tot een magnetisatie op grote schaal leidt. Bij de **Curietemperatuur** wordt de gerichtheid van de spins in de domeinen t.g.v. thermische verstoringen verbroken.

$$\vec{j}_F = 0 \Rightarrow \nabla \times \vec{H} = 0 \rightarrow \vec{H} = -\nabla\Phi_M \rightarrow \nabla \cdot \vec{B} = \nabla \cdot (\vec{H} + 4\pi\vec{M}) = -\nabla^2\Phi_M + 4\pi\nabla \cdot \vec{M} = 0 \rightarrow \nabla^2\Phi_M = 4\pi\nabla \cdot \vec{M}$$

De virtuele **magnetische pooldichtheid** ρ_M wordt gedefinieerd als:

$$\rho_M = -\nabla \cdot \vec{M}$$

Hieruit volgt de Poissonvergelijking voor de magnetische potentiaal:

$$\nabla^2\Phi_M = -4\pi\rho_M$$

$$\text{Hieruit volgt: } \Phi_M = \int \int \int_{V'} \frac{\rho_M(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' = - \int \int \int_{V'} \frac{\nabla' \cdot \vec{M}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV' + \int \int_{S'} \frac{\vec{M}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dS'$$

Hierbij is de volume-integraal exclusief de oppervlakte van de stof (i.v.m. de discontinuïteit op het oppervlak) ($\vec{M} = 0$ er buiten, niet-nul er binnen)).

Analoog aan de energie resp. energiedichtheid in een lineair diëlectricum geldt voor de energie resp. energiedichtheid in een lineaire magnetische stof:

$$U = \frac{1}{8\pi} \int \int \int_V \vec{H} \cdot \vec{B} dV \quad \wedge \quad u = \frac{1}{8\pi} \vec{H} \cdot \vec{B}$$

Een oscillerende lading q produceert veranderende elektrische- en magnetische velden die zich als bolgolven voortplanten. Op grote afstand van q zijn deze bij benadering vlakke golven. In vacuüm geldt: $\partial_\mu \partial^\mu A^\nu = 0$

Voor vlakke golven die in de richting van de Z -as lopen zijn de oplossingen van deze golfvergelijking van de vorm: $A^\nu = \varepsilon^\nu \sin(\omega t - kz)$

Hierin is $k = 2\pi/\lambda$, $\omega = 2\pi\nu$ en ε^ν een viervector met constante componenten.

Substitutie in $\partial_\mu \partial^\mu A^\nu = 0$ geeft: $-\varepsilon^\nu(\omega^2/c^2) \sin(\omega t - kz) + \varepsilon^\nu k^2 \sin(\omega t - kz) = 0 \rightarrow k = \pm(\omega/c)|\omega > 0$

Voor de golf in de richting van de pos. Z -as is $k > 0 \rightarrow k = \omega/c \rightarrow v = \nu\lambda = \omega/k = c$

Tevens moet aan de Lorentzvoorwaarde voldaan worden, substitutie van A^ν in $\partial_\nu A^\nu = 0$ geeft: $\varepsilon^0(\omega/c) \cos(\omega t - kz) - \varepsilon^2 k \cos(\omega t - kz) = 0 \rightarrow \varepsilon^0 = \varepsilon^3 \rightarrow$

Slechts 3 van de 4 componenten van ε zijn onafhankelijk \rightarrow

$\varepsilon^\nu = \varepsilon_{(1)}^\nu + \varepsilon_{(2)}^\nu + \varepsilon_{(3)}^\nu = (0, 1, 0, 0) + (0, 0, 1, 0) + (1, 0, 0, 1)$

Stel: $A^\nu = A(0, 1, 0, 0) \sin(\omega t - kz) \rightarrow$

$E_x = F^{10} = \partial^1 A^0 - \partial^0 A^1 = -\partial^0 A^1 = -(A\omega/c) \cos(\omega t - kz)$

$B_y = F^{13} = \partial^1 A^3 - \partial^3 A^1 = \partial_3 A^1 = -(A\omega/c) \cos(\omega t - kz)$

$E_y = E_x = B_x = B_z = 0$

Stel: $A^\nu = A(0, 0, 1, 0) \sin(\omega t - kz) \rightarrow$

$E_y = F^{20} = \partial^2 A^0 - \partial^0 A^2 = -\partial^0 A^2 = -(A\omega/c) \cos(\omega t - kz)$

$B_x = F^{32} = \partial^3 A^2 - \partial^2 A^3 = -\partial_3 A^2 = (A\omega/c) \cos(\omega t - kz)$

$E_x = E_z = B_y = B_z = 0$

Stel: $A^\nu = A(1, 0, 0, 1) \sin(\omega t - kz) \rightarrow$

$E_x = E_y = E_z = B_x = B_y = B_z = 0$

De eerste 2 golven hebben elektrische- en magnetische velden die loodrecht op elkaar staan en dezelfde amplitude hebben, en oscilleren in fase; de 3-de golf is een “spookgolf”, d.w.z. een golf die geen energie of impuls heeft en dus geen fysische realiteit is.

De fysisch reële golven stellen elektromagnetische golven voor met 2 onafhankelijke lineaire polarisaties. Per definitie is het polarisatievlak het vlak van de elektrische veldvector.

Stel: $E_0 = -A\omega/c \rightarrow$

$$\begin{array}{l} \vec{E}_{(1)} = E_0 \cos(\omega t - kz) \hat{x} = E_0 e^{-i(\omega t - kz)} \hat{x} \\ \vec{B}_{(1)} = E_0 \cos(\omega t - kz) \hat{y} = E_0 e^{-i(\omega t - kz)} \hat{y} \\ \vec{E}_{(2)} = E_0 \cos(\omega t - kz) \hat{y} = E_0 e^{-i(\omega t - kz)} \hat{y} \\ \vec{B}_{(2)} = -E_0 \cos(\omega t - kz) \hat{x} = -E_0 e^{-i(\omega t - kz)} \hat{x} \end{array}$$

Hierin zijn in de complexe schrijfwijze de reële delen de fysische velden.

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \rightarrow \nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{B} \Leftrightarrow \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} = -\frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

Daar $\nabla \cdot \vec{E} = 0$, volgt hieruit de golfvergelijking van het elektrisch veld in vacuüm:

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

Analoog geldt voor de golfvergelijking van het magnetisch veld in vacuüm:

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}$$

Voor een vlakke golf die niet in de richting van de Z -as loopt, is de golf functie evenredig met $\sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})$.

Hierin is \vec{k} de **golfvector** waarvoor geldt: $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \omega^2/c^2$

De **golf viervector** k^μ wordt nu gedefinieerd als:

$$k^\mu = (k^0, k^1, k^2, k^3) = \left(\frac{\omega}{c}, k_x, k_y, k_z \right)$$

De golf functie is nu te schrijven als:

$$A^\nu = \varepsilon^\nu \sin(\omega t - k^\mu x_\mu)$$

Substitutie van $\vec{E}_{(1)}$ en $\vec{B}_{(1)}$ in T^{00} geeft de energiedichtheid van een vlakke golf:

$$T^{00} = \frac{1}{4\pi} E_0^2 \cos^2(\omega t - kz)$$

Substitutie van $\vec{E}_{(1)}$ en $\vec{B}_{(1)}$ in \vec{S} geeft de energieflex van een vlakke golf:

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} E_0^2 \cos^2(\omega t - kz) \hat{z}$$

Substitutie van $\vec{E}_{(1)}$ en $\vec{B}_{(1)}$ in T^{33} geeft de impulsflux van een vlakke golf:

$$T^{33} = \frac{1}{4\pi} E_0^2 \cos^2(\omega t - kz)$$

Voor de gemiddelde waarden volgen hieruit:

$$\overline{T^{00}} = \frac{E_0^2}{8\pi} \quad \wedge \quad \overline{\vec{S}} = \frac{c}{8\pi} E_0^2 \hat{z} \quad \wedge \quad \overline{T^{33}} = \frac{E_0^2}{8\pi}$$

Voor de impulsmomentdichtheid van een golfpakket geldt:

$$\frac{1}{4\pi c} \vec{x} \times (\vec{E} \times \vec{B}) = \frac{1}{4\pi c} \vec{x} \times \{ \vec{E} \times (\nabla \times \vec{A}) \} = \frac{1}{4\pi c} \vec{x} \times \{ E^n \nabla A^n - (\vec{E} \cdot \nabla) \vec{A} \} \rightarrow$$

$$\text{netto impulsmoment: } \vec{J} = (4\pi c)^{-1} \left\{ \int_V \int \int \vec{x} \times (E^n \nabla A^n) dV - \int_V \int \int \vec{x} \times (\vec{E} \cdot \nabla) \vec{A} dV \right\}$$

$$\begin{aligned} \vec{x} \times (\vec{E} \cdot \nabla) \vec{A} &= \nabla^n (E^n \vec{x} \times \vec{A}) - \vec{x} \times \vec{A} \nabla \cdot \vec{E} + \vec{A} \times (\vec{E} \cdot \nabla) \vec{x} = \nabla^n (E^n \vec{x} \times \vec{A}) - \vec{E} \times \vec{A} \\ \int_V \int \int \nabla^n (E^n \vec{x} \times \vec{A}) dV &= \int_S E^n \vec{x} \times \vec{A} ds^n = 0, \text{ daer } E^n = 0 \text{ in alle punten buiten het} \\ &\text{golfpakket.} \end{aligned}$$

Het impulsmoment van een vlakke golf is nu te schrijven als:

$$\vec{J} = \frac{1}{4\pi c} \left\{ \int_V \int \int \vec{x} \times (E^n \nabla A^n) dV + \int_V \int \int \vec{E} \times \vec{A} dV \right\}$$

De 1-ste integraal stelt het baanimpulsmoment voor, de 2-de de **spin**, zijnde het impulsmoment parallel of antiparallel aan de voortplantingsrichting van het golfpakket, en is een gevolg van een circulaire energiestroom in het golfpakket.

In een niet-geleidend medium is de ladings- en stroomdichtheid van vrije ladingen nul maar, als het medium polarisatie en magnetisatie vertoont, dan is er wèl een ladings- en stroomdichtheid t.g.v. gebonden ladingen.

Voor de magnetisatiestroom geldt: $\vec{j}_M = c\nabla \times \vec{M}$. Als de polarisatie inhomogeen is, dan geldt voor de ladingsdichtheid van de gebonden ladingen: $\rho_p = -\nabla \cdot \vec{P}$

Daar de polarisatie gedefinieerd wordt als het dipoolmoment per volume-eenheid, is ze gelijk aan de som van alle dipoolmomenten van de gebonden ladingen in een volume ΔV :

$$\vec{P} = \sum_i \frac{q_i x_i}{\Delta V} \rightarrow \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = \sum_i \frac{q_i v_i}{\Delta V} \rightarrow$$

Voor de **polarisatiestroom** \vec{j}_p geldt:

$$\boxed{\vec{j}_p = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}}$$

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \vec{P} \wedge \nabla \cdot \vec{j}_p = \nabla \cdot \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \rightarrow$$

$$\boxed{\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_p = 0}$$

De **Maxwellvergelijkingen in een medium** zijn nu te schrijven als:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 4\pi(\rho_F - \nabla \cdot \vec{P}) \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} &= \frac{4\pi}{c} \left(\vec{j}_F + c\nabla \times \vec{M} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \right) + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

Daar $\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}$ en $\vec{H} = \vec{B} - 4\pi\vec{M}$ zijn de Maxwellvergelijkingen ook te schrijven als:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{D} &= 4\pi\rho_F \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{H} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j}_F + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \end{aligned}$$

In een niet-geleidend medium is $\rho_F = 0$ en $\vec{j}_F = 0$; als het medium tevens lineair, isotroop en homogeen is, dan geldt: $\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$ en $\vec{B} = \mu \vec{H}$, met ε en μ constant.

De Maxwellvergelijkingen zijn dan te schrijven als:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} &= \frac{\varepsilon \mu}{c} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

Analoog aan de golfvergelijking in vacuüm geldt voor een niet-geleidend medium:

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{\varepsilon \mu}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad \wedge \quad \nabla^2 \vec{B} = \frac{\varepsilon \mu}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}$$

De oplossingen zijn gelijk aan die voor het vacuüm, met alleen de magnetische velden vermenigvuldigd met een factor $\sqrt{\varepsilon \mu}$.

In een geleidend medium wekt het elektrisch veld een geleidingsstroom op: $\vec{j}_F = \sigma \vec{E}$

De Maxwellvergelijkingen zijn nu te schrijven als (met $\rho_F = 0$):

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} &= \frac{4\pi\sigma\mu}{c} \vec{E} + \frac{\varepsilon\mu}{c} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

Voor een oscillerend elektrisch veld met een tijdafhankelijkheid van $e^{-i\omega t}$ geldt:

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = -i\omega \vec{E} \rightarrow \vec{E} = \frac{i}{\omega} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \rightarrow \nabla \times \vec{B} = \frac{\mu}{c} \left(\varepsilon + \frac{4\pi i \sigma}{\omega} \right) \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Deze vergelijking is identiek aan die voor een niet-geleidend medium als ε vervangen wordt door $\varepsilon + (4\pi i \sigma / \omega)$.

Een versnelde puntlading q veroorzaakt een verstoring in de (quasi) statische elektrische- en magnetische velden van q . Daar de velden trachten hun oorspronkelijke configuratie te herstellen, ontstaat er een bolvormige elektromagnetische golfpuls die zich met de lichtsnelheid van q af beweegt.

In het gebied van de verstoring heeft het elektrisch veld een longitudinale (radiale) - en een transversale (tangentiële) component. De 1-ste is het Coulombveld ($\propto r^{-2}$), de 2-de het

stralingsveld ($\propto r^{-1}$). Daar de viervectorpotentialiaal voor een willekeurige ladings- en stroomverdeling gegeven wordt door $\left(\frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) A^\mu(t, \vec{x}) = \frac{4\pi}{c} j^\mu(t, \vec{x})$, geldt dit ook voor een puntlading.

De algemene oplossing van deze vergelijking heet de **geretardeerde vierpotentialiaal**:

$$A^\mu(t, \vec{x}) = \frac{1}{c} \int \int \int_{V'} \frac{j^\mu\left(t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}, \vec{x}'\right)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'$$

De tijdvariabele $t' = t - (|\vec{x} - \vec{x}'|/c)$ heet de **geretardeerde tijd**, die eerder dan t is met een interval dat gelijk is aan de tijd die licht nodig heeft om van \vec{x}' naar \vec{x} te reizen. De potentialiaal in \vec{x} op tijd t wordt dus bepaald door de bijdragen van ladingen op tijd $t' < t$. Een puntlading kan benaderd worden door een kleine bolvormige lading waarval de straal naar nul nadert. Voor de A^0 -component van A^μ geldt dan:

$$A^0(t, \vec{x}) = \int \int \int_{V'} \frac{\rho(t - (|\vec{x} - \vec{x}'|/c), \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} dV'; \text{ daar } V' \text{ zeer klein is, is } \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \approx \text{const.} \rightarrow$$

$$\Phi(t, \vec{x}) = \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \int \int \int_{V'} \rho\left(t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}, \vec{x}'\right) dV'$$

Een informatie-collectorschil is een mathematische bolschil met MP \vec{x} die met de lichtsnelheid naar \vec{x} instort en \vec{x} op tijd t bereikt. Een punt \vec{x}' ($|\vec{x}'| < |\vec{x}|$) wordt dan onderweg gepasseerd op het geretardeerde tijdstip $t' = t - (|\vec{x} - \vec{x}'|)/c$.

Als een bolschil in tijd dt een volume dV' doorloopt, met boloppervlakte dS , dan geldt: $dV' = c dt dS$. Als de snelheid van de ladingen in V' \vec{v} is, dan is de hoeveelheid lading die de bolschil aan de binnenkant in dt verlaat $\rho \vec{v} \cdot \hat{n} dt dS$. Hieruit volgt voor de nettolading dq die door de bolschil omvat wordt in tijd dt : $dq = \rho dV' - \rho \vec{v} \cdot \hat{n} dt dS$; hierin is \hat{n} een eenheidsvector gericht van \vec{x}' naar $\vec{x} \rightarrow dq = \rho dV' - \rho \frac{\vec{v}' \cdot \hat{n}}{c} dV' \Leftrightarrow \rho dV' = \frac{dq}{1 - (\vec{v}' \cdot \hat{n}/c)} \rightarrow$

$$\Phi(t, \vec{x}) = \left[\frac{q}{\{1 - (\vec{v}' \cdot \hat{n}/c)\} |\vec{x} - \vec{x}'|} \right]$$

Analoog geldt voor de componenten A^1 , A^2 en A^3 (met $\vec{j} = q\vec{v}$):

$$\vec{A}(t, \vec{x}) = \frac{1}{c} \left[\frac{q\vec{v}'}{\{1 - (\vec{v}' \cdot \hat{n}/c)\} |\vec{x} - \vec{x}'|} \right]$$

Φ en \vec{A} heten de **Liénard-Wiechert potentialen**: alle variabelen binnen de vierkante haken moeten berekend worden op het tijdstip t' .

Daar $j^\mu = qu^\mu$ voor een puntlading, zijn de potentialen te schrijven als:

$$A^\mu(t, \vec{x}) = \frac{1}{c} \left[\frac{q\sqrt{1 - (v'^2/c^2)} u'^\mu}{\{1 - (\vec{v}' \cdot \hat{n}/c)\} |\vec{x} - \vec{x}'|} \right]$$

De elektrische- en magnetische velden van een versnelde puntlading volgen nu uit

$$\vec{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \text{ en } \vec{B} = \nabla \times \vec{A}.$$

De termen in \vec{E} en \vec{B} die omgekeerd evenredig zijn met $|\vec{x} - \vec{x}'|$ heten de **stralingsvelden**:

$$\vec{E} = \frac{q}{c^2} \left[\frac{\hat{n} \times \{(\hat{n} - (\vec{v}'/c)) \times \vec{a}'\}}{\{1 - (\hat{n} \cdot \vec{v}'/c)\}^3 |\vec{x} - \vec{x}'|} \right]$$

$$\vec{B} = -\frac{q}{c^2} \left[\frac{\hat{n} \times \vec{a}' \{1 - (\hat{n} \cdot \vec{v}'/c)\} + (\hat{n} \times \vec{v}')(\hat{n} \cdot \vec{a}'/c)}{\{1 - (\hat{n} \cdot \vec{v}'/c)\}^3 |\vec{x} - \vec{x}'|} \right]$$

\vec{E} en \vec{B} zijn dus evenredig met $|\vec{a}'|$ en $1/|\vec{x} - \vec{x}'|$, en staan loodrecht op \hat{n} , en \vec{B} staat loodrecht op \vec{E} :

$$\vec{B} = [\hat{n}] \times \vec{E}$$

$$\vec{v} \ll c \Rightarrow \vec{E} = \frac{q}{c^2} \left[\frac{\hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{a}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right] \rightarrow E = B = \frac{q}{c^2} \left[\frac{a' \sin \theta}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right] \quad \left| \quad \angle(\hat{n}, \vec{a}') = \theta \rightarrow \right.$$

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} E^2 [\hat{n}] = \frac{q}{4\pi c^3} \left[\frac{a'^2 \sin^2 \theta}{|\vec{x} - \vec{x}'|^2} \hat{n} \right]$$

Als $[|\vec{x} - \vec{x}'|^2] d\Omega$ de oppervlakte van een ruimtehoek $d\Omega$ is, dan is de hoeveelheid uitgezonden straling per eenheidsruimtehoek: $\frac{dP}{d\Omega} = [|\vec{x} - \vec{x}'|^2] S = \frac{q^2}{4\pi c^3} [a'^2 \sin^2 \theta] \rightarrow$

$$P = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{dP}{d\Omega} \sin \theta d\theta d\phi = \frac{q^2}{4\pi c^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta d\phi \rightarrow$$

Formule van Larmor:

$$P = \frac{2q^2}{3c^3} [a'^2]$$

Voor de actie-integraal S van een vrij deeltje geldt dat deze invariant moet zijn onder een Lorentztransformatie. Hieruit volgt dat S van een scalaire grootheid moet afhangen. Tevens moet de integrand een 1-ste orde differentiaal zijn \rightarrow

$$S = -\alpha \int_a^b ds = \int_{t_1}^{t_2} L dt$$

Hierin is α ee pos. constante die van het deeltje afhangt.

Substitutie van $ds = c dt \sqrt{1 - (v^2/c^2)}$ geeft: $S = - \int_{t_1}^{t_2} \alpha c \sqrt{1 - (v^2/c^2)} dt$

Hierin is $L = -\alpha c \sqrt{1 - (v^2/c^2)} \approx -\alpha c + (\alpha v^2/2c)$.

$v \ll c \Rightarrow L \rightarrow \frac{1}{2} m v^2$; hieruit volgt, daar $-\alpha c$ een constante is en dus weggelaten kan worden: $\frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} \alpha v^2 / c \rightarrow \alpha = mc \rightarrow$

$$S = -mc \int_a^b ds \quad \wedge \quad L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Experimenteel blijkt dat de eigenschappen van een deeltje m.b.t. de wisselwerking met het elektromagnetische veld bepaald worden door de lading e van het deeltje, en die van het veld door de vierpotentiala A_i . Deze gevel als bijdrage aan de actie-integraal de term $-(e/c) \int_a^b A_i dx^i$. \rightarrow Actie-integraal voor een geladen deeltje in een elektromagnetisch veld:

$$S = \int_a^b \left(-mcds - \frac{e}{c} A_i dx^i \right)$$

De factor $1/c$ dient voor rekenkundige redenen.

De vierpotentiaal is te schrijven als: $A_i = (\phi, -\vec{A}) \rightarrow$

$$A_i dx^i = (\phi, -\vec{A}) \cdot (cdt, d\vec{r}) = \phi cdt - \vec{A} \cdot d\vec{r} \Rightarrow S = \int_a^b [-mcds + (e/c)\vec{A} \cdot d\vec{r} - e\phi dt]$$

Substitutie van $ds = cdt\sqrt{1 - (v^2/c^2)}$ en $\vec{v} = d\vec{r}/dt$ geeft:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} [-mc^2\sqrt{1 - (v^2/c^2)} + (e/c)\vec{A} \cdot \vec{v} - e\phi] dt$$

Hierin is de integrand de Lagrangiaan voor een geladen deeltje in een elektromagnetisch veld:

$$L_{EM} = -mc^2\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + \frac{e}{c}\vec{A} \cdot \vec{v} - e\phi$$

De gegeneraliseerde impuls \vec{P} van het deeltje volgt uit de afgeleide van L_{EM} naar \vec{v} :

$$\frac{\partial L_{EM}}{\partial \vec{v}} = -mc^2 \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \left(\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right) + \frac{e}{c}\vec{A} = -mc^2 \cdot \frac{-\vec{v}}{c^2\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} + \frac{e}{c}\vec{A} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} + \frac{e}{c}\vec{A} \rightarrow$$

$$\vec{P} = \vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}$$

De Hamiltoniaan voor een geladen deeltje in een elektromagnetisch veld volgt uit:

$$H_{EM} = \vec{v} \cdot \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} - L = \frac{mv^2}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} + \frac{e}{c}\vec{v} \cdot \vec{A} + mc^2\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - \frac{e}{c}\vec{A} \cdot \vec{v} + e\phi = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} + e\phi$$

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{H_{EM} - e\phi}{c} \right)^2 &= \frac{m^2 c^2}{1 - (v^2/c^2)} \\ \left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 &= \frac{m^2 v^2}{1 - (v^2/c^2)} \end{aligned} \right\} \rightarrow \left(\frac{H_{EM} - e\phi}{c} \right)^2 = m^2 c^2 + \left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 \rightarrow$$

$$H_{EM} = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2} + e\phi$$

$$v \ll c \Rightarrow L = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{e}{c}\vec{A} \cdot \vec{v} - e\phi \rightarrow \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + \frac{e}{c}\vec{A} \rightarrow H_{EM} = \frac{1}{2}mv^2 + e\phi$$

Substitutie van $\vec{v} = \vec{p}/m = [\vec{P} - (e/c)\vec{A}]/m$ geeft:

$$H_{EM} = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + e\phi \quad \left| \quad v \ll c \right.$$

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{r}} \nabla L = \frac{e}{c} \nabla \vec{A} \cdot \vec{v} - e \nabla \phi$$

$\nabla(\vec{A} \cdot \vec{v}) = (\vec{A} \cdot \nabla)\vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{A} + \vec{v} \times (\nabla \times \vec{A}) + \vec{A} \times (\nabla \times \vec{v})$; daar bij de differentiatie naar \vec{r} \vec{v} constant gehouden wordt, volgt hieruit: $\nabla(\vec{A} \cdot \vec{v}) = (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{A} + \vec{v} \times (\nabla \times \vec{A}) \rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \vec{v}} \right) = \frac{\partial L}{\partial \vec{r}}$

is te schrijven als:

$$\frac{d}{dt} \left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A} \right) = \frac{e}{c}(\vec{v} \cdot \nabla)\vec{A} + \frac{e}{c}\vec{v} \times (\nabla \times \vec{A}) - e \nabla \phi$$

Substitutie van $\frac{d\vec{A}}{dt} = \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{A}$ geeft de bewegingsvergelijking van een geladen deeltje in een elektromagnetisch veld:

$$\boxed{\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{e}{c} \cdot \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - e\nabla\phi + \frac{e}{c}\vec{v} \times (\nabla \times \vec{A})}$$

De kracht op een deeltje bestaat uit 3 termen waarvan de 1-ste 2 - per eenheid van lading - de elektrische veldsterkte $\vec{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - \nabla\phi$ vormen, en de term tussen haakjes - per eenheid van lading - de magnetische veldsterkte $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ vormt.

De vector- en scalarpotentiaal zijn niet éénduidig bepaald, daar de transformatie

$A'_k = A_k - \frac{\partial f}{\partial x^k}$, met f een willekeurige functie van (x, y, z, t) , \vec{E} en \vec{B} niet beïnvloedt; \vec{A} en ϕ kunnen dan ook geschreven worden als:

$$\boxed{\vec{A}' = \vec{A} + \nabla f \quad \wedge \quad \phi' = \phi - \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial t}}$$

Dit volgt ook uit het feit dat \vec{E} en \vec{B} alleen afgeleiden van \vec{A} en ϕ bevatten. Alle vergelijkingen van fysische betekenis moeten invariant zijn onder deze potentiaaltransformaties; dit heet **ijk-invariantie**. Door de niet-éénduidigheid van \vec{A} en ϕ kunnen ze zo gekozen worden dat ze aan 1 nevenvoorwaarde moeten voldoen.

De bewegingsvergelijking van een geladen deeltje in een elektromagnetisch veld in 4 dimensies volgt (ook) uit de variatie van de actie-integraal:

$$\delta S = \delta \int_a^b [-mcds - (e/c)A_i dx^i] = 0$$

Substitutie van $ds = \sqrt{dx_i dx^i}$ in de integrand geeft:

$$\begin{aligned} -mxd s - \frac{e}{c} A_i dx^i &= -mc \frac{dx_i dx^i}{ds} - \frac{e}{c} A_i dx^i \rightarrow \\ -mc \frac{dx_i}{ds} d\delta x^i - \frac{e}{c} A_i d\delta x^i - \frac{e}{c} \delta A_i dx^i &= - \left(m c u_i d\delta x^i + \frac{e}{c} A_i d\delta x^i + \frac{e}{c} \delta A_i dx^i \right) \rightarrow \end{aligned}$$

$$mc \int_a^b u_i d\delta x^i + (e/c) \int_a^b A_i d\delta x^i + (e/c) \int_a^b \delta A_i dx^i = 0 \Leftrightarrow$$

$$mc \left\{ [u_i \delta x^i]_a^b - \int_a^b \delta x^i du_i \right\} + (e/c) \left\{ [A_i \delta x^i] - \int_a^b \delta x^i dA_i \right\} + e/c \int_a^b \delta A_i dx^i = 0$$

$$\text{Daar de coördinaten in } a \text{ en } b \text{ constant zijn, is } [m c u_i \delta x^i + (e/c) A_i \delta x^i]_a^b = 0 \rightarrow$$

$$\int_a^b [m c du_i \delta x^i + (e/c) \delta x^i dA_i - (e/c) \delta A_i dx^i] = 0$$

Substitutie van $dA_i = \frac{\partial A_i}{\partial x^k} dx^k$ en $\delta A_i = \frac{\partial A_i}{\partial x^k} \delta x^k$ geeft:

$$\int_a^b \left(m c du_i \delta x^i + \frac{e}{c} \cdot \frac{\partial A_i}{\partial x^k} \delta x^i dx^k - \frac{e}{c} \cdot \frac{\partial A_i}{\partial x^k} dx^i \delta x^k \right) = 0$$

Vermenigvuldiging van de 1-ste term in de integrand met ds/ds , verwisseling van de 3-de term van de indices i en k en substitutie van $dx^i = u^i ds \equiv dx^k = u^k ds$ geeft:

$$\int_a^b \left(m c \frac{du_i}{ds} ds \delta x^i + \frac{e}{c} \cdot \frac{\partial A_i}{\partial x^k} \delta x^i u^k ds - \frac{e}{c} \cdot \frac{\partial A_k}{\partial x^i} u^k ds \delta x^i \right) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\int_a^b \left[m c \frac{du_i}{ds} - \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_k}{\partial x^i} - \frac{\partial A_i}{\partial x^k} \right) u^k \right] \delta x^i ds = 0 \rightarrow m c \frac{du_i}{ds} - \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_k}{\partial x^i} - \frac{\partial A_i}{\partial x^k} \right) u^k = 0 \rightarrow$$

$$mc \frac{du_i}{ds} = \frac{e}{c} F_{ik} u^k \rightarrow$$

$$\boxed{mc \frac{du^i}{ds} = \frac{e}{c} F^{ik} u_k}$$

Voor de totale actie van een aantal deeltjes in een elektromagnetisch veld geldt:

$$S = S_f + S_m + S_{mf}$$

Hierin is S_f de actie van het veld zonder deeltjes, S_m de actie van de deeltjes en S_{mf} de actie van de wisselwerking tussen de deeltjes en het veld.

Daar voor een enkel vrij deeltje $S = -mc \int_a^b ds$, geldt voor een aantal deeltjes:

$$S_m = -\sum mc \int_a^b ds$$

Daar voor 1 deeltje in een elektromagnetisch veld $S = -(e/c) \int_a^b A_k dx^k$, geldt voor een aantal deeltjes: $S_{mf} = -\sum (e/c) \int_a^b A_k dx^k$

Hierin is elke term A_k dec potentiaal van het veld in dat punt van de ruimtetijd waar het bijbehorende deeltje zich bevindt.

Daar voor het elektromagnetische veld het superpositiebeginsel geldt, moeten de veldvergelijkingen die het elektromagnetische veld beschrijven lineaire differentiaalvergelijkingen zijn. Dit is alleen dan het geval als in de integrand van S_f een kwadratische uitdrukking van het veld staat. Daar de potentialen niet éénduidig bepaald zijn, kunnen deze niet in de integrand voorkomen, zodat alleen de elektromagnetische veldtensor F_{ik} overblijft. Omdat S_f een scalaire grootheid is, moet de integrand dus ook een scalar zijn, d.w.z. van de vorm $F_{ik} F^{ik} \rightarrow S = a \int_a^b \int_{t_1}^{t_2} F_{ik} F^{ik} dV dt$

Hierin is a een neg. constante (neg. daar S_f anders geen min. kan bezitten, hetgeen volgens het principe van Hamilton vereist is) en strekt $dV = dx dy dz$ zich over de hele ruimte uit. De waarde van a hangt af van de gebruikte eenheden voor het veld. In Gaussische eenheden geldt: $a = -1/16\pi$

Substitutie van $d\Omega = c dt dV$ geeft dan: $S_f = -(1/16\pi c) \int F_{ik} F^{ik} d\Omega$

Voor de totale actie van het elektromagnetische veld en de deeltjes geldt dus:

$$\boxed{S = -\sum \int mcds - \sum \int \frac{e}{c} A_k dx^k - \frac{1}{16\pi c} F_{ik} F^{ik} d\Omega}$$

Hierbij hebben A_k en F_{ik} betrekking op het reële veld, d.w.z. het uitwendige elektromagnetische veld plus het veld dat door de geladen deeltjes wordt voortgebracht.

Quantum Mechanics

Thermische straling is straling door een lichaam uitgezonden dat in thermisch evenwicht verkeert met zijn omgeving, d.w.z. de hoeveelheid uitgezonden straling per sec. is gelijk aan de hoeveelheid geabsorbeerde straling per sec.

Een **zwart lichaam** is een lichaam dat alle opvallende energie absorbeert.

Postulaten van Planck:

1. Elk atoom van een zwart lichaam gedraagt zich als een harmonische oscillator met frequentie ν .
2. Elke oscillator emitteert of absorbeert een hoeveelheid energie die evenredig is met ν , ofwel de energie van een atomaire oscillator is gequantiseerd:

$$E = h\nu$$

De energieniveaus E_n van een harmonisch oscillator zijn dan gelijk aan:

$$E_n = nh\nu \quad | \quad n \in \mathbb{N}$$

Hierin is $h \approx 6,6 \cdot 10^{-34}$ Js de **constante van Planck**.

Als $\omega(\nu)d\nu$ de energiedichtheid van straling is met een frequentie tussen ν en $\nu + d\nu$, dan is $\omega(\nu)$ de energiedichtheid per eenheid van frequentie-interval ofwel de **monochromatische energiedichtheid**.

Voor de energiedichtheid van de straling van een zwart lichaam geldt nu de

Stralingswet van Planck:

$$\omega(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Uit $\omega(\lambda)d\lambda = -\omega(\nu)d\nu$ en $\nu = \frac{c}{\lambda} \rightarrow d\nu = -\frac{c}{\lambda^2}d\lambda$ volgt:

$$\omega(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$$

Stel: $\frac{hc}{\lambda kT} = x \rightarrow \omega(\lambda) = \frac{8\pi k^5 T^5}{c^4 h^4} \cdot \frac{x^5}{e^x - 1}$

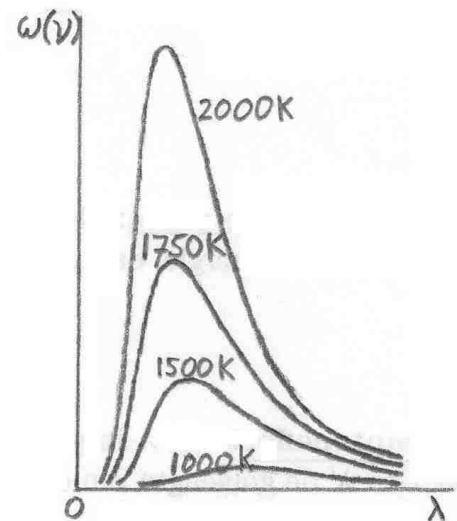
De golflengte waarbij $\omega(\lambda)$ van een zwart lichaam bij een gegeven T max. is volgt dat uit:

$$\frac{d\omega}{dx} = 0 \rightarrow e^{-x} + 0,2x - 1 = 0 \rightarrow x \approx 5,0 \rightarrow$$

$$\lambda_{max} T \approx \frac{hc}{5k} = b \rightarrow$$

Verschuivingswet van Wien:

$$\lambda_{max} T = b$$



Voor de totale energiedichtheid geldt: $\omega = \int_0^{\infty} \omega(\nu) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$

Substitutie van $x = \frac{h\nu}{kT}$ geeft: $\omega = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \cdot \frac{\pi^4}{15} \rightarrow$

Wet van Stefan-Boltzmann:

$$\omega = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3 h^3} T^4$$

De **emittantie** F van een zwart lichaam, zijnde de uitgezonden energie per m^2 en per sec., is dan:

$$F = \sigma T^4$$

Hierin is $\sigma = \frac{1}{4}ca$, met $a = 8\pi^5 k^4 / 15c^3 h^3$.

$\nu \gg 1 \Rightarrow e^{h\nu/kT} - 1 \approx e^{h\nu/kT} \rightarrow$

Stralingswet van Wien:

$$\omega(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT}}$$

$\nu \ll 1 \Rightarrow e^{h\nu/kT} - 1 \approx h\nu/kT \rightarrow$

Stralingswet van Rayleigh-Jeans:

$$\omega(\nu) = \frac{8\pi kT \nu^2}{c^3}$$

Foto-elektrisch effect: als ϕ de uittreedenergie van een elektron in een metaal is en $E = h\nu$ de opvallende energie, dan geldt voor de kinetische energie T van het elektron:

$$T = h\nu - \phi$$

Comptoneffect: als λ de golflengte is van elektromagnetische straling die op een vrij elektron valt en λ' de golflengte van de door het elektron verstrooide straling, dan geldt:

$$\lambda - \lambda' = \lambda_c (1 - \cos \theta)$$

De golflengte van de verstrooide straling hangt dus af van de richting van de verstrooiing; λ_c heet de **Comptongolflengte** voor elektronen waarvoor geldt:

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c}$$

Een **foton** is een deeltje met rustmassa $m_0 = 0$ en vormt het quantum van elektromagnetische energie en impuls dat bij processen tussen elektromagnetische straling en geladen deeltjes wordt uitgewisseld, en waarvoor geldt:

$$E = h\nu \quad \wedge \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

De **hoekfrequentie** ω , het **golfgetal** k en de **gereduceerde constante van Planck** \hbar worden gedefinieerd als resp. $\omega = 2\pi\nu$, $k = 2\pi/\lambda$ en $\hbar = h/2\pi \rightarrow$

$$E = \hbar\omega \quad \wedge \quad p = \hbar k$$

Aan elk elementair deeltje kan een veld worden gekoppeld met als eigenschappen:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \wedge \quad E = h\nu$$

Hierin heet λ de **De Broliégolflengte**.

Voor $v \ll c$ geldt:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

In de **golfmechanica** wordt aan een deeltje een abstracte (complexe) **golf functie** ofwel **toestandsfunctie** $\Psi(x, y, z, t)$ toegekend die als een waarschijnlijkheidsamplitude kan worden opgevat. De kans P om een deeltje in een volume-element $d\vec{r} = dx dy dz$ rond punt $\vec{r} = (x, y, z)$ op tijd t aan te treffen wordt nu gedefinieerd als: $P(\vec{r}, t)d\vec{r} = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$

Hieruit volgt voor de kansdichtheid $P(\vec{r}, t)$: $P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow$

Normalisatievoorwaarde:

$$\int \int \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$$

Ψ is dan **kwadraat integreerbaar**.

Superpositiebeginsel: als Ψ_1 en Ψ_2 2 verschillende toestanden van een systeem beschrijven, dan is $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ ook een beschrijving van een mogelijke toestand van het systeem.

Aan een deeltje bewegend in de richting van de pos. X -as kan een vlakke golf worden toegekend van de vorm $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = Ae^{i(px - Et)/\hbar}$. Dit deeltje heeft een exact bepaalde impuls, maar is geheel gedelocaliseerd daar $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx$ divergeert.

Om de positie van een deeltje in een bepaald gebied van de ruimte te beschrijven moet een aantal (vlakke) golven met verschillende golfgetallen gesuperponeerd worden tot een **golfpakket** (de impuls is dan niet meer exact bepaald):

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(px - Et)/\hbar} \phi(p) dp$$

Hierin is $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ een rekenfactor en $\phi(p)$ de amplitude van de vlakke golf overeenkomend met impuls p die een scherpe piek heeft rond $p = p_0$, en voor $p \neq p_0$ zeer snel nul wordt.

$$t = 0 \Rightarrow \psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \phi(p) dp$$

Stel: $\phi(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \rightarrow \psi$ en ϕ zijn elkaars Fourier getransformeerde.

De **golf**functie in de impulsruimte $\Phi(p, t)$ wordt nu gedefinieerd als:

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx$$

Hierin is $\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p, t) dp$.

Analoog geldt voor de superpositie van vlakke golven $\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar}$ in 3 dimensies:

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

$r = 0 \Rightarrow \psi(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \int \int_V e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \phi(\vec{p}) d\vec{p} \mid \phi(\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \int \int_V e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \psi(\vec{r}) d\vec{r}$

De 3-dimensionale golf

functie in de impulsruimte is nu:

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

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

Uit $\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(px-Et)/\hbar} \phi(p) dp$ volgt: $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi \wedge \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi$

Daar $E = p^2/2m$ volgt hieruit voor een vrij deeltje de

1-dimensionale Schrödingervergelijking:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Stel: $E \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \wedge p \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow$

$$\frac{1}{2m} p^2 \Psi = E \Psi$$

Analoog geldt voor $\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar}$ voor een vrij deeltje de

3-dimensionale Schrödingervergelijking:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = -i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Substitutie van E en p door hun bijbehorende operatoren geeft:

$$\frac{1}{2m} \vec{p}^2 \Psi = E \Psi$$

De **kinetische energie operator** T wordt gedefinieerd als:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

Stel: $\vec{F}(\vec{r}, t) = -\nabla V(\vec{r}, t) \rightarrow E_{tot} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \rightarrow \left[\frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi = E\Psi \rightarrow$
Schrödingervergelijking voor een deeltje dat onder een potentiaal $V(\vec{r}, t)$ beweegt:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

De **Hamiltonoperator** H wordt gedefinieerd als:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V = T + V$$

De Schrödingervergelijking is dan te schrijven als:

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

$\frac{\partial}{\partial t} \int \int \int_V P(\vec{r}, t) d\vec{r} = \int \int \int_V \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right] d\vec{r}$; substitutie van $\partial \Psi / \partial t$ en $\partial \Psi^* / \partial t$ uit de Schrödingervergelijking en zijn complex geconjugeerde geeft:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \int \int_V P d\vec{r} = \frac{i\hbar}{2m} \int \int \int_V \left[\Psi^* (\nabla^2 \Psi) - (\nabla^2 \Psi^*) \Psi \right] d\vec{r} = \frac{i\hbar}{2m} \int \int \int_V \nabla \cdot [\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi] d\vec{r}$$

De **waarschijnlijkheidsstroomdichtheid** $\vec{j}(\vec{r}, t)$ wordt gedefinieerd als:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2m} [\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi]$$

Hieruit volgt: $\frac{\partial}{\partial t} \int \int \int_V P d\vec{r} = - \int \int \int_V \nabla \cdot \vec{j} d\vec{r} = - \int \int_S \vec{j} \cdot d\vec{S}$; als V naar het oneindige gaat, dan wordt S ook oneindig en nadert Ψ naar nul \rightarrow

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \int \int_V P(\vec{r}, t) d\vec{r} = 0$$

De bijbehorende continuïteitsvergelijking is dus:

$$\frac{\partial P(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0$$

Substitutie van $\partial \Psi / \partial t$ en $\partial \Psi^* / \partial t$ uit $H\Psi = -\hbar(\partial \Psi / \partial t)$ en zijn complex geconjugeerde geeft:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \int \int_V P d\vec{r} = \frac{1}{i\hbar} \int \int \int_V [\Psi^* (H\Psi) - (H\Psi)^* \Psi] d\vec{r} = 0 \rightarrow$$

$$\int \int \int_V \Psi^* (H\Psi) d\vec{r} = \int \int \int_V (H\Psi)^* \Psi d\vec{r}$$

Operatoren die hier aan voldoen, zoals H , heten **Hermitisch**. De **verwachtingswaarde** $\langle A \rangle$ van een dynamische variabele $A(\vec{r}, \vec{p}, t)$ wordt gedefinieerd als:

$$\langle A \rangle = \int \int \int_V \Psi^*(\vec{r}, t) A(\vec{r}, -i\hbar\nabla, t) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r}$$

Hierin is $A(\vec{r}, -i\hbar\nabla, t)$ een lineaire operator die op $\Psi(\vec{r}, t)$ werkt; als $p = 0$ dan komt de werking van $A(\vec{r}, t)$ overeen met een vermenigvuldiging. Als Ψ niet genormeerd is, dan moet het rechterlid gedeeld worden door $\int \int \int_V \Psi^* \Psi d\vec{r}$. Daar $\langle a \rangle$ reëel is, moet $A(\vec{r}, -i\hbar\nabla, t)$ Hermitisch zijn en dus voldoen aan $\int \int \int_V \Psi^* A \Psi d\vec{r} = \int \int \int_V (A \Psi) \Psi^* d\vec{r}$.

Substitutie in de Schrödingervergelijking en delen door $\psi(\vec{r})f(t)$ geeft als linkerlid resp. rechterlid een vergelijking in t resp. \vec{r} , die gelijk moeten zijn aan een constante E :

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \cdot \frac{df(t)}{dt} = E \wedge \frac{1}{\psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \rightarrow f(t) = C e^{-iEt/\hbar}$$

Stel: $C = 1 \rightarrow$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

De 2-de DV is een eigenwaarde vergelijking, zijnde de **tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking**:

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Daar H hier onafhankelijk van t is, geldt tevens: $H\Psi = E\Psi$

E is de verwachtingswaarde van de totale energie in de toestand beschreven door $\Psi(\vec{r}, t)$:

$$\langle E \rangle = \int \int \int_V \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi d\vec{r} = \int \int \int_V \Psi^* H \Psi d\vec{r} = E$$

De waarden van E in $H\Psi = E\Psi$ zijn dus de energie eigenwaarden behorende bij de energie eigenfuncties $\psi(\vec{r})$ van H .

Daar $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$ onafhankelijk van t is (E is namelijk reëel), zijn de toestanden beschreven door $\psi(\vec{r}, t)$ stationaire toestanden.

Toestanden die beschreven worden door golffuncties die eindig zijn (d.w.z. nul worden in het oneindige) en tevens continu zijn en een continue afgeleide hebben, komen overeen met **gebonden toestanden** en bhoren bij discrete energietoestanden, de gebonden toestand energieën. Toestanden waarbij de golffunctie in het oneindige eindig is komen overeen met **ongebonden toestanden** die een continu energiespectrum vormen.

Stel: ψ_E en $\psi_{E'}$ zijn 2 energie eigenfuncties die behoren bij de eigenwaarde E resp. E' , met $E \neq E' \rightarrow H\psi_E = E\psi_E \wedge H\psi_{E'} = E'\psi_{E'}$

Vermenigvuldiging van de eerste vergelijking met $\psi_{E'}^*$, en de complex geconjugeerde nemend van de tweede en vermenigvuldigen met ψ_E , aftrekken en integreren geeft:

$$(E - E') \int \int \int_V \psi_{E'}^* \psi_E d\vec{r} = \int \int \int_V [\psi_{E'}^* H \psi_E - (H \psi_{E'})^* \psi_E] d\vec{r} = 0 \rightarrow \int \int \int_V \psi_{E'}^* \psi_E d\vec{r} = 0$$

Daar $\int \int \int_V \psi_E^* \psi_E d\vec{r} = 1$ zijn ψ_E en $\psi_{E'}$ dus orthonormaal:

$$\int \int \int_V \psi_{E'}^*(\vec{r}) \psi_E(\vec{r}) d\vec{r} = \delta_{EE'}$$

Als de energie eigenwaarde gedegeneerd is en dus $E = E'$, dan kan men steeds de eigenfuncties $\psi_{E_r}|r = 1, 2, \dots, \alpha$ behorende bij de gedegeneerde eigenwaarde E schrijven als een verzameling van α lineaire combinaties die wel orthonormaal zijn:

$$\int \int \int_V \psi_{E'_s}^*(\vec{r}) \psi_{E_r}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta_{EE'} \delta_{rs}$$

Per definitie vormt het energiespectrum dat uit $H\psi = E\psi$ volgt alle mogelijke energietoestanden van een systeem, d.w.z. de verzameling van energie eigenfuncties is compleet. De lgemene oplossing van $i\hbar(\partial\Psi/\partial t) = H\Psi$ is dan te schrijven als som van de energie eigenfuncties:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_E C_E(t) \psi_E(\vec{r})$$

Ψ is op te vatten als een “vector” waarvan de componenten langs de “basisvectoren” ψ_E de coëfficiënten C_E zijn. Deze laatste volgen uit:

$$\int \int \int_V \psi_{E'}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = \sum_E C_E(t) \int \int \int_V \psi_{E'}^*(\vec{r}) \psi_E(\vec{r}) d\vec{r} = \sum_E C_E(t) \delta_{EE'} = C_E(t)$$

Substitutie van Ψ in de Schrödingervergelijking met $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$ en vermenigvuldiging met $\psi_{E'}^*(\vec{r})$ en integratie geeft:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_E C_E(t) \int \int \int_V \psi_{E'}^*(\vec{r}) \psi_E(\vec{r}) d\vec{r} \right] &= \sum_E C_E(t) \int \int \int_V H \psi_E(\vec{r}) \psi_{E'}^*(\vec{r}) d\vec{r} \Leftrightarrow \\ &= \sum_E C_E(t) E \int \int \int_V \psi_{E'}^*(\vec{r}) \psi_E(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned}$$

Dit is equivalent met $i\hbar dC_E(t)/dt = EC_E(t) \rightarrow C_E(t) = Ae^{-iEt/\hbar}$

Stel: $t = t_0 \rightarrow A = C_E(t_0)e^{iEt_0/\hbar} \rightarrow C_E(t) = C_E(t_0)e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \rightarrow$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_E C_E(t_0) e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \psi_E(\vec{r})$$

Substitutie van $C_{E'}(t)$ geeft $\Psi(\vec{r}, t)$ als $\Psi(\vec{r}, t_0)$ bekend is:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_E \int \int \int_V \psi^*(\vec{r}') \Psi(\vec{r}', t_0) d\vec{r}' e^{-iE(t-t_0)/\hbar} \psi_E(\vec{r})$$

Stel: $c_E = C_E(t_0)e^{iEt_0/\hbar} \rightarrow$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_E c_E \psi_E(\vec{r}) e^{-iE(t-t_0)/\hbar}$$

Vermenigvuldiging van $\Psi(\vec{r}, t)$ met $\Psi^*(\vec{r}, t)|E = E'$ en integratie geeft:

$$\int \int \int_V \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = \sum_E \sum_{E'} c_{E'}^* c_E e^{-i(E-E')t/\hbar} \int \int \int_V \psi_{E'}^*(\vec{r}) \psi_E(\vec{r}) d\vec{r} = 1 \rightarrow$$

$$\sum_E |c_E|^2 = 1$$

Voor de verwachtingswaarde van de totale energie geldt nu:

$$\langle E \rangle = \int \int \int_V \Psi^*(\vec{r}, t) H \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = \sum_E \sum_{E'} c_{E'}^* c_E e^{-i(E-E')t/\hbar} \int \int \int_V \psi_{E'}^*(\vec{r}) H \psi_E(\vec{r}) d\vec{r} = 1 \rightarrow$$

$$\boxed{\langle E \rangle = \sum_E |c_E|^2 E}$$

De grootheid $P(E) = |c_E|^2$ is nu de kans dat een meting van de totale energie de waarde E geeft als deze niet-gedegeneerd is.

Voor een deeltje dat langs de X -as beweegt, met $V = V(x)$, geldt:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \rightarrow \Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = \psi(x) e^{-i\omega t}$$

Hierin is $\psi(x)$ een oplossing van

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x) = E\psi}$$

Stel: $V(x) = V_0 \rightarrow F(x) = -dV(x)/dx = 0$; dit komt overeen met een vrij deeltje, zodat

$$V_0 = 0 \text{ gesteld kan worden } \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E\psi$$

Stel: $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0 \rightarrow \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \rightarrow$

$$\boxed{\Psi(x, t) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}}$$

$B = 0 \Rightarrow \Psi(x, t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$; dit is een vlakke lopende golf ofwel een trilling in de richting van de pos. X -as met $P = |A|^2 \rightarrow \Delta x = \infty$

$A = 0 \Rightarrow \Psi(x, t) = Be^{-i(kx+\omega t)}$; dit is een vlakke lopende golf ofwel een trilling in de richting van de neg. X -as met $P = |B|^2 \rightarrow \Delta x = \infty$

$A = B \Rightarrow \Psi(x, t) = Ce^{-i\omega t} \cos kx$; dit is een staande golf met $P = |C|^2 \cos^2 kx$.

$x_n = \pm(\frac{1}{2}\pi + n\pi)/k | n \in \mathbb{N} \Rightarrow \cos kx = 0 \rightarrow$ deeltje kan niet in de punten x_n verblijven.

$A = -B \Rightarrow \Psi(x, t) = De^{-i\omega t} \sin kx$; dit is een staande golf met $P = |D|^2 \sin^2 kx$. $x_n = \pm n\pi/k | n \in \mathbb{N} \Rightarrow \sin kx = 0 \rightarrow$ deeltje kan niet in de punten x_n verblijven.

Voor een deeltje dat zich bevindt in een interval met grenzen $-\frac{1}{2}L$ en $\frac{1}{2}L$ en $\psi(x - \frac{1}{2}L) = \psi(x + \frac{1}{2}L)$ geldt voor k : $k = (2\pi/L)n | n \in \mathbb{Z}$

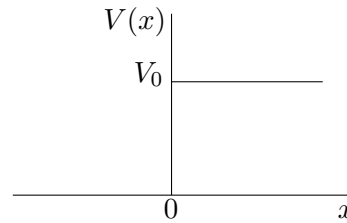
Substitutie in $k = \sqrt{(2m/\hbar^2)E}$ geeft:

$$\boxed{E = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} n^2 \quad | \quad n \in \mathbb{Z}}$$

De normalisatievoorwaarde divergeert nu niet: $\int_{-\frac{1}{2}L}^{\frac{1}{2}L} |Ce^{ikx}|^2 dx = 1 \rightarrow C = L^{-\frac{1}{2}} \rightarrow$

$$\psi(x) = L^{-\frac{1}{2}} e^{ikx}$$

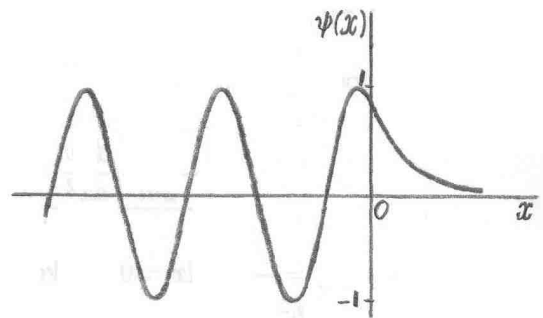
stappotentiaal: $V(x) = \begin{cases} 0 & |x < 0 \\ V_0 & |x > 0 \end{cases}$



$$0 < E < V_0 \Rightarrow \begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 & k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} & \text{met } x < 0 \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi = 0 & \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} & \text{met } x > 0 \end{cases} \rightarrow$$

$$\begin{aligned} x < 0 &\Rightarrow \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ x > 0 &\Rightarrow \psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \rightarrow \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = \infty &\rightarrow C = 0 \rightarrow \psi(x) = De^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Een deeltje dat klassiek gezien niet in het gebied voor $x > 0$ kan komen, kan dit quantum mechanisch wel; dit heet het **tunneleffect**.

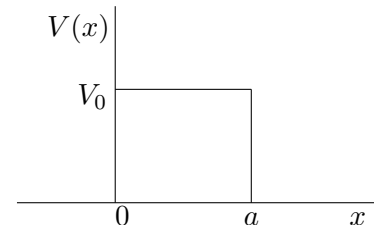


$$\begin{aligned} E > V_0 &\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \left| k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \text{ met } x < 0 \wedge k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \text{ met } x > 0 \rightarrow \right. \\ \psi(x) &= \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & |x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & |x > 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Voor een deeltje dat van links komt is $De^{-ikx} = 0$, daar dit een gereflecteerde golf in de neg. X-richting is, terwijl er voor $x \gg 0$ niets is dat een golf kan reflecteren $\rightarrow \psi(x) = Ce^{ikx}$ voor $x > 0$.

Voor $x < 0$ bestaat $\psi(x)$ dus uit een inkomende - en een gereflecteerde golf, en voor $x > 0$ uit een doorgaande golf. Een deeltje dat klassiek gezien altijd de potentiaalstap passeert, kan quantum mechanisch - ondanks dat $E > V_0$ - dus toch gereflecteerd worden.

Potentiaalbarrière: $V(x) = \begin{cases} 0 & |x < 0 \\ V_0 & |0 < x < a \\ 0 & |x > a \end{cases}$



Voor $x < 0$ en $x > a$ geldt analoog aan de stappotentiaal:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & |x < 0 \\ Ce^{ikx} & |x > a \end{cases}$$

$$E < V_0 \rightarrow \psi(x) = Fe^{kx} + Ge^{-kx} | 0 < x < a \wedge k = \sqrt{(2m/\hbar^2)(V_0 - E)}$$

Een deeltje kan dus quantum mechanisch door de potentiaalbarrière heen tunnelen.

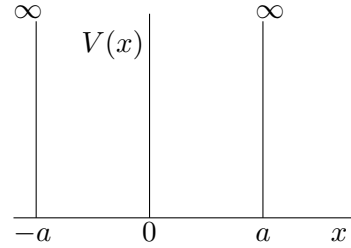
$$E > V_0 \rightarrow \psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} | 0 < x < a \wedge k = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E - V_0)}$$

Een deeltje kan dus quantum mechanisch gereflecteerd worden.

Oneindige potentiaalkuil: $V(x) = \begin{cases} 0 & | -a < x < a \\ \infty & |x| > a \end{cases}$

$V(x)_{x=\pm a} = \infty \rightarrow$ randvoorwaarde: $\psi(x)_{|x|\geq a} = 0 \rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \rightarrow \psi(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad |k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$



Uit de randvoorwaarde volgt: $\begin{cases} A \cos ka = 0 \\ B \sin ka = 0 \end{cases} \rightarrow$ 2 klassen oplossingen:

I. $B = 0 \wedge \cos ka = 0 \rightarrow k_n = (n\pi)/(2a) \quad |n = 1, 3, 5, \dots \rightarrow \psi(x) = A_n \cos k_n x \rightarrow$

$$\int_{-a}^a A_n^2 \cos^2 k_n x dx = \int_{-a}^a A_n^2 \cos^2(n\pi x/2a) dx = 1 \rightarrow A_n = a^{-1/2} \rightarrow$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{n\pi}{2a} x \quad |n = 1, 3, 5, \dots$$

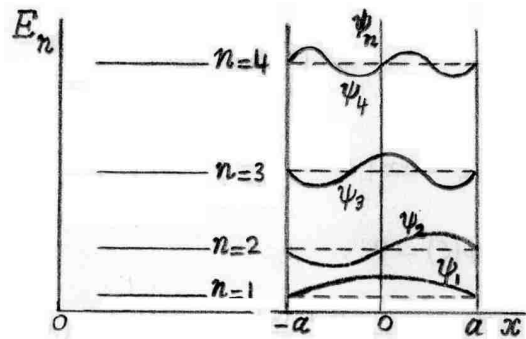
II. $A = 0 \wedge \sin ka = 0 \rightarrow k_n = (n\pi)/(2a) \quad |n = 2, 4, 6, \dots \rightarrow$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi}{2a} x \quad |n = 2, 4, 6, \dots$$

Substitutie van k_n in $E_n = (\hbar^2 k_n^2)/(2m)$ geeft:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2 \quad |n \in \mathbb{N}$$

De energie is dus gequantiseerd en bestaat uit oneindig veel discrete (niet-gedegeneerde) energieniveaus corresponderend met gebonden toestanden, waarbij de grondtoestand $E_1 > 0$.



De golf functies van I. hebben een **even pariteit** daar $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$, die van II. een **oneven pariteit**, daar dan $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$.

Vierkante potentiaalkuil: $V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$

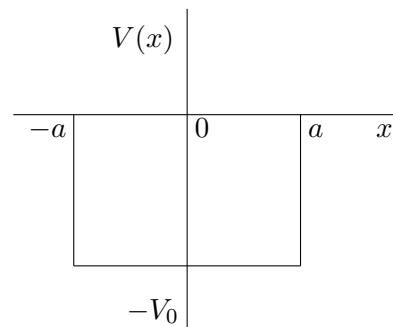
$-V_0 \leq E < 0$ komt overeen met gebonden toestanden \rightarrow

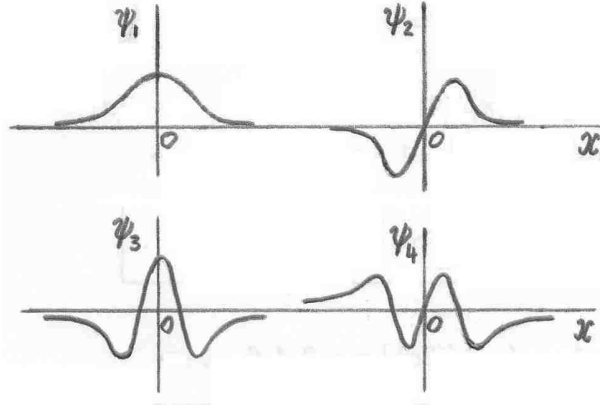
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0 \quad \left| \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)} \wedge |x| < a \text{ en}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \beta^2\psi = 0 \quad \left| \beta = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} E} \wedge |x| > a \rightarrow$$

Even oplossingen: $\psi(x) = A \cos \alpha x$ resp. $\psi(x) = C e^{-\beta x}$

Oneven oplossingen: $\psi(x) = B \sin \alpha x$ resp. $\psi(x) = C e^{-\beta x}$





$E > 0$ komt overeen met ongebonden toestanden \rightarrow

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & |x| < a \\ Ce^{i\alpha x} & |x| > a \end{cases} \quad \wedge \quad \psi(x) = Fe^{i\alpha x} + Ge^{-i\alpha x} \quad |x| < a$$

Voor een deeltje met massa m waarop een kracht $F = -kx$ werkt en dus beweegt onder invloed van een potential $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ geldt: $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \rightarrow$

Schrödingervergelijking voor een **lineaire harmonische oscillator**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi$$

Stel: $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad \wedge \quad \xi = \alpha x \quad | \quad \alpha = \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \quad \wedge \quad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} \rightarrow$

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi(\xi) = 0$$

Stel: $\psi(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H(\xi) \rightarrow \frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + (\lambda - 1)H(\xi) = 0$

Voor even toestanden geldt: $\psi(-\xi) = \psi(\xi) \rightarrow H(-\xi) = H(\xi)$

Substitutie van $H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^{2k} \quad | \quad c_0 \neq 0$ geeft: $c_{k+1} = \frac{4k+1-\lambda}{2(k+1)(2k+1)} c_k$

Om te voorkomen dat $\psi(\xi)$ divergeert als $\xi \rightarrow \infty$ gaat, moet $H(\xi)$ eindig zijn, d.w.z. $c_{N+1} = 0 \quad | \quad N \in \mathbb{N} \rightarrow \lambda = 4N + 1 \quad | \quad N \in \mathbb{N}$

Voor oneven toestanden geldt: $\psi(-\xi) = -\psi(\xi) \rightarrow H(-\xi) = -H(\xi)$

Substitutie van $H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} d_k \xi^{2k+1} \quad | \quad d_0 \neq 0$ geeft: $d_{k+1} = \frac{4k+3-\lambda}{2(k+1)(2k+3)} d_k$

Analoog aan de even toestanden moet $H(\xi)$ eindig zijn $\rightarrow d_{N+1} = 0 \quad | \quad N \in \mathbb{N} \rightarrow \lambda = 4N + 3 \quad | \quad N \in \mathbb{N}$; voor de eigenwaarden λ geldt dus: $\lambda = 2n + 1 \quad | \quad n \in \mathbb{N}$

Substitutie in $\lambda = 2E/\hbar\omega$ geeft het energiespectrum van de lineaire harmonische oscillator:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad | \quad n \in \mathbb{N}$$

$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ is de **nulpuntsenergie**. De energieniveaus komen overeen met die van het elektromagnetische veld, daar dit laatste te ontbinden is in de normale modussen die zich gedragen als ongekoppelde harmonische oscillatoren.

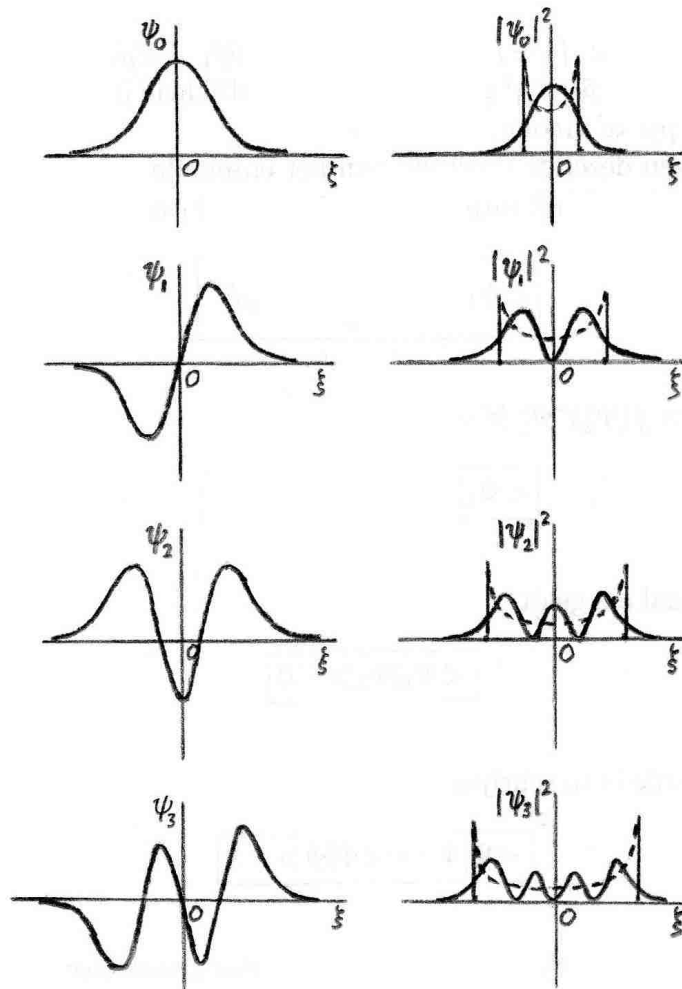
Bij elke E_n hoort een $\psi_n(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \rightarrow \psi_n(x) = N e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x)$

Voor de normalisatieconstante geldt: $N = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} \rightarrow$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x)$$

Daar $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n^2(x)|^2 dx = 1$ en $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = 0 \mid n \neq m$, geldt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \delta_{mn}$$



Daar $|\psi_n(x)|^2$ een even functie van x is, is $x|\psi_n(x)|^2$ een oneven functie van x , zodat de verwachtingswaarden van x steeds nul is: $\langle x \rangle = x_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)x\psi_n(x)dx = 0$

Een (**statistisch**) **ensemble** bestaat uit een groot aantal N identieke, onafhankelijke systemen. Een quantum mechanische meting geeft dan de waarschijnlijkheid dat een bepaalde uitkomst n keer voorkomt.

De formele formulering van de quantum mechanica is gebaseerd op de volgende postulaten:
 I. Aan een ensemble kan een complexe golffunctie of toestandsfunctie $\Psi(\vec{r}, t)$ worden toegekend; deze kan met een willekeurig complex getal worden vermenigvuldigd zonder de fysische betekenis te veranderen. De functies Ψ en $e^{i\alpha}\Psi$ | $\alpha \in \mathbb{R}$ beschrijven dus dezelfde toestand en hebben dezelfde normalisatie.

Voor N deeltjes met positievectoren $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ op tijd t is de golffunctie $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \rightarrow P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = |\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)|^2$

II. Als Ψ_1 een mogelijke toestand van een ensemble beschrijft en Ψ_2 een andere mogelijke toestand, dan beschrijft $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ eveneens een mogelijke toestand van het ensemble. Als $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ de toestandsgolffunctie van een N -deeltjes ensemble is, dan is $\Phi(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)$ de impulsgolffunctie van het ensemble en gelijk aan de Fouriergetransformeerde van Ψ :

$$\Phi(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}N} \int \dots \int e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 \cdot \vec{r}_1 + \dots + \vec{p}_N \cdot \vec{r}_N)} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N$$

In de impulsruimte geldt dan: $\int \dots \int |\Phi(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)|^2 d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N = 1 \rightarrow$

$\prod(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t) = |\Phi(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)|^2$ geeft de waarschijnlijkheid in de impulsruimte om deeltje N in volume $d\vec{p}_N$ rond \vec{p}_N te vinden.

Zowel Ψ als Φ beschrijven dezelfde toestand van het ensemble.

Het scalarproduct van 2 kwadraat integreerbare functies Ψ_1 en Ψ_2 wordt gedefinieerd als:

$$\langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = \int \Psi_1^* \Psi_2 d\vec{r}$$

$$\langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle^* = \langle \Psi_2^* | \Psi_1^* \rangle = \int (\Psi_2^*)^* \Psi_1^* d\vec{r} = \int \Psi_1^* \Psi_2 d\vec{r} \rightarrow$$

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle^*$$

Ψ_1 en Ψ_2 zijn orthogonaal als geldt:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$$

De normalisatievoorwaarde is te schrijven als:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \Phi \rangle = 1$$

III. Met elke dynamische variabele is een lineaire operator geassocieerd.

Als Ψ de toestand van een systeem beschrijft, dan geldt voor de lineaire operator die met de dynamische variabele $\mathcal{A} = \mathcal{A}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)$ geassocieerd worden:

$$\mathcal{A}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, -i\hbar\nabla_1, \dots, -i\hbar\nabla_N, t)$$

De impuls wordt dus vervangen door

$$\vec{p}_i \rightarrow -i\hbar\nabla_i \quad | \quad i = 1, 2, \dots, N$$

Analoog als Φ de toestand beschrijft:

$$A(-i\hbar\nabla_{\vec{p}_1}, \dots, -i\hbar\nabla_{\vec{p}_N}, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)$$

De positievector wordt dus vervangen door:

$$\vec{r}_i \rightarrow -i\hbar\nabla_{\vec{p}_i} \quad | \quad i = 1, 2, \dots, N$$

IV. Een meting van een dynamische variabele \mathcal{A} geeft slechts één van de eigenwaarden a_n van de lineaire operator A geassocieerd met \mathcal{A} :

$$A\psi_n = a_n\psi_n$$

Alle eigenwaarden samen van een operator vormen het spectrum van A . Daar de eigenwaarden reëel moeten zijn, zijn de operatoren **Hermitisch**:

$$\langle X|A\Psi \rangle \equiv \langle X|A|\Psi \rangle = \langle AX|\Psi \rangle$$

V. Als een reeks metingen van de dynamische variabele \mathcal{A} wordt gedaan van een ensemble beschreven door Ψ , dan geldt voor de verwachtingswaarde $\langle A \rangle$ van \mathcal{A} :

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi|A|\Psi \rangle}{\langle \Psi|\Psi \rangle}$$

Als Ψ genormaliseerd is, dan geldt:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi|A|\Psi \rangle$$

De **Hermitisch geconjugeerde** - ofwel **toegevoegde operator** A^\dagger van A wordt gedefinieerd als:

$$\langle X|A^\dagger|\Psi \rangle = \langle AX|\Psi \rangle = \langle \Psi|A|X \rangle^*$$

A is **zelftoegevoegd** (en dus Hermitisch) als geldt:

$$A = A^\dagger$$

Voor A^\dagger geldt:

$$\begin{aligned} (cA)^\dagger &= c^*a^\dagger \\ (AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger \end{aligned}$$

De **eenheidsoperator** I is de de operator waarvoor geldt:

$$I\Psi = \Psi$$

Een operator heet **unitair** als geldt:

$$U^{-1} = U^\dagger$$

Dit is equivalent met:

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I$$

Een unitaire operator kan geschreven worden als:

$$U = e^{iA}$$

Hierin is A een Hermitische operator.

Een operator Λ heet **idempotent** als geldt:

$$\Lambda^2 = \Lambda$$

Als Λ Hermitisch is, dan is Λ een zgn. **projectie-operator**.

Stel: $\Psi = \Phi + X \mid \Phi = \Lambda\Phi \wedge X = (I - \Lambda)\Psi$, met Φ en X orthogonale functies \rightarrow
 $\langle \Phi | X \rangle = \langle \Lambda\Psi | (I - \Lambda)\Psi \rangle = \langle \Psi | \Lambda - \Lambda^2 | \Psi \rangle = 0$

Elke Ψ kan dus m.b.v. Λ geschreven worden als de som van 2 orthogonale functies.

$(I - \Lambda)^2 = I^2 - 2\Lambda + \Lambda^2 = I - \Lambda \rightarrow I - \Lambda$ is ook een projectie-operator.

Stel: ψ_n zijn de genormaliseerde eigenfuncties van A en ψ_i en ψ_j zijn 2 eigenfuncties corresponderend met verschillende eigenwaarden a_i resp. $a_j \rightarrow A\psi_i = a_i\psi_i \wedge A\psi_j = a_j\psi_j \rightarrow$
 $(a_i - a_j) \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \langle a_i\psi_i | \psi_j \rangle - \langle \psi_i | a_j\psi_j \rangle = \langle A\psi_i | \psi_j \rangle - \langle \psi_i | A\psi_j \rangle = 0 \rightarrow$

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 0 \mid i \neq j$$

Eigenfuncties behorende tot verschillende eigenwaarden zijn dus orthogonaal.

Daar ψ_n genormeerd zijn, geldt: $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \rightarrow$

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$$

VI. Een golfvunctiedie een dynamische toestand beschrijft kan als een lineaire combinatie van de eigenfuncties van A uitgedrukt worden, waar A de operator is van een dynamische variabele \mathcal{A} :

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n$$

De coëfficiënten volgen uit: $\langle \psi_m | \Psi \rangle = \sum_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n c_n \delta_{mn} = c_m$

$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n a_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n$

Als Ψ genormeerd is, dan geldt: $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \rightarrow \sum_n |c_n|^2 = 1$

De waarschijnlijkheid P om bij een meting een eigenwaarde a_n van A te krijgen is dan:

$$P = |c_n|^2 = |\langle \psi_n | \Psi \rangle|^2$$

De coëfficiënten $c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle$ heten **waarschijnlijkheidsamplituden**.

De **commutator** $[A, B]$ van 2 operatoren A en B wordt gedefinieerd als:

$$[A, B] = AB - BA$$

Als A en B **commuteren** geldt: $AB = BA$

Uit de definitie van de commutator volgen de relaties:

$$\begin{aligned} [A, B] &= -[B, A] \\ [A, B + C] &= [A, B] + [A, C] \\ [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C] \end{aligned}$$

$$[x, p_x]\Psi = (xp_x - p_x x)\Psi = x \cdot -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = i\hbar\Psi; \text{ analoog voor } [y, p_y] \text{ en } [z, p_z] \rightarrow$$

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar$$

Als A en B 2 observabelen zijn met $\langle A \rangle \equiv \langle \Psi|A|\Psi \rangle$ en $\langle B \rangle \equiv \langle \Psi|B|\Psi \rangle$, dan wordt de onzekerheid ΔA resp. ΔB gedefinieerd als:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} \text{ en } \Delta B = \sqrt{\langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle}$$

Er geldt dan: $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$

$$[A, B] = i\hbar \Rightarrow \langle [A, B] \rangle = i\hbar \rightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |i\hbar| = \frac{1}{2} \hbar \rightarrow -i\hbar = \frac{1}{2} \hbar \rightarrow$$

Onbepaaldheidsrelaties van Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p_x = \Delta y \Delta p_y = \Delta z \Delta p_z \geq \frac{1}{2} \hbar$$

Stel: A is een lineaire Hermitische operator zo, dat $A\Psi = X$ en $A'\Psi' = X'$

Voor een unitaire transformatie geldt: $\Psi' = U\Psi$ en $X' = UX \rightarrow$

$$A'U\Psi = A'\Psi' = X' = UX = UA\Psi \rightarrow$$

$$A'U = UA$$

$$A'UU^\dagger = UAU^\dagger \rightarrow$$

$$A' = UAU^\dagger$$

$$U^\dagger A' = U^\dagger UAU^\dagger = AU^\dagger \rightarrow U^\dagger A'U = AU^\dagger U \rightarrow$$

$$A = U^\dagger A'U$$

$$\langle X|A|\Psi \rangle = \langle X|U^\dagger UAU^\dagger U|\Psi \rangle = \langle X|U^\dagger(UAU^\dagger)|(U\Psi) \rangle = \langle UX|UAU^\dagger|(U\Psi) \rangle \Rightarrow$$

$$\langle X|A|\Psi \rangle = \langle X'|A'|\Psi' \rangle \rightarrow \langle \Psi|A|\Psi \rangle = \langle \Psi'|A'|\Psi' \rangle$$

Stel: $A = I \rightarrow \langle X|\Psi \rangle = \langle X'|\Psi' \rangle$ en $\langle \Psi|\Psi \rangle = \langle \Psi'|\Psi' \rangle$

Fysische grootheden blijven dus behouden onder een unitaire transformatie.

Een infinitesimale unitaire transformatie U wordt gedefinieerd als:

$$U = I + i\varepsilon F \mid \varepsilon \in \mathbb{R}, F = F^\dagger$$

F heet de **voortbrenger** van U .

$$A' = A + \delta A = UAU^\dagger = (I + i\varepsilon F)A(I - i\varepsilon F) \approx A + i\varepsilon FA - i\varepsilon AF = A + i\varepsilon [F, A] \rightarrow$$

$$\delta A = i\varepsilon [F, A]$$

Elke Ψ kan geschreven worden als som van een verz. orthonormale functies $\{\psi_n\}$, waarbij de coëfficiënten c_n Ψ representeren in de basis $\{\psi_n\}$ en volgen uit $c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle$.

Stel: $X = A\Psi$ en $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$; uit $X = \sum_m d_m \psi_m$ volgt dan:

$$d_m = \langle \psi_m | X \rangle = \langle \psi_m | A | \Psi \rangle = \sum_n \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle c_n$$

De grootheden $A_{mn} = \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle$ zijn de **matrizelementen** van operator A in de basis $\{\psi_n\} \rightarrow$

$$d_m = \sum_n A_{mn} c_n \Leftrightarrow \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}; \left. \begin{matrix} c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle \\ d_n^* = \langle X | \psi_n \rangle \end{matrix} \right\} \rightarrow$$

$$\langle X | \Psi \rangle = \sum_n d_n^* c_n = \vec{d}^\dagger \vec{c} = (d_1^* \cdots d_n^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

$$A_{mn} = \langle \psi_m | A | \psi_n \rangle = a_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = a_n \delta_{mn} \rightarrow$$

(A) is diagonaal met als diagonaalelementen de eigenwaarden a_n van de operator A .

De eigenwaardevergelijking $A\psi_n = a_n \psi_n$ is equivalent met de matrix eigenwaarde vergelijking:

$$(A)\vec{u}_n = a_n \vec{u}_n$$

Hierin is \vec{u}_n een eigenvector van (A) behorende bij a_n .

De eigenwaarden a_n zijn reëel en vormen de oplossingen van de seculiere vergelijking:

$$\det |(A) - a_n I| = 0$$

De toestand van een systeem kan beschreven worden door een **toestandsvector** ofwel **ketvector** $|\Psi\rangle$, waarmee een geconjugeerde **bravector** $\langle\Psi|$ is geassocieerd zo, dat $\langle\Psi|\Psi\rangle$ een reëel getal is, zijnde het kwadraat van de "lengte" van $|\Psi\rangle$. De verschillende representaties corresponderen met de "componenten" van $|\Psi\rangle$ langs verschillende richtingen in een abstracte ruimte. In de Dirac-formulering vormen de commutatierregels voor x, y, z en p_x, p_y, p_z het uitgangspunt zonder een basis te hoeven introduceren.

VII. De tijdontwikkeling van de golffunctie van een systeem wordt bepaald door de tijdfhankelijke Schrödingervergelijking:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H\Psi(t)$$

Als $\Psi(t_0)$ bekend is, dan is $\Psi(t)$ voor alle t bepaald.

De unitaire **evolutie-operator** $U(t, t_0)$ wordt zo gedefinieerd dat geldt:

$$\Psi(t) = U(t, t_0)\Psi(t_0) \mid U(t_0, t_0) = I$$

Substitutie in de Schrödingervergelijking geeft: $i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU$

Als H niet expliciet van de tijd afhangt, dan is een oplossing: $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \rightarrow$

$$\boxed{\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\Psi(t_0)}$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | A | \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \frac{\partial A}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | A \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle$$

Substitutie van de Schrödingervergelijking en zijn complex geconjugeerde, met

$$\left\langle \Psi | A \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle^* = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi^* | A | H \Psi^* \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle H \Psi | A | \Psi \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | H A | \Psi \rangle, \text{ geeft:}$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | H A | \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \Psi \left| \frac{\partial A}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | A H | \Psi \rangle$$

Stel: $\langle [A, H] \rangle = \langle \Psi | A H - H A | \Psi \rangle \wedge \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial A}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle \rightarrow$

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

Als A niet expliciet van t afhangt, dan is $\partial A / \partial t$ nul \rightarrow

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle}$$

Als A en H commuteren, dan is $d/dt \langle A \rangle$ dus nul en is de variabele \mathcal{A} een bewegingsconstante.

Als H niet expliciet van t afhangt, dan is $d/dt \langle H \rangle$ nul; de totale energie is dus een bewegingsconstante.

Als ψ_E een eigenfunctie is van de tijdonafhankelijke Hamiltoniaan, dan geldt voor een stationaire toestand met energie E : $\Psi_E = \psi_E e^{-iEt/\hbar}$; als A tijdonafhankelijk is, dan is $\langle \Psi_E | A | \Psi_E \rangle = \langle \psi_E | A | \psi_E \rangle$ ook tijdonafhankelijk \rightarrow

$$\boxed{\langle \psi_E | [A, H] | \psi_E \rangle = 0}$$

Voor een deeltje met massa M dat in een potentiaal $V(\vec{r})$ beweegt, geldt: $H = (\vec{p}^2/2m) + V(\vec{r})$

Stel: $A = \vec{r} \cdot \vec{p} \rightarrow \langle \psi_E | [\vec{r} \cdot \vec{p}, (\vec{p}^2/2m) + V(\vec{r})] | \psi_E \rangle = 0$

Substitutie van $\vec{p} = -i\hbar \nabla$ geeft: $\langle \vec{r} \cdot \vec{p}, H \rangle = \langle 2i\hbar T - i\hbar \vec{r} \cdot \nabla V \rangle = 0 \rightarrow$

Viriaaltheorema voor een stationaire toestand:

$$\boxed{2 \langle T \rangle = \langle \vec{r} \cdot \nabla V \rangle}$$

In de **Schrödinger representatie** zijn de operatoren (in differentiaal- of matrixvorm) \vec{r}_i en \vec{p}_i tijdonafhankelijk. De ontwikkeling van een systeem in de tijd wordt bepaald door een tijdafhankelijke golf functie $\Psi(t)$ die volgt uit $i\hbar \partial \Psi / \partial t = H \Psi$.

De **Heisenberg representatie** volgt uit de Schrödinger golf functie door deze te vermenigvuldigen met $U^\dagger(t, t_0) = U(t_0, t)$:

$$\boxed{\Psi_H = U^\dagger(t, t_0) \Psi(t) = U(t_0, t) \Psi(t) = \Psi(t_0)}$$

Ψ_H is dus tijdonafhankelijk en komt op $t = t_0$ overeen met $\Psi(t_0)$.

Als A een operator in de Schrödinger representatie is en A_H de corresponderende operator in de Heisenberg representatie, dan geldt:

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0)AU(t, t_0) = U(t_0, t)AU^\dagger(t_0, t) = UAU^\dagger \rightarrow$$

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{\partial U}{\partial t}AU^\dagger + U\frac{\partial A}{\partial t}U^\dagger + UA\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}HUAU^\dagger + U\frac{\partial A}{\partial t}U^\dagger + \frac{1}{i\hbar}UAHU^\dagger \Leftrightarrow$$

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{1}{i\hbar}(-UHU^\daggerUAU^\dagger + UAU^\daggerUHU^\dagger) + U\frac{\partial A}{\partial t}U^\dagger$$

$$\text{Stel: } H_H = UHU^\dagger \wedge A_H = UAU^\dagger \wedge \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_H = U\frac{\partial A}{\partial t}U^\dagger \rightarrow$$

Bewegingsvergelijking voor A_H :

$$\boxed{\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H_H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_H}$$

Een translatie $T(\vec{a})$ over een afstand \vec{a} laat een geïsoleerd systeem onveranderd. Als \vec{r}' de nieuwe positievector is, dan geldt: $\vec{r}' = T(\vec{a})\vec{r} = \vec{r} + \vec{a} \rightarrow \vec{r} = T^{-1}(\vec{a})\vec{r}' = \vec{r}' - \vec{a}$

Voor een deeltje dat op tijd t_0 beschreven wordt door $\psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}, t_0)$ en vervolgens een translatie ondergaat over een afstand \vec{a} en dan beschreven wordt door $\psi'(\vec{r})$ geldt:

$$\psi'(\vec{r}) = U_T(\vec{a})\psi(\vec{r}); \text{ hierin is } U_T(\vec{a}) \text{ een unitaire operator.}$$

Daar $T(\vec{a})$ overeenkomt met een translatie van $O(0, 0)$ over een afstand $-\vec{a}$, geldt:

$$\psi'(\vec{r} + \vec{a}) = \psi'(T(\vec{a})\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \rightarrow \psi'(\vec{r}) = \psi(T^{-1}(\vec{a})\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a})$$

Voor een infinitesimale translatie $\delta\vec{a}$ geldt:

$$\psi'(\vec{r} + \vec{a}) = \psi(\vec{r} - \delta\vec{a}) \approx \psi(\vec{r}) - \delta a_x \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} - \delta a_y \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial y} - \delta a_z \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial z} = (I - \delta\vec{a} \cdot \nabla)\psi(\vec{r}) \rightarrow$$

$U_T(\delta\vec{a}) = I - \delta\vec{a} \cdot \nabla = I - i\hbar^{-1}\delta\vec{a} \cdot \vec{p}_{op}$; \vec{p}_{op} is dus de voortbrenger van de infinitesimale translatie.

$$\text{Stel: } \delta\vec{a} = \frac{\vec{a}}{n} \Big| n \in \mathbb{Z} \rightarrow U_T(\vec{a}) = \lim_{n \rightarrow \infty} U_T(\delta\vec{a}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\vec{a} \cdot \vec{p}_{op}}{n} \right) \rightarrow$$

$$\boxed{U_T(\vec{a}) = e^{-(i/\hbar)\vec{a} \cdot \vec{p}_{op}}}$$

Als $\psi(\vec{r})$ een eigentoestand van \vec{p}_{op} is corresponderend met een eigenwaarde \vec{p} ($\vec{p}_{op}\psi = \vec{p}\psi$), dan geldt:

$$\boxed{U_T(\vec{a})\psi = e^{-(i/\hbar)\vec{a} \cdot \vec{p}}\psi}$$

$U_T(\vec{a})$ verandert ψ dus met een fasefactor die de toestand van het systeem niet verandert.

Daar H invariant is onder een translatie, geldt: $H' = U_T(\vec{a})HU_T^\dagger(\vec{a}) = H$

$$U_T(\delta\vec{a})HU_T^\dagger(\delta\vec{a}) = (I - i\hbar^{-1}\delta\vec{a} \cdot \vec{p}_{op})H(I + i\hbar^{-1}\delta\vec{a} \cdot \vec{p}_{op}) \approx H - i\hbar^{-1}\delta\vec{a} \cdot \vec{p}_{op}H + i\hbar^{-1}\delta\vec{a} \cdot H\vec{p}_{op} \Leftrightarrow$$

$$U_T(\delta\vec{a})HU_T^\dagger(\delta\vec{a}) = H - i\hbar^{-1}\delta\vec{a} \cdot [\vec{p}_{op}, H] \rightarrow$$

$$\boxed{[\vec{p}_{op}, H] = 0}$$

Het impulsbehoud van een geïsoleerd systeem is dus een gevolg van de invariantie van H onder een translatie.

Elke continue symmetrietransformatie U_S kan geschreven worden als het produkt van operatoren $U_{\delta S} = I + i\varepsilon F_S \mid \varepsilon \in \mathbb{R}$ en F_S de Hermitische voortbrenger van de infinitesimale transformatie δS . Algemeen geldt dan:

$$\boxed{[F_S, H] = 0}$$

$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$; de voortbrenger van de corresponderende infinitesimale transformatie is H , en daar $[H, H] = 0$, is de energie dus behouden als H tijdonafhankelijk is \rightarrow Het energiebehoud van een geïsoleerd systeem is dus een gevolg van de invariantie van H onder een tijdtranslatie.

Spiegeling ofwel **inversie** door $O(0, 0)$ wordt beschreven door de unitaire Hermitische **pariteitsoperator** \mathcal{P} :

$$\boxed{\mathcal{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})}$$

Uit $\mathcal{P}(-\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ volgt:

$$\boxed{\mathcal{P}^2 = I}$$

De eigenwaarden van \mathcal{P} zijn dus $+1$ (even eigentoestand $\psi_+(\vec{r})$) en -1 (oneven eigentoestand $\psi_-(\vec{r})$): $\mathcal{P}\psi_+(\vec{r}) = \psi_+(-\vec{r}) = \psi_+(\vec{r})$ en $\mathcal{P}\psi_-(\vec{r}) = \psi_-(-\vec{r}) = -\psi_-(\vec{r})$

Elke functie kan geschreven worden als de som van ψ_+ en ψ_- : $\psi(\vec{r}) = \psi_+(\vec{r}) + \psi_-(\vec{r})$

Hierin is $\psi_+(\vec{r}) = \frac{1}{2}\{\psi(\vec{r}) + \psi(-\vec{r})\}$ en $\psi_-(\vec{r}) = \frac{1}{2}\{\psi(\vec{r}) - \psi(-\vec{r})\}$

Met uitzondering van de zwakke wisselwerking geldt:

$$\boxed{[\mathcal{P}, H] = 0}$$

In de klassieke mechanica geldt voor het baanimpulsmoment \vec{L} van een deeltje met massa m , impuls \vec{p} en positievector \vec{r} t.o.v. $O(0, 0)$: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Leftrightarrow$

$$L_x = yp_z - zp_y \quad \wedge \quad L_y = zp_x - xp_z \quad \wedge \quad L_z = xp_y - yp_x$$

De corresponderende quantummechanische impulsmomentoperatoren volgen uit de substitutie $\vec{p}_\alpha \rightarrow -i\hbar\partial/\partial\alpha \mid \alpha = x, y, z$:

$$\boxed{\begin{aligned} L_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned}}$$

In vectorvorm is dit te schrijven als:

$$\boxed{\vec{L} = -i\hbar(\vec{r} \times \nabla)}$$

\vec{L} is nu dus een (Hermitische) vectoroperator.

$$\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= [(yp_x - zp_y), (zp_x - xp_z)] = [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] \Leftrightarrow \\
[L_x, L_y] &= yp_z zp_x - zp_x yp_z + zp_y xp_z - xp_z zp_y = yp_x [p_z, z] + xp_y [z, p_z] = -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y \Leftrightarrow \\
[L_x, L_y] &= i\hbar(xp_y - yp_z) = i\hbar L_z; \text{ analoog voor } [L_y, L_z] \text{ en } [L_z, L_x] \rightarrow
\end{aligned}$$

$$\boxed{
\begin{aligned}
[L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\
[L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\
[L_z, L_x] &= i\hbar L_y
\end{aligned}
}$$

Het is dus i.h.a. onmogelijk om alle 3 componenten van \vec{L} tegelijkertijd exact te bepalen. Optelling en uitschrijven in componenten van het linkerlid geeft:

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

$$\begin{aligned}
[\vec{L}^2, L_x] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] = [L_y^2 + L_z^2, L_x] = [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \Leftrightarrow \\
[\vec{L}^2, L_x] &= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z \Leftrightarrow \\
[\vec{L}^2, L_x] &= -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z = 0 \\
\text{Analoog voor } [\vec{L}^2, L_y] &\text{ en } [\vec{L}^2, L_z] \rightarrow
\end{aligned}$$

$$\boxed{[\vec{L}^2, L_x] = [\vec{L}^2, L_y] = [\vec{L}^2, L_z] = 0} \Leftrightarrow \boxed{[\vec{L}^2, \vec{L}] = 0}$$

Overgang op bolcoördinaten geeft, met $\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial z}$ en analoge uitdrukkingen voor $\frac{\partial}{\partial \theta}$ en $\frac{\partial}{\partial r}$:

$$\boxed{
\begin{aligned}
L_x &= -i\hbar \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cotan \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
L_y &= -i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cotan \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned}
}$$

Kwadrateren en optellen geeft:

$$\boxed{\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}}$$

Als een geïsoleerd systeem in de (isotrope) ruimte geroteerd wordt, dan blijft het systeem onveranderd: $\Psi' = U_R \Psi$; hierin is U_R een unitaire operator.

Voor een operator A en zijn gerooteerde A' geldt dan:

$$\langle \Psi' | A' | \Psi' \rangle = \langle U_R \Psi | A' | U_R \Psi \rangle = \langle \Psi | U_R^\dagger A' U_R | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle, \text{ daer } \langle A \rangle = \langle A' \rangle \rightarrow$$

$$A = U_R^\dagger A' U_R \rightarrow A' = U_R A U_R^\dagger$$

Daar H invariant moet zijn, geldt: $H' = U_R H U_R^\dagger = H \rightarrow U_R H = H U_R \rightarrow$

$$\boxed{[U_R, H] = 0}$$

Stel: $\vec{r}' = R\vec{r} \rightarrow \psi'(\vec{r}') = \psi(\vec{r}) = U_R\psi(\vec{r})$

Daar $\psi'(\vec{r}') = \psi(R^{-1}\vec{r}')$ voor alle \vec{r}' , geldt dus ook: $\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}) \rightarrow$

$$\psi'(\vec{r}') = U_R\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}')$$

Voor de coördinaten (x', y', z') van \vec{r}' resp. $R^{-1}\vec{r}'$ onder een infinitesimale rotatie $\delta\alpha$ om de Z-as geldt:

$$\begin{cases} x' = x \cos \varphi - y \sin \varphi \approx x - y\varphi = x - y\delta\alpha \\ y' = x \sin \varphi + y \cos \varphi \approx x\varphi + y = x\delta\alpha + y \\ z' = z \end{cases} \quad \text{resp.} \quad \begin{cases} x' = x + y\delta\alpha \\ y' = y - x\delta\alpha \\ z' = z \end{cases}$$

$$\psi'(\vec{r}') = U_z(\delta\alpha)\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}') = \psi(x + y\delta\alpha, y - x\delta\alpha, z) \approx \psi(x, y, z) + y\delta\alpha \frac{\partial\psi}{\partial x} - x\delta\alpha \frac{\partial\psi}{\partial y} \Leftrightarrow$$

$$\psi'(\vec{r}') = \left\{ I - \delta\alpha \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \psi(\vec{r}) = \left\{ I - \frac{i}{\hbar} \delta\alpha L_z \right\} \vec{r}$$

Analoog geldt dit voor infinitesimale rotaties om de X- en Y-as \rightarrow

$$\begin{cases} U_x(\delta\alpha) = I - i\hbar^{-1} \delta\alpha L_x \\ U_y(\delta\alpha) = I - i\hbar^{-1} \delta\alpha L_y \\ U_z(\delta\alpha) = I - i\hbar^{-1} \delta\alpha L_z \end{cases}$$

Voor een infinitesimale rotatie $\delta\alpha$ om een as in de richting van een willekeurige eenheidsvector \hat{n} geldt: $\vec{r}' = R\vec{r} = \vec{r} + \delta\alpha \hat{n} \times \vec{r} \rightarrow$

$$U_{\hat{n}}(\delta\alpha)\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}') = \psi(\vec{r} - \delta\alpha \hat{n} \times \vec{r}) \approx \psi(\vec{r}) - (\delta\alpha \hat{n} \times \vec{r}) \cdot \nabla \psi(\vec{r}) \Leftrightarrow$$

$$U_{\hat{n}}(\delta\alpha)\psi(\vec{r}) = \{ I - \delta\alpha \hat{n} \cdot (\vec{r} \times \nabla) \} \psi(\vec{r}) = \{ I - i\hbar^{-1} \delta\alpha \hat{n} \cdot \vec{L} \} \psi(\vec{r}) \rightarrow$$

$$U_{\hat{n}}(\delta\alpha) = I - \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \hat{n} \cdot \vec{L}$$

\vec{L} is dus op te vatten als de voortbrenger van een infinitesimale rotatie.

Als $U_n(\alpha)$ de unitaire operator is die hoort bij een rotatie over een hoek α , dan geldt:

$$U_{\hat{n}}(\alpha + \delta\alpha) = U_{\hat{n}}(\delta\alpha)U_{\hat{n}}(\alpha) = (I - i\hbar^{-1} \delta\alpha \hat{n} \cdot \vec{L})U_{\hat{n}}(\alpha) \rightarrow$$

$$dU_{\hat{n}}(\alpha) = U_{\hat{n}}(\alpha + \delta\alpha) - U_{\hat{n}}(\alpha) = (-i\hbar^{-1} \delta\alpha \hat{n} \cdot \vec{L})U_{\hat{n}}(\alpha) \rightarrow \frac{dU_{\hat{n}}(\alpha)}{U_{\hat{n}}(\alpha)} = (-i\hbar^{-1} \hat{n} \cdot \vec{L})d\alpha \rightarrow$$

$$U_{\hat{n}}(\alpha) = e^{-i(i/\hbar)\alpha \hat{n} \cdot \vec{L}}$$

Uit $[U_R, H] = 0$ volgt nu:

$$[\vec{L}, H] = 0$$

Het totale baanimpulsmoment blijft dus behouden.

Als $\Phi_m(\varphi)$ de eigenfuncties van L_z zijn en $m\hbar$ de bijbehorende eigenwaarden, dan geldt:

$$L_z \Phi_m(\varphi) = m\hbar \Phi_m(\varphi) \rightarrow -i \frac{\partial \Phi_m(\varphi)}{\partial \varphi} = m \Phi_m(\varphi) \Leftrightarrow \frac{d\Phi_m(\varphi)}{\Phi_m(\varphi)} = im d\varphi \rightarrow \Phi_m(\varphi) = C e^{im\varphi}$$

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \rightarrow$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Daar Ψ enkelwaardig moet zijn, moet gelden: $\Phi_m(2\pi) = \Phi_m(0) \rightarrow e^{2\pi im} = 1 \rightarrow m \in \mathbb{Z}$
 Daar de Z -as elke willekeurige richting kan hebben, is de component van \vec{L} in elke richting gequantiseerd in de vorm $\pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar, \dots$

De gemeenschappelijke eigenfuncties $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ van \vec{L}^2 en L_z volgen uit:

$$\begin{cases} \vec{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases}$$

Hierin is $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) \mid m \in \mathbb{Z}$

Substitutie van de uitdrukking voor \vec{L}^2 geeft:

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} Y_{lm}(\theta, \varphi) = -l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Substitutie van $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ geeft dan:

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right\} \Theta_{lm}(\theta) = 0 \quad \left| \quad 0 \leq \theta \leq \pi \right.$$

Stel: $w = \cos \theta \wedge F_{lm}(w) = \Theta_{lm}(\theta) \rightarrow$

$$\frac{dF_{lm}}{d\theta} = \frac{dF_{lm}}{dw} \cdot \frac{dw}{d\theta} = -\frac{dF_{lm}}{dw} \sin \theta \wedge \frac{d^2 F_{lm}}{d\theta^2} = -\frac{d^2 F_{lm}}{dw^2} \sin \theta - \frac{dF_{lm}}{dw} \cos \theta \rightarrow$$

$$\left\{ (1-w^2) \frac{d^2}{dw^2} - 2w \frac{d}{dw} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-w^2} \right\} F_{lm}(w) = 0 \quad \left| \quad -1 \leq w \leq 1 \right.$$

$$m = 0 \Rightarrow \text{DV van Legendre: } \left\{ (1-w^2) \frac{d^2}{dw^2} - 2w \frac{d}{dw} + l(l+1) \right\} F_{lm}(w) = 0$$

Substitutie van $F_{l0}(w) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k w^k$ met $\lambda = l(l+1)$ geeft (met c_0 en c_1 willekeurige constanten):

$$F_{l0}(w) = c_0 \left\{ 1 - \frac{1}{2}\lambda^2 - \frac{6-\lambda}{12} \cdot \frac{1}{2}\lambda w^4 + \dots \right\} + c_1 \left\{ w + \frac{2-\lambda}{6} w^3 + \frac{12-\lambda}{20} \cdot \frac{2-\lambda}{6} w^5 + \dots \right\}$$

Om een fysisch juiste golf functie te krijgen moet het aantal termen eindig zijn. Dit kan alleen als l voldoet aan:

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

l heet het **baanimpulsmoment quantumgetal**.

De fysisch mogelijke oplossingen vormen de Legendrepolynomen $P_l(w)$, met $P_l(1) = 1$.

Voor $m \neq 0$ worden de oplossingen gevormd door geassocieerde Legendrepolynomen $P_l^{|m|}(w)$:

$$P_l^{|m|}(w) = (1-w^2)^{\frac{1}{2}|m|} \frac{d^{|m|}}{dw^{|m|}} P_l(w) \quad \left| \quad |m| \in \mathbb{N} \right.$$

Hierbij zijn er voor één bepaalde waarde van l $2(l+1)$ waarden voor m : $m = -l, -l+1, \dots, l$
 Voor de genormaliseerde $\Theta_{lm}(\theta)$ functies geldt nu:

$$\Theta_{lm}(\theta) = \begin{cases} (-1)^m \left\{ \frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!} \right\}^{1/2} P_l^m(\cos \theta) & \left| \quad m \geq 0 \right. \\ (-1)^m \Theta_{l|m|}(\theta) & \left| \quad m < 0 \right. \end{cases}$$

De functies $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ heten **bol harmonischen**; substitutie van $\Phi_m(\varphi)$ en $\Theta_{lm}(\theta)$ geeft:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \begin{cases} (-1)^m \left\{ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right\}^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} & | \quad m \geq 0 \\ (-1)^m Y_{l,-m}^*(\theta, \varphi) & | \quad m < 0 \end{cases}$$

Voor de orthonormaliteit geldt:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

De impulsmomentoperatoren in matrixvorm volgen uit $\int Y_{lm}^* A Y_{l'm'} d\Omega$, waarbij A een L -operator is en $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$. Alleen voor $l = l'$ zijn de matrixelementen niet alle nul. Voor een gegeven waarde van l nemen m en m' beide $2l + 1$ -waarden aan, d.w.z. $-l \leq m, m' \leq l$, met als resultaat $(2l + 1)$ -orde vierkante matrices. Er zijn dus een oneindig aantal matrices mogelijk die representaties zijn van het impulsmoment. De laagste orde matrix volgt uit $l = 1$. Substitutie van de bijbehorende L -operator geeft dan:

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \wedge \quad L_z = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \wedge \quad L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

De matrices voor L_x en L_y zijn niet diagonaal, daar de Y_{lm} geen eigenfuncties zijn van L_x resp. L_y , dit i.t.t. de matrix voor L_z , waar Y_{lm} wel eigenfuncties zijn van L_z en de diagonaalelementen de bijbehorende eigenwaarden zijn.

Substitutie van de L -operator voor L^2 geeft:

$$L^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Deze matrix is ook diagonaal met als diagonaalelementen de eigenwaarden behorende bij de eigenfuncties Y_{lm} van L^2 .

Voor $l = 2$ ontstaan $(5, 5)$ -matrices, voor $l = 3$ $(7, 7)$ -matrices, enz. Al deze matrices voldoen aan de commutator relaties van de bijbehorende impulsmomentoperatoren.

Naast matrix-impulsmoment operatoren met een oneven aantal rijen en kolommen is het ook mogelijk matrices te construeren met een even aantal rijen en kolommen, die ook aan de commutator relaties voldoen. Deze matrices zijn niet af te leiden uit de eigenfuncties Y_{lm} , daar de bijbehorende eigenwaarden volgen uit de randvoorwaarden voor de golf functie (enkelwaardig in φ en eindig in $\theta = 0$ en $\theta = \pi$). De halftallige eigenwaarden corresponderen derhalve met een impulsmoment dat niet inbegrepen is in de klassieke definitie $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, maar komen overeen met een interne vrijheidsgraad, ofwel een *intrinsiek* impulsmoment ofwel **spin**.

Uit de commutator relaties volgt voor de laagste orde matrix uit $l = \frac{1}{2}$, $m = \pm \frac{1}{2}$:

$$S_x = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \wedge \quad S_y = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \wedge \quad S_z = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \wedge \quad S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

De **Pauli spinmatrices** σ worden gedefinieerd als:

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

De gemeenschappelijke eigenvectoren van S_z en S^2 volgen uit de eigenwaarde vergelijkingen:

$$\begin{cases} S_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ S^2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \end{cases}$$

Hieruit volgt voor de bijbehorende eigenvectoren:

$$S_z : \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ voor } \mu = \frac{1}{2}\hbar \quad \wedge \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ voor } \mu = -\frac{1}{2}\hbar; \text{ het algemene object } \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \text{ heet een } \mathbf{spinor}.$$

De spinvector \vec{S} kan alleen 1 van 2 mogelijke hoeken met de Z -as maken, welke **spin op** $|\uparrow\rangle$ resp. **spin neer** $|\downarrow\rangle$ heten.

De eigenwaarden van S_x en S_y zijn eveneens $\pm\frac{1}{2}\hbar$, met bijbehorende eigenvectoren:

$$S_x : \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ voor } \mu = \frac{1}{2}\hbar \quad \wedge \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ voor } \mu = -\frac{1}{2}\hbar$$

$$S_y : \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \text{ voor } \mu = \frac{1}{2}\hbar \quad \wedge \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \text{ voor } \mu = -\frac{1}{2}\hbar$$

Stel: $\Psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}, t) \\ \Psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$

De Schrödinger vergelijking van een deeltje met spin is dan te schrijven als:

$$H \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}, t) \\ \Psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}, t) \\ \Psi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

Hierin is H de totale Hamiltoniaan, bestaande uit een ruimte- en een spincomponent.

Als het deeltje geen translatiebeweging vertoont en H_s is de spincomponent van H , dan is de Schrödinger vergelijking te schrijven als:

$$H_s \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

Als S_1 de spinoperator is van een deeltje 1 en S_2 de spinoperator van een ander identiek deeltje 2, dan is de totale spinoperator $S = S_1 + S_2$. Er zijn nu 4 mogelijke spintoestanden, t.w.:

$$|\uparrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle, |\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle, |\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle \text{ en } |\downarrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle$$

Substitutie van de spinmatrices in $S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1S_2$ geeft dan:

$$\begin{cases} S^2 |\uparrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle = 2\hbar^2 |\uparrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle \\ S^2 |\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle = |\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle \\ S^2 |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle = |\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle \\ S^2 |\downarrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle = 2\hbar^2 |\downarrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle \end{cases}$$

De 1-ste en 4-de vergelijking zijn eigentoestanden van S^2 met eigenwaarde $2\hbar^2$, dit i.t.t. de 2-de en 3-de vergelijking. Echter, de lineaire combinaties $(\sqrt{2})^{-1}[|\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle]$ en $(\sqrt{2})^{-1}[|\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle]$ zijn wel eigentoestanden van S^2 met eigenwaarde $2\hbar^2$ resp. 0. Deze 4 vergelijkingen zijn tevens eigentoestanden van S_z met resp. eigenwaarde $\hbar, -\hbar, 0$ en 0. Er bestaan zo 2 toestanden. De eerste is een **triplettoestand** waarbij de beide spins parallel lopen met een totaal impulsmoment van 1:

$$\begin{cases} |\uparrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle & \langle S_z \rangle = +\hbar \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle] & \langle S_z \rangle = 0 \\ |\downarrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle & \langle S_z \rangle = -\hbar \end{cases}$$

De tweede toestand is een **singlettoestand** waarbij de beide spins antiparallel lopen met een totaal impulsmoment van nul:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow_1\rangle |\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\rangle |\uparrow_2\rangle] \quad \langle S_z \rangle = 0$$

Een **vectoroperator** \vec{J} is een impulsmoment als zijn componenten Hermitische operatoren zijn die voldoen aan:

$$\begin{cases} [J_x, J_y] = i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] = i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] = i\hbar J_y \end{cases}$$

In vectorvorm is dit te schrijven als:

$$\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$$

Analoog aan het baanimpulsmoment geldt:

$$[\vec{J}^2, J_x] = [\vec{J}^2, J_y] = [\vec{J}^2, J_z] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad [\vec{J}^2, \vec{J}] = 0$$

Als $j(j+1)\hbar^2 \mid j \geq 0$ de eigenwaarden van \vec{J}^2 zijn en $m\hbar$ die van J_z en $|jm\rangle$ de simultane eigenvectoren zijn, dan geldt dus:

$$\begin{cases} \vec{J}^2 |jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle \\ J_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle \end{cases}$$

De **stapoperatoren** J_+ en J_- worden gedefinieerd als:

$$\begin{cases} J_+ = J_x + iJ_y \\ J_- = J_x - iJ_y \end{cases}$$

Hieruit volgt: $J_+^\dagger = J_- \wedge J_-^\dagger = J_+$

Daar $[\vec{J}^2, \vec{J}] = 0$, volgt hieruit:

$$[\vec{J}^2, J_\pm] = 0$$

$$J_+ J_- = J_x^2 - iJ_x J_y + iJ_y J_x + J_y^2 = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$

Analoog voor $J_- J_+ \rightarrow$

$$J_\pm J_\mp = \vec{J}^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z$$

$$[J_+, J_-] = [J_x, J_x] + [iJ_y, J_x] + [J_x, -iJ_y] + [iJ_y, -iJ_y] = -[J_x, iJ_y] + [J_x, -iJ_y] = \hbar J_z + \hbar J_z \rightarrow$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$

$$[J_z, J_+] = [J_z, J_x] + [J_z, iJ_y] = i\hbar J_y + [J_z, i]J_y + i[J_z, J_y] = i\hbar J_y + \hbar J_x = \hbar J_+$$

Analoog voor $[J_z, J_-] \rightarrow$

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm$$

Atoomfysica

Postulaten van Bohr:

1. Elektronen bewegen in cirkel- of ellipsvormige banen rond de atoomkern.
2. De elektronen kunnen alleen in bepaalde banen bewegen die overeenkomen met stationaire toestanden; atomen kunnen daarom alleen in bepaalde energietoestanden voorkomen.
3. Een atoom kan van een toestand met energie E_a overgaan in een energietoestand E_b onder uitzending of absorptie van een foton met energie:

$$h\nu = |E_a - E_b|$$

4. Het baanimpulsmoment van een elektron in een cirkelbaan is gequantiseerd:

$$L = n\hbar \mid n \in \mathbb{N}^+$$

Voor een elektron dat rond een stilstaande kern met lading Ze draait geldt dan:

$$F_{coul} = F_{centr} \Leftrightarrow \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}; \text{ substitutie van } v = \frac{n\hbar}{m_e r} \text{ geeft:}$$

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e Z e^2} n^2$$

$$E_n = T + V = \frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} - \frac{m_e}{\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}; \text{ met } E_{n,r=\infty} = 0 \text{ volgt hieruit:}$$

$$E_n = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

Hierin is N het **hoofd quantumgetal**; E_1 is de **grondtoestand**, E_2, E_3, \dots de **aangeslagen toestanden**.

$$\nu = \frac{|E_a - E_b|}{2\pi\hbar} = \frac{m_e}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{1}{n_a^2} - \frac{1}{n_b^2} \right); \text{ voor } Z = 1 \text{ volgt hieruit:}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_a^2} - \frac{1}{n_b^2} \right)$$

Hierin is $R \approx 10^7/\text{m}$ de **Rydbergconstante** voor het waterstofatoom. Voor $n_a = 1, 2, 3, 4, 5$ ontstaan resp. de **Lyman-, Balmer-, Paschen-, Brackett- en Pfundspectraallijnen**.

De **fijnstructuurconstante** α wordt gedefinieerd als:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

Als het elektron en de atoomkern om een gemeenschappelijk MM draaien, dan gelden dezelfde formules, echter met $m_e \equiv \mu = m_e m_p / (m_e + m_p)$.

Correspondentieprincipe: voor grote quantumgetallen nadert de quantum mechanische uitkomst asymptotisch tot die van de klassieke mechanica.

Een elektron dat met een snelheid v in een cirkelbaan met straal r beweegt is equivalent met een stroom $I = ev/2\pi r$. Voor het magnetisch dipoolmoment \mathcal{M} van een elektron geldt dan: $\mathcal{M} = IdA = \frac{1}{2}evr = eL/2m_e$. Daar de stroomrichting tegengesteld is aan de beweging van het elektron volgt hieruit:

$$\vec{\mathcal{M}} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

Het **Bohrmagneton** μ_B wordt gedefinieerd als:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

Het magnetisch dipoolmoment van een elektron is dan te schrijven als:

$$\vec{\mathcal{M}} = -\mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

De waarde van $\mu_B \approx 10^{-23} \text{J/T}$.

Uit het *Stern-Gerlach experiment* volgt dat ee elektron tevens een **intrinsiek impulsmoment** ofwel **spin** \vec{S} heeft, behorend bij een intrinsiek impulsmoment $\vec{\mathcal{M}}_s$:

$$\vec{\mathcal{M}}_s = -g_s \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}$$

Hierin is $g_s \approx 2$ de **spinyromagnetische verhouding**.

Voor het totale magnetisch moment $\vec{\mathcal{M}}$ van een elektron geldt dan:

$$\vec{\mathcal{M}} = -\mu_B \frac{\vec{L} + g_s \vec{S}}{\hbar}$$

Tevens blijkt dat de component van het impulsmoment in een bepaalde richting is gequantiseerd:

$$L_z = m\hbar \mid m \in \mathbb{Z}$$

Hierin is m het **magnetisch quantumgetal**.

Voor een 1-elektron atoom met kernmassa M en kernlading Ze^+ is de Schrödingervergelijking te schrijven als:

$$\nabla^2 \psi(x, y, z) + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(x, y, z)] \psi(x, y, z) = 0$$

Hierin is $\mu = Mm_e / (M + m_e)$ en $V(x, y, z) = -Ze^2 / (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ de interactiepotentiaal tussen kern en elektron.

Overgang op bolcoördinaten (r, θ, φ) geeft:

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0$$

Stel: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \rightarrow$

$$\frac{1}{Rr^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\Theta r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\Phi r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] = 0 \Leftrightarrow$$

$$-\frac{\sin^2 \theta}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{\sin \theta}{\Theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \theta [E - V(r)] = \frac{1}{\Phi} \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \Leftrightarrow$$

$$\frac{1}{\Phi} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \wedge$$

$$-\frac{\sin^2 \theta}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{\sin \theta}{\Theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \theta [E - V(r)] = -m^2$$

De 2-de DV is te schrijven als: $\frac{1}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \Leftrightarrow$

$$\frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\Theta \sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) = l(l+1) \wedge \frac{1}{R} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = l(l+1)$$

De Schrödingervergelijking is dus equivalent met 3 gewone DV-en:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0 \\ \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta = 0 \\ \frac{1}{r^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R = 0 \end{array} \right.$$

De 1-ste DV heeft als oplossing: $\Phi_m(\varphi) = A e^{im\varphi}$

$$\varphi = 0 \wedge \varphi = 2\pi \Rightarrow A = A e^{2\pi im} \rightarrow 1 = \cos 2\pi m + i \sin 2\pi m \rightarrow$$

Het magnetisch quantumgetal kan alleen een gehele waarde aannemen:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Uit de orthonormaliteitsvoorwaarde volgt: $A = 1/\sqrt{2\pi} \rightarrow$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Substitutie van $\xi = \cos \theta$ in de 2-de DV geeft: $\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] \Theta = 0 \rightarrow$

$$\Theta_{lm}(\theta) = B \sin^m \theta P_l^m(\cos \theta)$$

Hierin zijn $P_l^m(\cos \theta)$ de geassocieerde Legendre polynomen die alleen niet nul zijn als $m =$

$0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Voor een gegeven waarde van l kan m dus $(2l + 1)$ verschillende waarden aannemen; l is het baanimpulsmoment quantumgetal en kan alleen een natuurlijk getal zijn:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Uit de orthonormaliteitsvoorwaarde volgt: $B = \sqrt{[(2l + 1)(l - m)!]/[2(l + m)!]} \rightarrow$

$$\Theta_{lm} = \sqrt{\frac{(2l + 1)(l - m)!}{2(l + m)!}} \sin^m \theta P_l^m(\cos \theta)$$

Substitutie van $R = u/r$ en $V(r) = -Ze^2/r$ in de 3-de DV geeft:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l + 1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u = 0$$

Substitutie van $r = \hbar^2 n \rho / 2\mu Z e^2$ en $E = \mu Z^2 e^2 / 2\hbar^2 n^2$ geeft:

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l + 1)}{\rho^2} \right] u = 0 \rightarrow R_{nl} = N_{nl} \rho^l e^{\frac{1}{2}\rho} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

Hierin zijn $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ de geassocieerde Laguerre polynomen die alleen niet nul zijn als het hoofd quantumgetal n een natuurlijk getal is:

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Voor een gegeven n geldt voor l :

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n - 1)$$

Uit de orthonormaliteitsvoorwaarde volgt: $N_{nl} = \sqrt{\frac{4(n - l - 1)! Z^3}{[(n + l)!]^3 n^4 a_0^3}} \rightarrow$

$$R_{nl} = \sqrt{\frac{4(n - l - 1)! Z^3}{[(n + l)!]^3 n^4 a_0^3}} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l e^{-Zr/na_0} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)$$

Hierin is $a_0 = \hbar^2 / \mu e^2 \approx 0,5 \cdot 10^{-8} \text{cm}$ de straal van de 1-ste Bohrbaan.

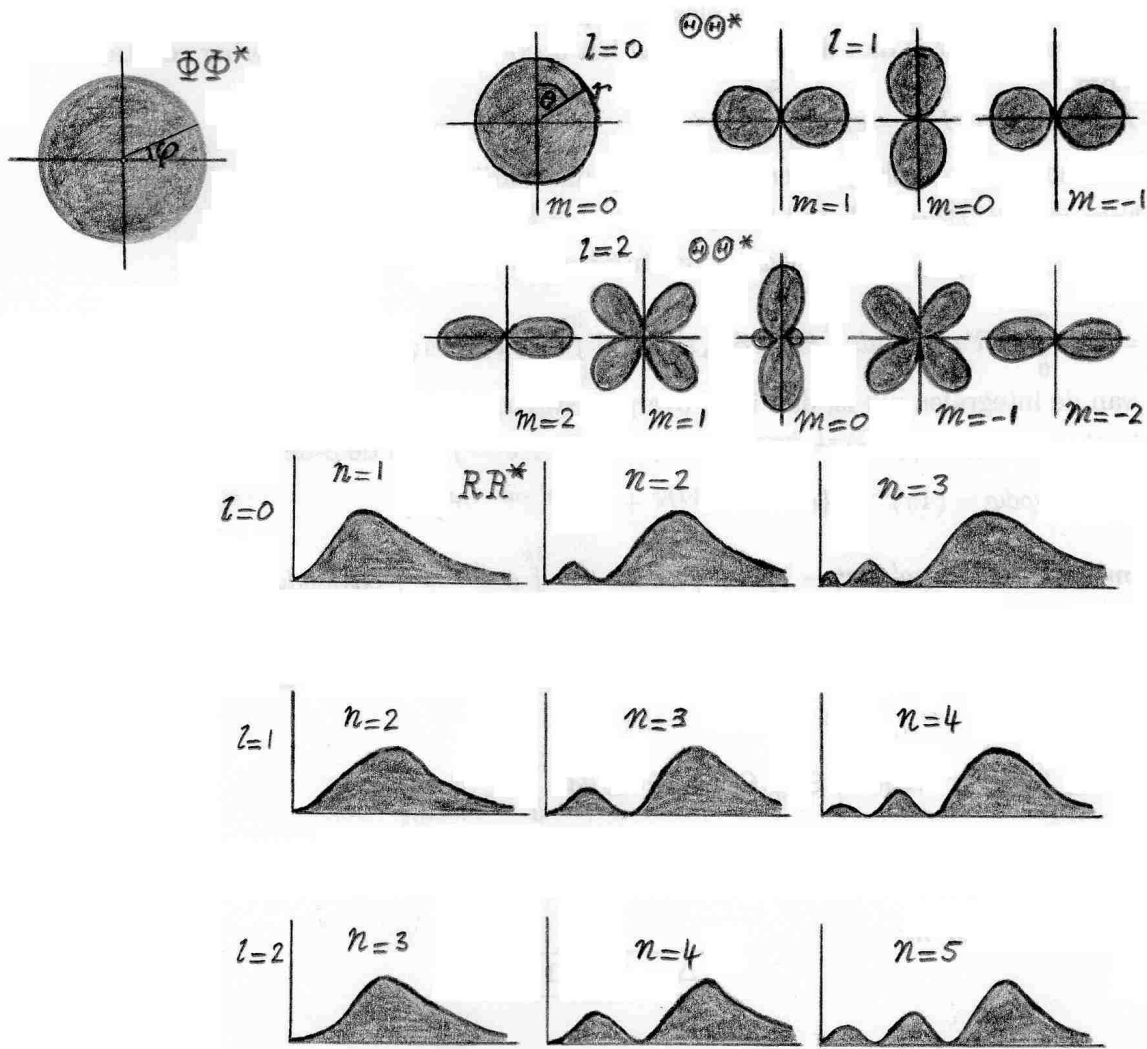
De golf functie $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ voor een 1-elektron atoom is nu te schrijven als:

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\frac{4(2l + 1)(l - m)!(n - l - 1)! Z^3}{4\pi(l + m)![(n + l)!]^3 n^4 a_0^3}} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right) \sin^m \theta P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

Voor de energieniveaus geldt, met $1/4\pi\epsilon_0 \equiv 1$:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2}$$

Daar voor een gegeven waarde van n er verschillende waarden van l en m zijn, zijn er voor die n ook verschillende golf functies. Daar de energie alleen door n bepaald wordt, hebben deze verschillende golf functies dezelfde energie, d.w.z. ze zijn gedegenerereerd. Voor een gegeven n treedt er een $2n^2$ -voudige degeneratie op.



Als een atoom in een energietoestand E_i verkeert, met corresponderende Hamiltoniaan H_0 en eigenfunctie ψ_i , dan geldt: $\Psi = c_i \psi_i e^{-iE_i t/\hbar} \rightarrow \Psi \Psi^* = c_i c_i^* \psi_i \psi_i^*$

Daar $\Psi \Psi^*$ constant in de tijd is, overeenkomend met een stationaire toestand, kan een atoom in een dergelijke eigentoestand dus geen straling absorberen of emitteren.

Als op het atoom een storingsenergie E_f wordt uitgeoefend met Hamiltoniaan H' , met $H' \ll H_0$, dan is de totale Hamiltoniaan $H = H_0 + H'$. De bijbehorende golf functie is dan: $\Psi = c_i \psi_i e^{-iE_i t/\hbar} + c_f \psi_f e^{-iE_f t/\hbar} \rightarrow$

$$\Psi \Psi^* = c_i c_i^* \psi_i \psi_i^* + c_f c_f^* \psi_f \psi_f^* + c_f c_i^* \psi_f \psi_i^* e^{i(E_i - E_f)t/\hbar} + c_i c_f^* \psi_i \psi_f^* e^{-i(E_i - E_f)t/\hbar}$$

De laatste 2 termen oscilleren met een frequentie $\omega = (E_i - E_f)/\hbar$.

De overgangswaarschijnlijkheid P_{if} per tijdseenheid van toestand i naar toestand f is evenredig met het kwadraat van de matrix H_{if} van H' : $H_{if} = \langle i | H' | f \rangle = \int \int \int \psi_f^* H' \psi_i dv$

Als de matricelementen niet nul zijn, dan is de overgang *toegestaan*; zijn ze wel nul, dan is de overgang *verboden*.

Als een elektromagnetische golf met veldvector \vec{E} een 1-elektron atoom treft, dan is de belangrijkste term in de wisselwerking de elektrische dipoolinteractie energie waarvoor geldt: $H' = -\vec{p}\vec{E} = e\vec{r}\vec{E}$

Hierin is \vec{p} het dipoolmoment van het elektron op afstand r . Daar de golflengte van de opvallende golf veel groter is dan de afmeting van het atoom, is $|\vec{E}|$ bij benadering constant over het atoom.

Voor H_{if} geldt nu: $H_{if} = eE \int_V \psi_f^* r \psi_i dv$

Voor de x -component geldt, onder overgang op bolcoördinaten en met $\psi_i = \psi_{nlm} = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ en $\psi_f = \psi_{n'l'm'} = R_{n'l'}(r)\Theta_{l'm'}(\theta)\Phi_{m'}(\varphi)$:

$$H_{if,x} = eE_x \int_V \psi_{n'l'm'}^* r \sin \theta \cos \varphi \psi_{nlm} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \Leftrightarrow$$

$$H_{if,x} = eE_x \int_0^\infty r^3 R_{n'l'}^* R_{nl} dr \int_0^\pi \Theta_{l'm'}^* \Theta_{lm} \sin^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^* \Phi_m \cos \varphi d\varphi$$

Als 1 van de integralen nul is, dan is de overgangswaarschijnlijkheid nul.

Substitutie van $\Phi_m = (\sqrt{2\pi})^{-1} e^{im\varphi}$ en $\cos \varphi = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$ in de 3-de integraal geeft:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^* \Phi_m \cos \varphi d\varphi = (4\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \{e^{-i(m'-m+1)\varphi} + e^{-i(m'-m-1)\varphi}\} d\varphi$$

$$\text{Stel: } (m' - m + 1) = (m' - m - 1) = k \mid k \in \mathbb{Z} \rightarrow \int_0^{2\pi} e^{-ik\varphi} d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos k\varphi d\varphi - i \int_0^{2\pi} \sin k\varphi d\varphi = 0$$

Voor $k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\} \rightarrow$

De integraal is nul tenzij $m' - m + 1 = 0 \wedge m' - m - 1 = 0$, ofwel als $\Delta m = m' - m = \pm 1$

Analoog voor $H_{if,y}$: $H_{if,y} \neq 0$ voor $\Delta m = \pm 1$

$$H_{if,z} = eE_z \int_0^\infty r^3 R_{n'l'}^* R_{nl} dr \int_0^\pi \Theta_{l'm'}^* \Theta_{lm} \sin \theta \cos \theta d\theta \int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^* \Phi_m \cos \varphi d\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^* \Phi_m d\varphi = (2\pi)^{-1} e^{-i(m'-m)\varphi} d\varphi = 0, \text{ tenzij } m' - m = 0 \rightarrow$$

Selectieregels voor m :

$$\boxed{\Delta m = 0, \pm 1}$$

Onder spiegeling geldt voor bolcoördinaten: $r \rightarrow r \wedge \theta \rightarrow (\pi - \theta) \wedge \varphi \rightarrow (\pi + \varphi) \rightarrow$

$$\begin{cases} R_{nl}(r) = R_{nl}(r) \\ \Phi_m(\pi + \varphi) = (-1)^{|m|} \Phi_m(\varphi) \\ \Theta_{lm}(\pi - \theta) = (-1)^{l+|m|} \Theta_{lm}(\theta) \end{cases} \rightarrow$$

$$R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\pi - \theta)\Phi_m(\pi + \varphi) = (-1)^{l+|m|} (-1)^{|m|} R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) \Leftrightarrow$$

$$\psi_{nlm}(r, \pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \rightarrow$$

$$l = 1, 3, 5, \dots \Rightarrow \psi_{nlm} \text{ is oneven}$$

$$l = 0, 2, 4, \dots \Rightarrow \psi_{nlm} \text{ is even}$$

Daar $r (= x, y \text{ of } z)$ oneven is, is H_{if} oneven als ψ_i en ψ_f beide even of oneven zijn. Daar een oneven integraal nul is, moet H_{if} dus even zijn. Dit kan alleen als ψ_i en ψ_f een verschillende pariteit hebben, d.w.z. tijdens de overgang moet de golf functie van pariteit verwisselen. Hieruit volgt: $\Delta l = l' - l = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$

Combinatie met de waarden voor m geeft dan de **selectieregels voor l :**

$$\boxed{\Delta l = \pm 1}$$

De toegestane waarden voor n zijn onbeperkt, zodat voor de **selectieregels voor n** geldt:

$$\boxed{\Delta n = Z}$$

De stationaire toestanden van een systeem dat niet exact oplosbaar is maar hier slechts weinig van afwijkt, kunnen bij benadering worden berekend d.m.v. tijdonafhankelijke *storingrekening*. Als het ongestoorde systeem een Hamiltoniaan H_0 , energie eigenfuncties u_n^0 en eigenwaarden E_n^0 heeft, dan geldt: $H_0 u_n^0 = E_n^0 u_n^0$

Als H' dan de Hamiltoniaan van een storing is, dan is de totale Hamiltoniaan te schrijven als: $H = H_0 + \lambda H'$. Hierin is λ een dimensieloze parameter welke altijd gelijk aan 1 gesteld kan worden. De gestoorde eigenwaarden en eigenfuncties kunnen nu geschreven worden als:

$$\begin{cases} E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \\ u_n = u_n^0 + \lambda u_n^1 + \lambda^2 u_n^2 + \dots \end{cases}$$

Substitutie van de reeksen voor H , E_n en u_n in de Schrödingervergelijking voor het verstoorde systeem $(H - E_n)u_n = 0$ geeft:

$$(H_0 + \lambda H' - E_n^0 - \lambda E_n^1 - \dots)(u_n^0 + \lambda u_n^1 + \dots) = 0 \Leftrightarrow$$

$$H_0 u_n^0 + \lambda H_0 u_n^1 + \lambda H' u_n^0 + \lambda^2 H' u_n^1 - E_n^0 u_n^0 - \lambda E_n^0 u_n^1 - \lambda E_n^1 u_n^0 - \lambda^2 E_n^1 u_n^1 + \dots = 0$$

De eerste benadering geeft de Schrödingervergelijking voor het ongestoorde systeem.

Voor de 2-de benadering geldt: $E_n^1 u_n^0 = H' u_n^0 + (H_0 - E_n^0) u_n^1 \rightarrow$

Substitutie van $u_n^1 = \sum_m a_{nm} u_m^0$, vermenigvuldiging met $(u_n^0)^*$ en integratie geeft

(met $H_0 \equiv E_m^0$):

$$\int_V \int_V \int_V E_n^1 (u_n^0)^* u_n^0 dV = \int_V \int_V \int_V (u_n^0)^* H' u_n^0 dV + \sum_m a_{nm} \int_V \int_V \int_V (E_m^0 - E_n^0) (u_n^0)^* u_m^0 dV$$

De 2-de term in het rechterlid is nul voor $m \neq n$ daar de u_n^0 's orthogonaal zijn, alsmede nul voor $m = n$ t.g.v. de factor $(E_m^0 - E_n^0)$. \rightarrow

$$E_n^1 = H'_{nm} = \int_V \int_V \int_V (u_n^0)^* H' u_n^0 dV$$

Hierin zijn H'_{nm} de diagonaalelementen van de matrix $H'_{mn} = \langle u_m^0 | H' | u_n^0 \rangle$.

De eerste orde benaderingen van de energietoestanden zijn dus de verwachtingswaarden van H' in de niet-gestoorde toestanden u_n^0 .

Vermenigvuldiging van $E_n^1 u_n^0$ met $(u_m^0)^*$ en integratie geeft:

$$\int_V \int_V \int_V E_n^1 u_n^0 (u_m^0)^* dV = \int_V \int_V \int_V (u_m^0)^* H' u_n^0 dV + \sum_m a_{nm} \int_V \int_V \int_V (E_m^0 - E_n^0) u_m^0 (u_m^0)^* dV$$

Voor de eerste orde benaderingen van de eigenfuncties voor $m \neq n$ volgt hieruit:

$$a_{nm} = \frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}$$

Als op een systeem met Hamiltoniaan $H_0(\vec{r})$ en stationaire toestanden $H_0 u_n = E_n u_n$ een tijdafhankelijke storing wordt uitgeoefend met Hamiltoniaan $H'(\vec{r}, t)$, dan geldt voor de Schrödingervergelijking van het verstoorde systeem:

$$(H_0 + H')\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

Stel: $\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n(t) u_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$

Substitutie in de Schrödingervergelijking geeft:

$$\sum_n a_n(t) H_0 u_n e^{-iEt/\hbar} + \sum_n a_n(t) H' u_n e^{-iEt/\hbar} = \sum_n a_n(t) E_n u_n e^{-iEt/\hbar} + \sum_n \dot{a}_n(t) u_n e^{-iEt/\hbar} \Leftrightarrow$$

$$\sum_n a_n(t) H' u_n e^{-iEt/\hbar} = i\hbar \sum_n \dot{a}_n(t) u_n e^{-iEt/\hbar} \rightarrow$$

$$\sum_n a_n(t) \left\{ \int_V \int u_m^* H' u_n dV \right\} e^{-iEt/\hbar} = i\hbar \sum_n \dot{a}_n(t) \left\{ \int_V \int u_m^* u_n dV \right\} e^{-iEt/\hbar} \Leftrightarrow$$

$$\sum_n a_n(t) H'_{mn} e^{-iEt/\hbar} = i\hbar \sum_n \dot{a}_n(t) \delta_{mn} e^{-iEt/\hbar} \rightarrow \dot{a}_n(t) = (i\hbar)^{-1} \sum_n a_n(t) H'_{mn} e^{i\omega_{mn}t}$$

Hierin is $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$.

Analoog aan de tijdonafhankelijke storingsrekening kan $a_n(t)$ worden ontwikkeld in een machtreeks: $a_n(t) = a_n^0(t) + \lambda a_n^1(t) + \dots$

Substitutie in $\dot{a}_m(t)$ geeft in eerste benadering: $\dot{a}_m(t) = 0 \rightarrow$ alle $\dot{a}_m(t)$'s zijn dus nul, overeenkomend met de stationaire toestand als $H' = 0$.

In 2-de benadering geldt: $\dot{a}_m^1(t) = (i\hbar)^{-1} \sum_n a_n^0(t) H'_{mn} e^{i\omega_{mn}t} \rightarrow$

$$a_m^1(t) = (i\hbar)^{-1} \sum_n \int_0^t a_n^0(t) H'_{mn} e^{i\omega_{mn}t} dt$$

Als het systeem op $t = 0$ in een stationaire toestand $n = k$ verkeert, dan is $a_k(t) = 1$ en $a_n(t) = 0 | n \neq k \rightarrow$

$$a_m^1(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t H'_{mk} e^{i\omega_{mk}t} dt$$

De waarschijnlijkheid om het systeem op tijd t in toestand mm te vinden is nu $|a_m^1(t)|^2$, hetgeen dus de overgangswaarschijnlijkheid van toestand k naar toestand m is.

Een harmonische verstoring heeft als Hamiltoniaan $H'(\vec{r}, t) = \bar{H}(\vec{r}) \cos \omega t$

Substitutie in $a_m^1(t)$ geeft: $a_m^1(t) = (i\hbar)^{-1} \bar{H}(\vec{r}) \int_0^t \cos \omega t e^{i\omega_{mk}t} dt \Leftrightarrow$

$$a_m^1(t) = -\frac{\bar{H}_{mk}}{2\hbar} \left\{ \frac{e^{i(\omega_{mk})t} - 1}{\omega_{mk} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mk})t} + 1}{\omega_{mk} + \omega} \right\}$$

Voor $\omega \approx \omega_{mk}$ is 1 van de 2 breuken te verwaarlozen; substitutie van $\omega \approx \omega_{mk}$ geeft:

$$|a_m^1(t)|^2 \approx |\bar{H}_{mk}|^2 \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{mk} - \omega)t}{\hbar^2(\omega_{mk} - \omega)^2}, \text{ welke een piek heeft}$$

rond $\omega = \omega_{mk}$. Daar de breedte van de piek omgekeerd evenredig met t is, is het bereik van de storing ω voor

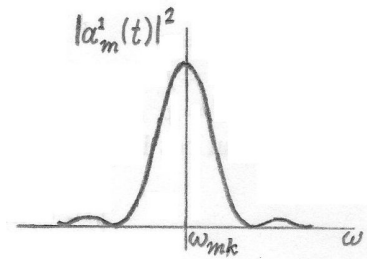
een langzame overgang beperkt tot een zeer nauw interval rond $\omega = \omega_{mk}$.

In dat geval geldt: $\hbar\omega \approx \hbar\omega_{mk} = E_m - E_k$. Voor $\omega \approx -\omega_{mk}$ geldt: $\hbar\omega_{mk} = E_k - E_m$.

Daar de piek een zekere breedte heeft, zijn er ook overgangen mogelijk waarbij $\hbar\omega$ niet exact gelijk is aan $E_m - E_k$, hetgeen betekent dat de energiebehoudswet niet exact geldig is bij quantumprocessen. De breedte van de piek is geconcentreerd in een interval t^{-1} rond ω , ofwel een energie-interval van $\Delta E \propto \hbar/t$. Daar het moment van overgang onbekend is, is t op te vatten als de duur van de overgang $\Delta t \rightarrow$

Energie-onzekerheidsrelatie:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar$$



Door de onzekerheid in energie heeft een systeem een aantal mogelijke toestanden binnen een spreiding ΔE rond E . De totale waarschijnlijkheid voor een overgang naar een mogelijke toestand binnen ΔE is dan de som van de afzonderlijke waarschijnlijkheden over alle mogelijke eindtoestanden.

Als de eindtoestanden zeer dicht bijeen liggen zodat ze bij benadering een continuüm vormen, dan is $\rho(\omega_{mk})$ de dichtheid van deze toestanden, ofwel het aantal toestanden per eenheid van frequentie-interval ω_{mk} . De sommatie over $|a_m^1(t)|^2$ wordt dus vervangen door de integraal $\int_{-\infty}^{\infty} |a_m^1(t)|^2 \rho(\omega_{mk}) d\omega_{mk}$.

Daar i.h.a. ρ en \overline{H}_{mk} veel minder scherpe functies van ω zijn dan $|a_m^1(t)|^2$, kunnen deze bij benadering als constant beschouwd worden met waarde bij $\omega_{mk} = \omega \rightarrow$

$$|a_m^1(t)|^2 = \frac{|\overline{H}_{mk}(\omega)|^2}{4\hbar^2} \rho(\omega) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{mk} - \omega)t}{[\frac{1}{2}(\omega_{mk} - \omega)]^2} d\omega_{mk} = \frac{\pi |\overline{H}_{mk}|^2 \rho(\omega) t}{2\hbar^2}$$

De **overgangsmate** w wordt gedefinieerd als de overgangswaarschijnlijkheid per sec. \rightarrow

Gouden regel van Fermi:

$$w = \frac{\pi |\overline{H}_{mk}|^2 \rho(\omega)}{2\hbar^2}$$

Voor de grootte L van het gequantiseerde impulsmoment geldt:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad | \quad l \in \mathbb{N}$$

In 1-elektron atomen (d.w.z. in een Coulombveld) geldt hierbij dat bij elke waarde van n er n bepaalde waarden voor het impulsmoment zijn en wel van $l = 0$ tot en met $l = n - 1$. Hierbij worden de waarden van l aangeduid met letters:

$$n = 1 \Rightarrow l = s$$

$$n = 2 \Rightarrow l = s \wedge l = p$$

$$n = 3 \Rightarrow l = s \wedge l = p \wedge l = d$$

$$n = 4 \Rightarrow l = s \wedge l = p \wedge l = d \wedge l = f$$

Daar de richting van het impulsmoment eveneens gequantiseerd is geldt voor L_z :

$$L_z = m\hbar \quad | \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

Dit betekent dat er voor elke waarde van het impulsmoment er $2l + 1$ waarden van m zijn ofwel $2l + 1$ verschillende richtingen van \vec{L} . Dit heeft tot gevolg dat elk energieniveau van een 1-elektron atoom behorende bij een bepaalde n , n verschillende impulsmomenttoestanden met dezelfde energie heeft met l variërend van nul tot en met $n - l$; deze niveaus worden aangeduid met ns, np, nd, \dots

Als een 1-elektron atoom in een magnetisch veld wordt geplaatst, dan verkrijgt het elektron een extra energie E_B waarvoor geldt: $E_B = \vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{B} = (e/2m_e)\vec{L} \cdot \vec{B} \rightarrow$

$$\text{Op het elektron werkt een koppel } \vec{\tau} \text{ waarvoor geldt: } \vec{\tau} = \vec{\mathcal{M}} \times \vec{B} = -(e/2m_e)\vec{L} \times \vec{B}$$

Hierdoor voert \vec{L} een precessie om de richting van \vec{B} uit. Als de Z -as parallel aan \vec{B} loopt, dan geldt: $E_B = -\mathcal{M}_{L_z} B = \mu_B (L/\hbar) B = \mu_B m B \rightarrow$

In aanwezigheid van een (sterk) magnetisch veld wordt elk energieniveau met de quantumgetallen (n, l) in $2l + 1$ niveaus gesplitst. (De s -toestanden (met $l = 0$) worden niet door een magnetisch veld beïnvloed.) \rightarrow

Zeemaneffect: Elke spectraallijn wordt in een *triplet* gesplitst waarbij de afstand tussen de 4 lijnen evenredig is met de sterkte van het magnetisch veld.

De energieniveaus kunnen overigens in meer dan 3 niveaus gesplitst worden, maar overgangen bij dezelfde waarde van Δm hebben dezelfde energieverandering en geven dus dezelfde spectraallijn.

Uit het Stern-Gerlach experiment volgt dat de spin \vec{S} van het elektron slechts 2 richtingen t.o.v. het magnetisch veld kan hebben, t.w. *parallel* (spin op) en *antiparallel* (spin neer). Uit $g = 2l + 1$ volgt dan dat het spinquantumgetal $s(\equiv l) = \frac{1}{2}$; het quantumgetal m_s behorende bij S_z is dan dus $\pm \frac{1}{2} \rightarrow$

$$\begin{array}{l|l} S^2 = s(s+1)\hbar^2 & | s = \frac{1}{2} \\ S_z = m_s\hbar & | m_s = \pm \frac{1}{2} \end{array}$$

Als χ_{m_s} de spingolffuncties zijn behorende bij S_z , dan geldt:

$$\begin{array}{l} S^2 \chi_{m_s} = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_{m_s} \\ S_z \chi_{m_s} = m_s \hbar \chi_{m_s} \end{array}$$

De volledige golffunctie voor een 1-elektron atoom is dus van de vorm:

$$\psi_{nlmm_s} = R_{nl}(r)\Theta_{nl}(\theta)\Phi_m(\varphi)\chi_{m_s}$$

Daar de spin van het elektron slechts 2 mogelijke richtingen t.o.v. het baanimpulsmoment kan bezitten, worden - m.u.v. de s -niveaus - alle energieniveaus van 1-elektron atomen verdubbeld, zodat ook de spectraallijnen in *doubletten* verschijnen.

In een coördinatenstelsel XYZ verbonden met de kern van een atoom draait het elektron om de kern met impulsmoment \vec{L} , en in een stelsel $X'Y'Z'$ verbonden met het elektron draait de kern om het elektron. Daar de kern een pos. lading heeft veroorzaakt deze in $X'Y'Z'$ een magnetisch veld \vec{B} parallel aan \vec{L} . Daar het elektron in $X'Y'Z'$ in rust is heeft \vec{B} alleen een wisselwerking met het magnetisch moment \vec{M}_s van het elektron, die evenredig is met $\vec{M}_s \cdot \vec{B}$. Omdat $\text{cal } \vec{M} \parallel \vec{S}$ en $\vec{B} \parallel \vec{L}$ loopt, is deze zgn. **spin-baanwisselwerking** evenredig met $\vec{S} \cdot \vec{L}$. Voor de energie E_{SL} van het elektron t.g.v. deze wisselwerking geldt dus:

$$E_{SL} = a\vec{S} \cdot \vec{L}$$

Daar \vec{S} slechts 3 mogelijke richtingen t.o.v. \vec{L} kan hebben splitst de spin-baanwisselwerking elk energieniveau van het elektron met een bepaalde waarde van l in 2 dicht bij elkaar gelegen niveaus. Hierbij correspondeert één energieniveau met \vec{L} en \vec{S} parallel (spin op) met $j = l + \frac{1}{2}$, en het andere met \vec{L} en \vec{S} antiparallel (spin neer) met $j = l - \frac{1}{2}$. De bij een energieniveau horende spectraallijn wordt dus ook verdubbeld tot een doublet (m.u.v. de s -niveaus met $l = 0$).

Daar de spin-baanwisselwerking afhangt van de hoek tussen \vec{S} en \vec{J} werkt er een koppel loodrecht op het vlak door beide vectoren, zodat deze een precessie uitvoeren om hun resultante \vec{J} .

Voor een elektron met $g_s \approx 2$ geldt: $\vec{M} = -(e/2m_2)[\vec{L} + 2\vec{S}] = -(2/2m_e)[\vec{J} + \vec{S}]$

Daar \vec{M} niet tegengesteld gericht is aan \vec{J} , voert ook \vec{M} een precessie om \vec{J} uit, waarbij de

gemiddelde waarde van \vec{M} gelijk is aan de component van \vec{M} die parallel loopt met $\vec{J} \rightarrow$

$$\overline{\vec{M}} = -\frac{e}{2m_e} \left[(\vec{J} + \vec{S}) \cdot \frac{\vec{J}}{J} \right] \frac{\vec{J}}{J} = -\frac{e}{2m_e} [1 + \vec{S} \cdot \frac{\vec{J}}{J}] \frac{\vec{J}}{J} = -\frac{e}{2m_e} [1 + \frac{1}{2}(\vec{J}^2 + \vec{S}^2 - \vec{L}^2)] \frac{\vec{J}}{J}$$

Substitutie van de eigenwaarden voor \vec{J}^2 , \vec{S}^2 en \vec{L}^2 geeft:

$$\overline{\vec{M}} = -\frac{e}{2m_2} \left[1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right] \vec{J}$$

Hierin heet de term tussen de rechte haken de **Landéfactor** g . \rightarrow

$$\overline{\vec{M}} = -\frac{e}{2m_2} g \vec{J}$$

Voor de energie van het elektron in een (zwak) magnetisch veld geldt dan:

$$E_B = -\overline{\vec{M}} \cdot \vec{B} = (e/2m_e) g J_z B = (\mu_B/\hbar) g m \hbar B$$

Voor 2-elektron atomen is de potentiële energie gelijk aan: $V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$

Hierin is de 3-de term de energie tussen de elektronen.

Vanwege deze wisselwerkingsterm heeft de golffunctie van een 2-elektron atoom betrekking op het *gehele* atoom.

Als in eerste benadering de beweging van de elektronen onafhankelijk van elkaar wordt verondersteld, dan is de waarschijnlijkheid om elektron 1 in een bepaald punt van de ruimte aan te treffen en tegelijkertijd elektron 2 in een ander punt gelijk aan $P(1)P(2)$. \rightarrow

$\psi_{atoom} = \psi_a(1)\psi_b(2)$, met a en b de bijbehorende reeks quantumgetallen van 1 resp. 2. Dezelfde toestand wordt echter ook beschreven door $\psi_{atoom} = \psi_a(2)\psi_b(1)$; dit verschijnsel heet *plaats-ruil ontarding*.

Daar elektronen identiek en ononderscheidbaar zijn moet ψ_{atoom} die vorm bezitten zo, dat $|\psi_{atoom}|^2$ symmetrisch is t.o.v. de elektronen. Hieruit volgt voor de **baangolffunctie**:

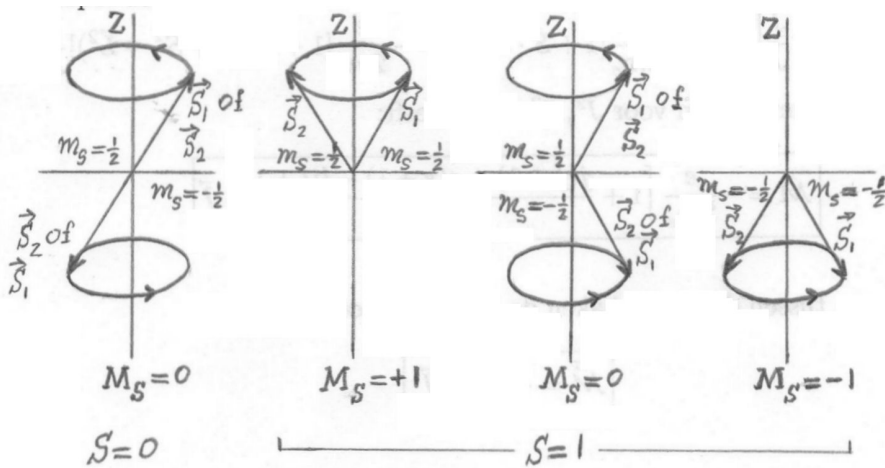
$$\psi_{atoom} = \psi_a(1)\psi_b(2) \pm \psi_a(2)\psi_b(1)$$

Hierbij is $\psi_S(1,2) = \psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)$ *symmetrisch* t.o.v. de elektronen, d.w.z. $\psi_S(1,2) = \psi_S(2,1)$, en $\psi_A(1,2) = \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)$ *antisymmetrisch*. d.w.z. $\psi_A(1,2) = -\psi_A(2,1)$.

$r_{12} \ll 1 \Rightarrow \psi_a(1)\psi_b(2) \approx \psi_a(2)\psi_b(1) \rightarrow \psi_A \approx 0$; ψ_A beschrijft een toestand waarin de elektronen nooit dicht bij elkaar komen i.t.t. ψ_S waar dit wel kan gebeuren. De wisselwerkingsenergie tussen de elektronen bij ψ_A is due kleiner dan die bij ψ_S . \rightarrow

Een 2-elektron atoom kan in 2 verschillende toestanden met verschillende energieën en baangolffuncties ψ_S en ψ_A verkeren die corresponderen met dezelfde serie quantumgetallen a en b . Als $a = b$, dan is ψ_A nul en is alleen ψ_S mogelijk.

Met betrekking tot de spin van de elektronen geldt dat deze parallel of antiparallel met kunnen lopen, hetgeen een totale spin 1 of nul geeft. Spintoestanden met $S = 0$ kunnen op slechts 1 manier gevormd worden en vormen *singuletoestanden*, en die met $S = 1$ op 3 manieren corresponderend met $M_S = 1, 0, -1$ en vormen *triplettoestanden*.



De totale spingolfunctie χ_A van de $S = 0$ -toestand is antisymmetrisch t.o.v. de 2 elektronen, en de 3 totale spingolfuncties χ_S van de $S = 1$ -toestand zijn symmetrisch. Als χ_+ en χ_- de spingolfuncties zijn voor 1 elektron, dan geldt:

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

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

Voor de totale golfunctie ψ_t van een 2-elektron atoom geldt nu dat deze altijd antisymmetrisch is, daar deze steeds het produkt is van een symmetrische- en een antisymmetrische factor:

$$\begin{cases} \psi_t = \psi_S \chi_A \text{ voor singuleettoestanden} \\ \psi_t = \psi_A \chi_S \text{ voor triplettoestanden} \end{cases}$$

Voor een willekeurig aantal elektronen geldt dat de totale golfunctie antisymmetrisch moet zijn t.o.v. verwisseling van de coördinaten van elk paar elektronen.

Een speciaal geval hiervan is het zgn. **Uitsluitingsprincipe van Pauli**:

Geen 2 elektronen in een atoom kunnen dezelfde reeks quantumgetallen bezitten.

Voor een atoom met N elektronen kan de totale antisymmetrische golfunctie $\psi_{abc\dots}$ geschreven worden als:

$$\psi_{abc\dots} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_a(2) & \dots \\ \psi_b(1) & \psi_b(2) & \dots \\ \psi_c(1) & \psi_c(2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \end{vmatrix}$$

Hierin is $1/\sqrt{N!}$ een normeringsfactor en stalen a, b, c, \dots de 4 quantumgetallen van een elektron voor. Daar bij verwisseling van 2 elektronen 2 kolommen verwisseld worden, verandert

de determinant van teken, d.w.z. $\psi_{abc\dots}$ is antisymmetrisch. Als 2 elektronen dezelfde serie quantumgetallen bezitten, dan heeft de determinant 2 identieke rijen en is dan dus nul.

Daar er voor elke waarde van l er $2l + 1$ waarden van m zijn, en voor elk paar (l, m) een elektron een spin op of neer kan hebben ($m_s = \pm \frac{1}{2}$), is het max. aantal elektronen dat i.v.m. het uitsluitingsprincipe in de toestand nl kan verkeren gelijk aan $2(2l + 1)$. Hierbij geldt de **Regel van Hund**: De resulterende spin van de grondtoestand van atomen heeft de grootst mogelijke waarde die verenigbaar is met het Uitsluitingsprincipe.

Dit komt omdat de grondtoestand zodanig is dat de afstotingsenergie van de elektronen min. is, zodat de baan golf functie max. antisymmetrisch is. Daar de totale golf functie antisymmetrisch is correspondeert de grondtoestand dus met een max. symmetrische spingolf functie, dewelke optreedt als de spin van de elektronen zoveel mogelijk parallel staat.

Voor het totale impulsmoment \vec{J} van atomen met meerdere elektronen geldt:

$$\vec{J}^2 = J(J + 1)\hbar^2$$

Voor de Z -component van \vec{J} geldt:

$$J_z = M\hbar \mid M = \pm J, \pm(J - 1), \dots, 0$$

Voor niet te grote waarden van Z is het totale impulsmoment van een elektronenconfiguratie te bepalen d.m.v. de **Russel-Saunders-koppeling** ofwel **LS-koppeling**.

Voor het totale baanimpulsmoment geldt: $\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i$ met $L_z = \sum_i L_{zi}$

Als L en M_L de bijbehorende quantumgetallen zijn van \vec{L}^2 en L_z , dan geldt:

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= L(L + 1)\hbar^2 \\ L_z &= M_L\hbar \mid M_L = \pm L, \pm(L - 1), \dots, 0 \end{aligned}$$

Met een gegeven configuratie kunnen verschillende waarden van L corresponderen, afhankelijk van de relatieve oriëntatie van de \vec{L}_i 's.

Analoog geldt voor het totale spinimpulsmoment: $\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i$, met $S_z = \sum_i S_{zi}$

Als S en M_S de bijbehoren de quantumgetallen zijn van \vec{S}^2 en S_z , dan geldt:

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 &= S(S + 1)\hbar^2 \\ S_z &= M_S\hbar \mid M_S = \pm S, \pm(S - 1), \dots, 0 \end{aligned}$$

Met een gegeven configuratie kunnen weer verschillende waarden van S corresponderen, afhankelijk van de relatieve oriëntatie van de \vec{S}_i 's.

Het totale impulsmoment van een bepaalde configuratie volgt dan uit: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Hierbij geldt voor J : $J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$

Molekulfysica

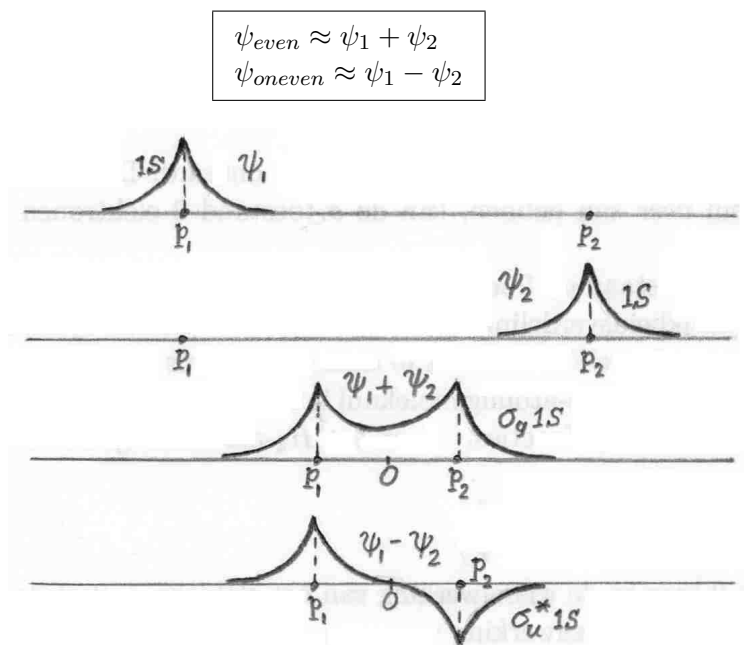
Als een aantal atomen zich tot een molecuul verbinden, dan blijven de binnenste elektronen vrijwel ongestoord en bij hun oorspronkelijke kern. Alleen de buitenste- en valentie-elektronen gaan bewegen o.i.v. de resulterende krachten van de ionen en de onderlinge afstoting tussen de elektronen.

Het eenvoudigste molecuul is het waterstofmolekuulion H_2^+ dat bestaat uit 2 protonen en 1 elektron. Voor de potentiële energie geldt:

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r} \right)$$

Hierin vormen de 1-ste 2 termen de potentiële energie tussen het elektron en de protonen en de laatste term vormt de potentiële energie tussen de protonen.

Als het elektron zich oorspronkelijk om één van de 2 protonen beweegt en het andere proton bevindt zich op relatief grote afstand, dan is de golf functie van het elektron ongeveer gelijk aan de 1s-functie van het waterstofatoom. Als de 2 protonen elkaar naderen en er een H_2^+ molecuul gevormd is, dan wordt de **moleculaire golf functie** bij benadering gevormd door een lineaire combinatie van de waterstofatoom golf functies ψ_1 en ψ_2 , corresponderend met een elektron dat om één van de 2 protonen beweegt. Hierbij zijn er 2 mogelijkheden, t.w. een even - en een oneven golf functie (t.o.v. het middelpunt van het molecuul):

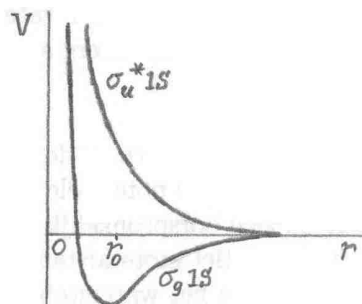


De toestanden die bij deze golf functies horen hebben een verschillende energie, nl. de $\sigma_g 1s$ toestand corresponderend met ψ_{even} heeft een lagere energie dan de $\sigma_u^* 1s$ toestand corresponderend met ψ_{oneven} . Dit komt omdat $\psi_{\text{oneven}} \ll \psi_{\text{even}}$ in het gebied tussen de 2 protonen. Als het elektron zich tussen de protonen bevindt, dan trekt het deze naar elkaar toe, terwijl als het zich buiten dit gebied bevindt het de protonen verder van elkaar tracht te verwijderen. Een stabiele configuratie ontstaat dus als het elektron zich tussen de protonen bevindt.

Het energieverval tussen de $\sigma_g 1s$ - en $\sigma_u^* 1s$ toestand hangt af van de afstand tussen de protonen. Daar de neg. aantrekkende potentiële energie van het elektron groter is dan de

pos. afstotende energie tussen de protonen in de $\sigma_g 1s$ toestand, neemt de totale energie af als de afstand r tussen de protonen afneemt. In de $\sigma_u^* 1s$ toestand daarentegen neemt de totale energie toe als r afneemt. Als r kleiner wordt dan een bepaalde afstand r_0 , dan is echter ook in de $\sigma_g 1s$ toestand de afstotende potentiële energie tussen de protonen groter dan de aantrekkende energie van het elektron en neemt de totale energie toe als r afneemt.

De potentiaalkromme voor de $\sigma_g 1s$ toestand heeft een min. bij $r = r_0$ corresponderend met de evenwichtsafstand van de 2 protonen, hetgeen tot een stabiele configuratie leidt. Dit i.t.t. de potentiaalkromme voor de $\sigma_u^* 1s$ toestand, die geen min. heeft en dus niet tot een stabiele configuratie kan leiden. De functie ψ_{even} heet daarom een *bindende* golf functie, terwijl ψ_{oneven} een *niet-bindende* golf functie is.



Bij een 2-atomig molecuul bewegen de elektronen niet in een centraal krachtveld en is het impulsmoment \vec{L} van een elektron dus niet constant. Als de verbindingslijn tussen de 2 kernen langs de Z -as ligt, dan snijdt de resulterende kracht op een elektron steeds de Z -as. Het koppel op het elektron t.o.v. het midden O van de verbindingslijn van de kernen staat dan loodrecht op de Z -as, zodat \vec{L} dus constant is, met $L_z = m\hbar \mid m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. De toestand van het elektron wordt dan bepaald door $\lambda = |m|$:

$m:$	0	± 1	± 2	± 3	\dots
$\lambda:$	0	1	2	3	\dots
toestand:	σ	π	δ	ϕ	\dots

Elke impulsmoment toestand - m.u.v. σ - is dus 2-voudig ontaard. Daar het elektron in elke toestand spin op of spin neer kan hebben, kan de σ -toestand 2 elektronen bevatten en de overige toestanden 4.

Homonucleaire molekulen bestaan uit 2 identieke kernen; deze hebben een symmetriecentrum O waarbij de waarschijnlijkheidsverdeling van een elektron in punten symmetrisch t.o.v. O gelijk is. De golf functie van het elektron moet in deze punten dus gelijk of tegengesteld zijn. De moleculaire golf functie van een 2-atomig molecuul is bij benadering een lineaire combinatie van de afzonderlijke atomaire golf functies. Voor het H_2 -molecuul geldt voor de potentiële energie:

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_1'} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_2'} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r} \right)$$

Hierin vormen de 1-ste 2 termen de wisselwerking van het elektron e_1 met de protonen p_1 en p_2 , de 3-de en 4-de term de wisselwerking van e_2 met p_1 en p_2 , de 5-de term de afstoting tussen e_1 en e_2 en de laatste term de afstoting tussen p_1 en p_2 .

De 2 elektronen bevinden zich in de $\sigma_g 1s$ toestand met tegengestelde spin en vormen de stabiele configuratie $(\sigma_g 1s)^2$. Als de elektronen dezelfde spin bezitten, dan bevindt 1 elektron zich in de $\sigma_g 1s$ toestand en de andere in de $\sigma_u^* 1s$ toestand en vormen zo de $(\sigma_g 1s)(\sigma_u^* 1s)$ toestand. Deze is instabiel, daar de $\sigma_u^* 1s$ toestand domineert.

Het He_2^+ -molecuul heeft 3 elektronen met als stabiele configuratie $(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u^* 1s)$. Dit i.t.t. het H_2^- -molecuul waarvan de kernlading te klein is om tot een stabiele configuratie te leiden. Het He_2 -molecuul heeft 2 elektronen in de bindende toestand $\sigma_g 1s$ en 2 in de niet-bindende toestand $\sigma_u^* 1s$. Dit leidt tot de configuratie $(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u^* 1s)^2$ die instabiel is, zodat helium een

1-atomig gas is. Een He_2 -molekuul is wel mogelijk als 1 van de σ_u^*1s -elektronen in de aangestlagen σ_g2s toestand overgaat, wat tot de stabiele configuratie $(\sigma_g1s)^2(\sigma_u^*1s)(\sigma_g2s)$ leidt. In het algemeen ontstaat er een moleculaire binding als 2 elektronen met tegengestelde spin zich concentreren in het gebied tussen de 2 atomen, d.w.z. als ze bindende moleculaire golf-functies hebben.

Bij *heteronucleaire* molekulen zijn de kernen verschillend, zodat de Coulombinteractie van elke kern met de elektronen verschillend is, waardoor het molekuul geen symmetrisch centrum meer heeft. De stabiele structuur die ontstaat als de 2 elektronen zich tussen de 2 atomen bevinden is nu niet meer symmetrisch. Het molekuul heeft dus een asymmetrische ladingsverdeling. d.w.z. is gepolariseerd. Een dergelijke binding heet **ionenbinding**, i.t.t. de binding bij homonucleaire molekulen die **covalente binding** heet. Daar de 2 kernen A en B niet identiek zijn, is de bindende moleculaire golffunctie van de vorm:

$$\psi = \psi_A + \lambda\psi_B$$

Hierin zijn ψ_A en ψ_B de atomaire golffuncties van de beide elektronen m.b.t. elke kern en is λ een parameter die experimenteel bepaald moet worden.

De **Morsepotentiaal** is een uitdrukking voor een gebonden toestand van een 2-atomig molekuul bij een gegeven elektronen configuratie:

$$V(r) = D \left[1 - \frac{1}{e^{a(r-r_0)}} \right]^2$$

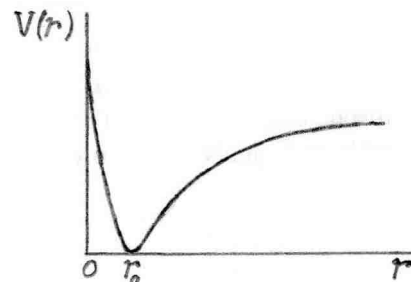
Hierin zijn D , a en r_0 constanten die afhangen van het soort molekuul.

Het min. van $V(r)$ volgt uit $\frac{dV}{dr} = 0$:

$$\frac{2Da}{e^{a(r-r_0)}} \left[1 - \frac{1}{e^{a(r-r_0)}} \right] = 0 \rightarrow \frac{1}{e^{a(r-r_0)}} = 1 \rightarrow$$

$$r = r_0 \rightarrow V(r_0) = 0$$

Tevens geldt dat $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = D$ en $\lim_{r \rightarrow 0} V(r) = D(1 - e^{ar_0})^2$.



De laatste limiet zou oneindig moeten zijn, hetgeen een tekortkoming van de Morsepotentiaal vormt.

De potentiële energie van een 2-atomig molekuul met ionenbinding is bij benadering van de empirische vorm:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{b}{r^9}$$

Hierin is de 1-ste term de Coulombaan-trekking tussen de ionen en de 2-de term de afstoting tussen de kernen en de gevulde elektronenschillen, die vanwege de r^{-9} -afhankelijkheid alleen op kleine afstand van belang is.

Het min. van $V(r)$ volgt uit $\frac{dV}{dr} = 0$: $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{9b}{r^{10}} = 0 \rightarrow b = \frac{e^2 r_0^8}{36\pi\epsilon_0}$

Substitutie van b in $V(r)$ geeft de *dissociatie-energie* D_s van het molecuul:

$$D_s = -\frac{8e^2}{36\pi\epsilon_0 r_0}$$

Bij een 2-atomig molecuul dat als een star lichaam wordt opgevat en waarvan de hoofdtraagheidsassen samenvallen met de verbindinglijn N_1N_2 van de 2 kernen en de lijn loodrecht op N_1N_2 gaande door het massamiddelpunt M van het molecuul, staat het totale impulsmoment \vec{L} van het molecuul bij rotatie om M loodrecht op N_1N_2 . Als $d(N_1N_2) = r_0$ en μ is de gereduceerde massa, dan is het traagheidsmoment I van het molecuul t.o.v. een as loodrecht op N_1N_2 door M gelijk aan $I = \mu r_0^2$. $\rightarrow E_r = L^2/2I$.

Substitutie van $L^2 = l(l+1)\hbar^2 \mid l \in \mathbb{N}$ geeft voor de rotatie-energie van een 2-atomig molecuul:

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) \mid l \in \mathbb{N}$$

Voor het energieverval tussen 2 rotatieniveaus corresponderend met l en $l+1$ geldt dan: $\Delta E_r = (\hbar^2/2I)[(l+1)(l+2) - l(l+1)] \rightarrow$

$$\Delta E_r = \frac{\hbar^2}{I}(l+1) \mid l \in \mathbb{N}$$

De kernen in een molecuul voeren t.o.v. elkaar een trillende beweging ofwel vibratie uit. De potentiële energie van een 2-atomig molecuul is bij benadering gelijk aan die van een harmonische oscillator. Als $\omega = \sqrt{k/\mu}$ de hoekfrequentie van de trilling is, dan geldt voor de vibratie-energieniveaus van een 2-atomig molecuul:

$$E_v = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \mid n \in \mathbb{N}$$

Voor de totale moleculaire energie van een 2-atomig molecuul geldt dan:

$$E = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \mid n, l \in \mathbb{N}$$

Als monochromatische straling met een frequentie ν op een stof valt waarvan de molekulen zich in de vibratietoestand v bevinden, dan kunnen deze in een aangeslagen toestand overgaan. Als deze toestand instabiel is, dan kunnen de molekulen terugvallen naar hun begin-toestand zodat straling met dezelfde frequentie wordt uitgezonden in de vorm van **Rayleigh-verstrooiing**. Als de molekulen naar een ander vibratieniveau vallen direct onder of boven het beginniveau, dan wordt straling uitgezonden met een frequentie $\nu + \nu_v$ of $\nu - \nu_v$ in de vorm van **Raman-verstrooiing**.

Bij een bepaalde elektronenconfiguratie hoen vele vibratietoestanden en met elke vibratietoestand corresponderen verschillende rotatietoestanden. Als E_e de elektronenenergie is van een 2-atomig molecuul in de grondtoestand, dan geldt bij benadering voor de total energie van het molecuul: $E = E_e + E_r + E_v$

De frequentie van de uitgezonden of geabsorbeerde straling is dan van de vorm:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \nu_e + \nu_r(l'', l') + \nu_v(v'', v')$$

Voor een bepaalde elektronenovergang ontstaat zo een serie banden, waarbij elke band correspondeert met een bepaalde waarde van v'' en v' en alle mogelijke waarden van l'' en l' .

Kernfysica

Een atoomkern is opgebouwd uit **nucleonen**, t.w. het **proton** en het **neutron**, die beide spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes zijn en door de sterke wisselwerking bijeen worden gehouden.

Het **atoomnummer** Z is het aantal protonen in de kern en het **massagetal** A het aantal nucleonen. Voor het aantal neutronen N geldt dan:

$$N = A - Z$$

Nucleiden zijn kernen met gelijke Z en N (en dus gelijke A). Bij lichte kernen is $N \approx Z$, bij zwaardere kernen is $N > Z$ om zo de Coulombkracht tussen de protonen te verminderen en de kern te stabiliseren.

Isotopen zijn nucleiden met dezelfde Z maar verschillende N en A . Alle isotopen met een bepaalde Z behoren tot hetzelfde chemische element.

Isotonen zijn nucleiden met dezelfde N maar verschillende Z en A .

Isobaren zijn nucleiden met dezelfde A maar verschillende Z en N .

De **atomaire massa-eenheid** u wordt gedefinieerd als het 1/12-deel van de massa van het atoom ^{12}C en is ongeveer gelijk aan $1,7 \cdot 10^{-27} \text{kg}$.

De **relatieve atoommassa** M van een element is de gemiddelde massa van de natuurlijke isotopen van dat element.

De **constante van Avogadro** N_A is het aantal atomen of moleculen in 1 mol van een stof. Daar 1 mol van een stof per definitie de massa van $10^{-3} M \text{kg}$ is, met M uitgedrukt in u , en de massa van 1 atoom ong. gelijk is aan $1,7 \cdot 10^{-27} M \text{kg}$, geldt:

$$N_A \approx \frac{10^{-3} M}{1,7 \cdot 10^{-27} M} \approx 6,0 \cdot 10^{23} / \text{mol}$$

Het aantal atomen in 1 mol is dus voor alle stoffen gelijk.

Experimenteel blijkt dat de kernstraal R_k ong. evenredig is met $A^{1/3}$ (met $r_0 \approx 1,3 \cdot 10^{-15} \text{m}$):

$$R_k \approx r_0 A^{1/3}$$

Voor bolvormige kernen geldt voor het volume bij benadering: $V_k = \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{4}{3} \pi r_0^3 A \rightarrow$

$$V_k \approx 10^{-44} A$$

Daar de massa van een kern ongeveer gelijk is aan $1,7 \cdot 10^{-27} A \text{kg}$, geldt voor de gemiddelde dichtheid:

$$\bar{\rho} = \frac{1,7 \cdot 10^{-27} A \text{kg}}{10^{-44} A \text{m}^3} \approx 1,7 \cdot 10^{17} \text{kg/m}^3$$

Het resulterende impulsmoment van een kern, de **kernspin** \vec{I} , is de som van het baanimpulsmoment en de spin van de nucleonen. Voor de grootte geldt:

$$I = \hbar \sqrt{I(I+1)}$$

De component van de kernspin in een gegeven richting is $m_I \hbar |m_I = \pm I, \pm(I-1), \dots, \pm \frac{1}{2}, 0$, hetgeen $2I + 1$ mogelijke oriëntaties van \vec{I} geeft.

Alle stabiele even-even kernen (N en Z even) hebben in de grondtoestand $\vec{I} = 0$, daar gelijke nucleonen hun impulsmomenten in tegengestelde richting trachten te paren. Dit heet het **paringseffect**.

Alle even-oneven kernen (N of Z oneven) hebben halftallige impulsmomenten en wordt de kernspin i.h.a. geleverd door het totale impulsmoment van het laatste ongepaarde nucleon. Alle oneven-oneven kernen (N en Z oneven) hebben 2 ongepaarde nucleonen (een proton en een neutron) en hebben een heeltallige spin, daar het totaal aantal nucleonen even is.

Voor het resulterende magnetisch dipoolmoment \vec{M} van een kern geldt:

$$\vec{M} = \frac{g_I e}{2m_p} \vec{I}$$

Hierin is g_I de **kerngyromagnetische** verhouding.

Voor de component van \vec{M} in een gegeven richting geldt: $M_z = \frac{g_I e I_z}{2m_p} = \frac{g_I e m_I \hbar}{2m_p} = \mu_N g_I m_I$

Hierin is $\mu_N \approx 5 \cdot 10^{-27} \text{ J/T}$ het **kernmagneton** waarvoor geldt:

$$\mu_N = \frac{e \hbar}{2m_p}$$

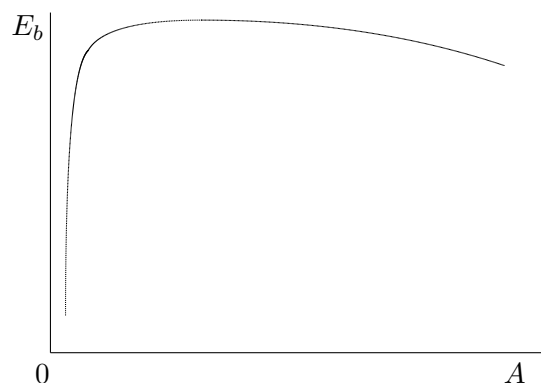
Voor een proton en neutron in rust op grote onderlinge afstand geldt dat hun totale energie gelijk is aan de som van hun rustmassa's: $E = (m_p + m_n)c^2$

Als de onderlinge afstand klein genoeg is om een deuteriumkern te vormen en daarbij om hun mmp draaien, dan geldt: $E = (m_p + m_n)c^2 + V + T$

Daar de kernkracht aantrekkend is en $V_\infty = 0$, is $V < 0$; daar de deuteriumkern stabiel is, is dus $|V| > T \rightarrow V + T < 0 \rightarrow E' < E \rightarrow$ er komt energie vrij als een proton en een neutron tot een deuteriumkern fuseren. De vrijkomende energie heet de **bindingsenergie** E_b .

De gemiddelde bindingsenergie per nucleon is een maat voor de stabiliteit van de kern, waarbij er een max. is rond $A = 60$. Bij fusie van 2 lichte kernen en splijting van 2 zware kernen komt dus energie vrij.

Voor $A > 10$ is de bindingsenergie per nucleon ongeveer constant, hetgeen betekent dat elk nucleon alleen met de nucleonen rondom zich in wisselwerking treedt, onafhankelijk van het totaal aantal nucleonen; dit verschijnsel heet **kernkrachtverzadiging**.



Een empirische formule voor de bindingsenergie van een kern wordt gegeven door de **Formule van Weizsäcker**:

$$E_b = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 Z^2 A^{-1/3} - a_4 (N - Z)^2 A^{-1} - \delta$$

Hierin is $\delta = a_5 A^{-3/4}$ voor even-even kernen, $\delta = 0$ voor even-oneven kernen en $\delta = -a_5 A^{-3/4}$ voor oneven-oneven kernen, en geldt voor de overige constanten $a_1 \approx 16$, $a_2 \approx 18$, $a_3 \approx 1$, $a_4 \approx 24$ en $a_5 \approx 34$.

De kernkracht die de atoomkern bijeenhoudt heeft een zeer korte dracht, t.w. ong. 10^{-15} m. Op grotere afstand overheerst de Coulombafstoting. Tevens is de kernkracht onafhankelijk van de elektrische lading; protonen en neutronen kunnen daarom m.b.t. de kernkracht als equivalente deeltjes worden opgevat. De kernkracht hangt wel af van de relatieve oriëntatie van de spins van de nucleonen, en is ook niet volledig centraal, daar het baanimpulsmoment van de nucleonen niet constant is t.o.v. hun mmp. Tevens heeft hij een afstotend centrum, d.w.z. op uiterst kleine afstanden wordt hij afstotend.

De kernkracht volgt uit een scalarveld voor spin-nul mesonen:

$$\left(\nabla^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \Psi = 0$$

Substitutie van $\Psi(r, t) = \Phi(r)T(t)$ geeft:

$$\Phi(r) = \frac{g}{r} e^{-\frac{mc}{\hbar} r}$$

Experimenteel blijkt dat mc/\hbar overeenkomt met de massa van pionen. De interactie tussen 2 protonen of 2 neutronen vindt dan plaats d.m.v. uitwisseling van een π^0 -meson en die tussen een proton en een neutron d.m.v. een π^\pm -meson.

Een atoomkern kan net als een atoom in een grondtoestand en in aangeslagen toestanden voorkomen. Hierbij vertonen de verschillende kernniveaus ook een schillenstructuur en wel een dubbele, nl. één voor protonen en één voor neutronen.

Magische getallen zijn die waarden van Z of N die gelijk zijn aan 2,8,20,28,50,82 en 126. Bij deze waarden zijn de kernen bijzonder stabiel - overeenkomend met gevulde schillen - en hebben zeer een grote eerste aanslagenergie. De magische getallen ontstaan doordat er in de kern naast de gemiddelde centrale kracht (elk nucleon kan worden opgevat als bewegend in een gemiddeld krachtveld dat door de andere nucleonen wordt opgewekt) ook een sterke **spin-baanwisselwerking** optreedt die evenredig is met $\vec{L} \cdot \vec{S}$. Daar \vec{S} parallel of antiparallel met \vec{L} kan zijn, wordt elk (n, l) -kernniveau (met n het hoofdquantumgetal en l het baanimpulsmomentquantumgetal) in 2 niveaus gesplitst, zodat elk niveau beschreven wordt door (n, l, j) met $j = l \pm \frac{1}{2}$. De energiesprongen bij de magische getallen ontstaan nu als een volgende hogere waarde van l optreedt, waardoor een grote spin-baansplitsing optreedt.

Een atoomkern kan in verschillende trillingstoestanden verkeren waarbij de kern i.p.v. een bolvorm een ellipsoïdale vorm heeft. Hierbij draaien de deformatie-assen in de ruimte (echter, niet de nucleonen). Daar de bijbehorende rotatie-energie gequantiseerd is, heeft de gedeformeerde kern verschillende rotatie-energieniveaus. Tevens kunnen er verscheidene aangeslagen vibratietoestanden optreden die een constant energieverval hebben van $\hbar\omega$, met ω de hoekfrequentie van de vibratie.

Een aangeslagen kern kan door uitzending van elektromagnetische straling weer naar de grondtoestand terugkeren. Hierbij vinden, i.t.t. atomen en molekulen waar alleen elektrische dipoolovergangen van belang zijn, vaak hogere orde elektrische - en magnetische multipoolovergangen plaats.

Een **isomeer** is een kern in een aangeslagen toestand met een vrij lange levensduur.

Instabiele kernen kunnen d.m.v. radioactieve straling naar een stabielere kern overgaan. Dit

kan via α -straling (${}^4_2\text{He}$ -kernen), β -straling (elektronen of positronen) en γ -straling. En zijn 3 natuurlijke radioactieve reeksen, t.w. de **uraniumreeks**, de **actiniumreeks** en de **thoriumreeks**.

Experimenteel blijkt dat als N_0 het aanvankelijk aantal instabiele kernen is, er na een tijd t gemiddeld nog N over zijn waarvoor geldt:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

Hierin is λ de **desintegratieconstante** is s^{-1} en hangt af van het soort nucleide.

De **halveringstijd** τ is de tijdsduur waarin N_0 tot de helft gereduceerd is.

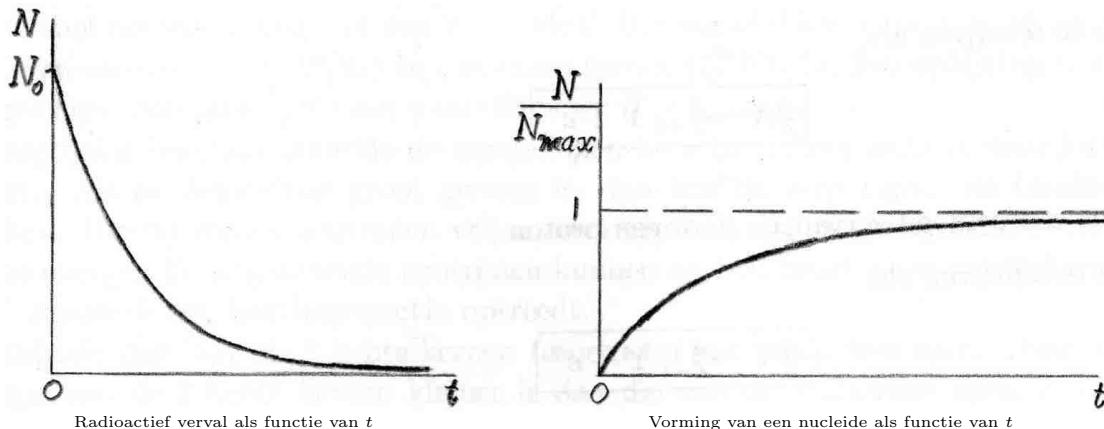
Stel: $N = \frac{1}{2}N_0$ en $t = \tau \rightarrow \frac{1}{2}N_0 = N_0 e^{-\lambda\tau} \Leftrightarrow e^{\lambda\tau} = 2 \rightarrow$

$$\tau = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

Uit $\frac{dN}{dt} = -\lambda N_0 e^{-\lambda t}$ volgt:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N$$

De **activiteit** van een stof wordt gedefinieerd als $|dN/dt|$ en wordt uitgedrukt in **curie**.



Als een radioactieve nucleide met een snelheid van g kernen per sec. gevormd wordt en tegelijkertijd desintegreert met een snelheid van λN kernen per sec., dan geldt voor het netto aantal gevormde kernen per sec.: $\frac{dN}{dt} = g - \lambda N \rightarrow \ln\left(N - \frac{g}{\lambda}\right) = -\lambda t + C$

Stel: $t = 0 \Rightarrow N = 0 \rightarrow \ln\left(-\frac{g}{\lambda}\right) = C \rightarrow \ln\left(N - \frac{g}{\lambda}\right) - \ln\left(-\frac{g}{\lambda}\right) = -\lambda t \rightarrow$

$$N = \frac{g}{\lambda}(1 - e^{-\lambda t})$$

Als een radioactieve nucleide A met $\lambda = \lambda_A$ in een radioactieve nucleide B met $\lambda = \lambda_B$ vervalt, dan geldt: $\frac{dN_A}{dt} = -\lambda_A N_A \rightarrow N_A = N_{A,0} e^{-\lambda_A t} \rightarrow$

Er worden $\lambda_A N_A$ kernen per sec. van B gevormd, die echter met een snelheid $\lambda_B N_B$ kernen

per sec. vervallen. Voor het netto aantal gevormde kernen van B geldt dus:

$$\frac{dN_B}{dt} = \lambda_A N_A - \lambda_B N_B = \lambda_A N_{A,0} e^{-\lambda_A t} - \lambda_B N_B$$

De oplossing van de bijbehorende homogene DV is: $N_B = R e^{-\lambda_B t}$

Substitutie van $N_B = R(t) e^{-\lambda_B t}$ en $\frac{dN_B}{dt} = R'(t) e^{-\lambda_B t} - \lambda_B R(t) e^{-\lambda_B t}$ in de inhomogene DV

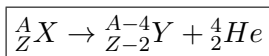
$$\text{geeft: } R(t) = \frac{\lambda_A N_{A,0}}{\lambda_B - \lambda_A} e^{(\lambda_B - \lambda_A)t} + K \rightarrow N_B = \frac{\lambda_A N_{A,0}}{\lambda_B - \lambda_A} [e^{(\lambda_B - \lambda_A)t} + K]$$

Stel: $t = 0 \rightarrow N_B = 0 \rightarrow K = -1 \rightarrow$

$$N_B = \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A} N_{A,0} (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t})$$

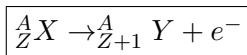
Als B in een stabiele nucleide C vervalt, dan zal na verloop van tijd het aantal kernen van C naar $N_{A,0}$ naderen.

Het α -verval is te schrijven als:



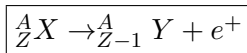
Daar de energie van een α -deeltje in een kern kleiner is dan de hoogte van de Coulombbarrière, kan het alleen aan de kern ontsnappen d.m.v. het tunneleffect.

Het β^- -verval is te schrijven als:



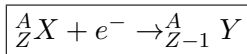
Hierbij wordt dus een neutron vervangen door een proton.

Het β^+ -verval is te schrijven als:



Hierbij wordt dus een proton vervangen door een neutron.

Dit is ook mogelijk d.m.v. **elektronvangst**, waarbij een s -elektron door de kern wordt ingevangen:



Hierna volgt γ -straling van de dochterkern, daar een buitenelektron de opengevallen plaats van het s -elektron opvult.

Bij het β -verval en elektronvangst wordt er tevens nog een (anti)neutrino uitgezonden dat energie en impuls draagt.

Bij een **kernreactie** treedt een wisselwerking tussen 2 kernen op waardoor een hergroepering van de nucleonen ontstaat. Bij een lage botsingsenergie van de inkomende kern m_i (i.h.a. een proton, neutron, α -deeltje of deutron) wordt eerst een tussenkern gevormd, waarna deze naar de grondtoestand terugkeert onder uitzending van de inkomende kern of op een andere wijze. Bij een **stripreactie** wordt geen tussenkern gevormd.

Bij *verstrooiing* zijn de inkomende- en uitgaande kern hetzelfde. Bij een *elastische* verstrooiing blijft de doelkern M_i in dezelfde toestand achter, bij een *onelastische* verstrooiing in een

andere toestand.

Voor de energie Q van een kernreactie $M_i + m_i \rightarrow M_f + m_f$ geldt:

$$Q = [(M_i + m_i) - (M_f + m_f)]c^2$$

Voor $Q < 0$ moet $T_{m_i} > T_{min}$ om de reactie mogelijk te maken. Uit het energiebehoud volgt:

$$T_{min} = -Q + T_{mmp(m_i+M_i)} = -Q + \frac{1}{2}(m_i + M_i) \frac{m_i v_i^2}{(m_i + M_i)^2} = -Q + \frac{1}{2} m_i v_i^2 \frac{m_i}{m_i + M_i}$$

$$T_{min} = -Q + T_{min} \frac{m_i}{m_i + M_i} \rightarrow$$

$$T_{min} = -Q \left(1 + \frac{m_i}{M_i}\right)$$

Kernsplijting ontstaat als een kern door neutronvangst in een aangeslagen toestand raakt en daarbij boven de drempelenergie komt. Bij vangst van een thermisch (=langzaam) neutron is de bindingsenergie van het neutron al voldoende om bv. ${}_{92}^{235}\text{U}$ te splijten. Om ${}_{92}^{238}\text{U}$ te splijten is een snel neutron nodig met een $T \approx 1\text{MeV}$. Het verschil komt voort uit de paringsenergie van de even-oneven kernen (${}_{92}^{235}\text{U}$) en even-even kernen (${}_{92}^{238}\text{U}$). Bij **fotosplijting** wordt een kern aangeslagen door absorptie van γ -straling met $E \geq E_{drempel}$.

Kernsplijting ontstaat doordat de aangeslagen kern in trilling raakt waardoor hij deformeert. Als de deformatie groot genoeg is, dan kan de kern t.g.v. de Coulombafstoting splijten. Hierbij komen neutronen vrij en verkrijgen de splijtingsfragmenten een grote kinetische energie. De vrijgekomen neutronen kunnen op hun beurt weer andere kernen splijten, enz. waardoor een **kettingreactie** ontstaat.

Kernfusie treedt op als 2 lichte kernen fuseren tot een zwaardere kern. Daar de bindingsenergie van de 2 lichte kernen kleiner is dan die van de gefuseerde kern, komt er energie vrij.

Elementaire deeltjes

Alle materie en straling is opgebouwd uit **elementaire deeltjes**. Deze zijn te verdelen in **fermionen**, half-tallige spindeeltjes die de Fermi-Dirac statistiek volgen en de materie vormen, en **bosonen**, heeltallige spindeeltjes die de Bose-Einstein statistiek volgen en de velddeeltjes vormen die de kracht tussen de fermionen dragen. De fermionen bestaan uit de **baryonen** en **leptonen**, waarbij de baryonen opgebouwd zijn uit **3 quarks**. De **hadronen** bestaan uit de baryonen en de **mesonen**, waarbij de mesonen zijn opgebouwd uit een quark en een antiquark.

<i>m</i> in MeV (gemid.)	Fermionen		Bosonen
	Baryonen	Leptonen	
93.000			Z^0
83.000			W^-W^+
	Hyperonen		
1672	$\Omega^-\Omega^+$		
1320	$\Theta^-\Theta^0\Theta^+$		
1190	$\Sigma^-\Sigma^0\Sigma^+$		
1115	Λ		
	Nucleonen		
939	n		
938	p		
			Mesonen
549			η^0
495			$K^-K^0K^+$
137			$\pi^-\pi^0\pi^+$
106		$\mu^-\mu^+$	
0.511		e^-e^+	
0		$\nu_e\nu_\mu\nu_\tau$	γ

Voor de verhouding van de krachten tussen de deeltjes geldt:
sterk : elektromagnetisch : zwak : gravitatie = $1 : 10^{-2} : 10^{-7} : 10^{-38}$

Alle fermionen voelen de zwakke- en elektromagnetische kracht; alleen de quarks voelen de sterke wisselwerking.

De wisselwerking tussen elementaire deeltjes wordt opgewekt door de **lading** die de deeltjes bezitten.

Een **veld** geeft de sterkte en vorm weer van de invloed die de lading van een deeltje op de omringende ruimte uitoefent. Hierbij kan aan elk punt $P(ct, x, y, z) = x^\mu$ een "object" worden gekoppeld: een scalar geeft een scalarveld $\phi(x^\mu)$, een viervector geeft een vectorveld A^α en een tensor geeft een tensorveld $T_{\alpha\beta}$.

De **veldsterkte** wordt bepaald door de ladingsverdeling over de ruimte en de veldvergelijkingen die de sterkte van de invloed van de ladingen beschrijven.

De **kracht** die een deeltje ondervindt wordt dan gegeven door:

$$\boxed{\text{kracht} = \text{veldsterkte} \times \text{lading}}$$

Daar velden tevens deeltjeseigenschappen bezitten vervaagt het onderscheid tussen deeltjes en hun wisselwerking in de quantumveldentheorie.

De potentiaal $V(r)$ behorende bij een kracht waarvan het ijkboson, de drager van de kracht, geen rustmassa heeft, is van de vorm:

$$V(r) = \frac{g}{r}$$

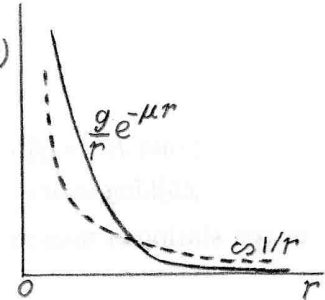
Hierin is g de lading die de potentiaal opwekt. Een dergelijke kracht heeft een oneindige rijkwijdte.

Als de rustmassa $m_0 \neq 0$, dan geldt voor de kracht bij benadering:

$$\lambda \approx \frac{\hbar}{m_0 c} = \frac{\hbar c}{E_0} \quad \left| \quad E_0 = m_0 c^2 \right.$$

Klassiek geldt dan de **Yukawapotentiaal**:

$$V(r) = \frac{g}{r} e^{-\mu r}$$



Hierin is $\mu = 1/\lambda = m_0 c/\hbar$.

De potentiële (interactie)-energie tussen 2 deeltjes met lading g is dan:

$$E_{int} = gV(r) = \frac{g^2}{r} e^{-\mu r}$$

De **interactielengte** λ_{int} wordt gedefinieerd als:

$$\lambda_{int} = \frac{\hbar c}{E_{int}}$$

Er geldt nu:
$$\frac{r}{\lambda_{int}} = \frac{E_{int} r}{\hbar c} = \frac{g^2}{\hbar c} e^{-\mu r}$$

Hierin is de dimensieloze grootheid $g^2/\hbar c$ de **koppelingsconstante** die een maat voor de sterkte van de kracht is.

Voor relativistische deeltjes geldt: $E \approx pc \rightarrow \Delta p \approx p \approx E/c$; substitutie in $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ geeft:

$$\Delta x \geq \frac{\hbar c}{E}$$

Voor een relativistisch vrij deeltje geldt: $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$

Substitutie van $E \rightarrow i\hbar(\partial/\partial t)$ en $p \rightarrow -i\hbar\nabla$, met $\Psi(r, t)$ de golf functie van het deeltje, geeft de relativistische energievergelijking voor een vrij deeltje:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \Psi + m_0^2 c^4 \Psi \rightarrow$$

Klein-Gordonvergelijking:

$$\nabla^2 \Psi - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \Psi = \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

Voor een foton is $m_0 = 0$ en gaat de KG vergelijking over in de golfvergelijking.

Door de aanwezigheid van de factor $\partial^2 \Psi / \partial t^2$ kan de KG vergelijking wel bosonen maar geen fermionen beschrijven.

Een **massief scalarveld** wordt beschreven door de veldvergelijking:

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \mu^2 \phi = 0$$

Substitutie van $\phi(x, y, z, t) = \phi_0 e^{ik_x x + ik_y y + ik_z z - i\omega t}$ | $\phi_0 \in \mathbb{C}$ geeft:
 $[(\omega/c)^2 - (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \mu^2] \phi = 0$; als $\phi \neq 0$, dan volgt hieruit:

$$\omega^2 = c^2 |\vec{k}|^2 + c^2 \mu^2$$

Vergelijking met $E^2 = |\vec{p}|^2 c^2 + m^2 c^4$ geeft $E = \hbar \omega$ en $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ en $m = \hbar \mu / c \rightarrow$
 De veldvergelijking voor ϕ hoort dus bij massieve (spin nul) deeltjes met massa $\hbar \mu / c$.

Voor een stationair massief scalarveld met een puntlading in de oorsprong geldt:

$$\nabla^2 \phi = \mu^2 \phi$$

Bij overgang op bolcoördinaten is dit te schrijven als: $\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = \mu^2 \phi$ | $r \neq 0 \rightarrow$

$$\phi(r) = \frac{C}{r} e^{-\mu r}$$

In de relativistische formulering van de Schrödingervergelijking voor vrije spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes is H de energie-operator die correspondeert met de energie in $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$. Omdat $E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$, moet H een lineaire combinatie zijn van \vec{p} en m_0 , d.w.z.:

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \beta m_0 c) = c[(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) + \beta m_0 c]$$

Kwadratering van beide leden van deze gelijkheid en vergelijking geeft:

$$\begin{cases} \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \beta^2 = 1 \\ \alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1 = 0 \wedge \alpha_1 \beta + \beta \alpha_1 = 0 \\ \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2 = 0 \wedge \alpha_2 \beta + \beta \alpha_2 = 0 \\ \alpha_3 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_3 = 0 \wedge \alpha_3 \beta + \beta \alpha_3 = 0 \end{cases}$$

De oplossingen zijn te schrijven als (4,4)-matrices:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \wedge \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \wedge \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \wedge$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

De **Pauli spinmatrices** σ_x , σ_y en σ_z worden gedefinieerd als:

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

Stel: $\vec{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ en $\vec{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow$

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \vec{0} & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & \vec{0} \end{pmatrix} \wedge \beta = \begin{pmatrix} \vec{I} & \vec{0} \\ \vec{0} & -\vec{I} \end{pmatrix}$$

De Schrödingervergelijking $H\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$ is nu te schrijven als:

$$c[(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) + \beta m_0 c] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

Substitutie van $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ geeft de **Diracvergelijking**:

$$c[-i\hbar\alpha \cdot \nabla + \beta m_0 c] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

Daar $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ en β (4,4)-matrices zijn, is $\Psi(\vec{r})$ een viercomponent golf functie, een zgn. **spinor**. De Diracvergelijking is nu te schrijven als:

$$\left[-i\hbar c \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar c \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} - i\hbar c \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} m_0 c^2 \right] \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}) \\ \Psi_2(\vec{r}) \\ \Psi_3(\vec{r}) \\ \Psi_4(\vec{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}) \\ \Psi_2(\vec{r}) \\ \Psi_3(\vec{r}) \\ \Psi_4(\vec{r}) \end{pmatrix} \rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -i\hbar c \frac{\partial \Psi_4}{\partial x} - \hbar c \frac{\partial \Psi_4}{\partial y} - i\hbar c \frac{\partial \Psi_3}{\partial z} + m_0 c^2 \Psi_1 = E \Psi_1 \\ -i\hbar c \frac{\partial \Psi_3}{\partial x} + \hbar c \frac{\partial \Psi_3}{\partial y} + i\hbar c \frac{\partial \Psi_4}{\partial z} + m_0 c^2 \Psi_2 = E \Psi_2 \\ -i\hbar c \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} - \hbar c \frac{\partial \Psi_2}{\partial y} - i\hbar c \frac{\partial \Psi_1}{\partial z} - m_0 c^2 \Psi_3 = E \Psi_3 \\ -i\hbar c \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} + \hbar c \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} + i\hbar c \frac{\partial \Psi_2}{\partial z} - m_0 c^2 \Psi_4 = E \Psi_4 \end{array} \right. \rightarrow$$

$$\begin{aligned} (E - m_0 c^2) \Psi_1 + i\hbar c \frac{\partial \Psi_3}{\partial z} + i\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_4 &= 0 \\ (E - m_0 c^2) \Psi_2 + i\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_3 - i\hbar c \frac{\partial \Psi_4}{\partial z} &= 0 \\ i\hbar c \frac{\partial \Psi_1}{\partial z} + i\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_2 + (E + m_0 c^2) \Psi_3 &= 0 \\ i\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi_1 - i\hbar c \frac{\partial \Psi_2}{\partial z} + (E + m_0 c^2) \Psi_4 &= 0 \end{aligned}$$

$$i\hbar \frac{\partial L_z}{\partial t} = L_z H - H L_z = (x p_y - y p_x) (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2) - (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2) (x p_y - y p_x) \Leftrightarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial L_z}{\partial t} = -c\hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \right) -$$

$$c\hbar^2 \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \Leftrightarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial L_z}{\partial t} = -c\hbar^2 \left(\alpha_2 \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1 \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar c(\alpha_2 p_x - \alpha_1 p_y) \neq 0 \rightarrow$$

L_z is geen bewegingsconstante in de relativistische Diracvergelijking.

$$i\hbar \frac{\partial (\frac{1}{2}\hbar\sigma_z)}{\partial t} = \frac{1}{2}\sigma_z H - H \frac{1}{2}\sigma_z = c\hbar^2 \left(\alpha_2 \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1 \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar c(\alpha_2 p_x - \alpha_1 p_y) \neq 0 \rightarrow$$

$$i\hbar \left(L_z + \frac{1}{2}\hbar\sigma_z \right) = (L_z + \frac{1}{2}\hbar\sigma_z)H - H(L_z + \frac{1}{2}\hbar\sigma_z) = 0 \rightarrow$$

In de relativistische mechanica is $L_z + \frac{1}{2}\hbar\sigma_z$ een bewegingsconstante. Dit geldt ook voor de y - en z -componenten, zodat algemeen $\vec{L} + \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ een bewegingsconstante is. De grootheid $\frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ is de intrinsieke spin van het deeltje, met als grootte $\frac{1}{2}\hbar$.

Stel: $\hbar = c = 1 \rightarrow 6,6 \cdot 10^{-25} \text{GeV s} = 1 \wedge 2,0 \cdot 10^{-16} \text{GeV m} = 1 \rightarrow$

Als de energie in GeV wordt uitgedrukt, dan is de eenheid van tijd $6,6 \cdot 10^{-25} \text{s}$ en de eenheid van lengte $2,0 \cdot 10^{-16} \text{m}$. De energie-impulsvergelijking is nu te schrijven als $E^2 = p^2 + m^2$

Stel: $\mu_0 = \epsilon_0 = 1 \rightarrow$ fijnstructuurconstante $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar v \epsilon_0} = \frac{e^2}{4\pi} \approx \frac{1}{137}$

$$\vec{x} \cdot \vec{p} = x_j p_j = x_1 p_1 + x_2 p_2 + x_3 p_3 \Rightarrow x \cdot p = x_\mu p_\mu = x_0 p_0 - x_1 p_1 - x_2 p_2 - x_3 p_3 = tE - \vec{x} \cdot \vec{p}$$

Stel: $\Psi(t, \vec{x}) = e^{i(k\vec{x} - \omega t)}$; substitutie van $E = \omega$ en $\vec{p} = k$ geeft: $\Psi(t, \vec{x}) = e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)} \rightarrow$

$$\boxed{\Psi(t, \vec{x}) = e^{i(p_\mu x_\mu)}$$

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_3} \rightarrow i\partial_\mu \text{ is de vierimpulsoperator} \rightarrow$$

$$\boxed{\partial_\mu \Psi(t, \vec{x}) = p_\mu \Psi(t, \vec{x})}$$

Het **elektron** e^- is een lepton met een massa van ongeveer $0,511 \text{MeV}$, een diameter van minder dan 10^{-17}m , een spin $s = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}\hbar$ en een hiermee geassocieerd magnetisch moment $\vec{\mu} = g\mu_B \vec{s}/c$, met $\mu_B = e\hbar/2m$ en volgens de Diractheorie een Landéfactor $g = 2,0$. Door de continue emissie en absorptie van fotonen door het elektron is g iets groter dan $2,0$. Het antideeltje van het elektron is het **positron** e^+ .

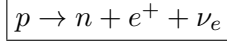
De lichtste hadronen worden gevormd door de **nucleonen**, te weten het positief geladen **proton** p en het iets zwaardere ongeladen **neutron** n ; aangeslagen zwaardere deeltjes hiervan vormen de **hyperonen**. Aangeslagen deeltjes heten ook wel **resonanties**.

Bij **β -verval** gaat een neutron over in een proton, elektron en een ongeladen lepton, te weten een **anti-elektron neutrino** $\bar{\nu}_e$:

$$\boxed{n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e}$$

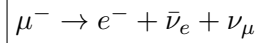
Hierin is de massa van het antineutrino minder dan 10eV of nul.

In een atoomkern kan een proton overgaan in een neutron, positron en een **elektron neutrino** ν_e :



Deze transformatie is niet mogelijk voor een vrij proton, daar $m_{n+e^+} < m_p$; in een atoomkern is de bindingsenergie van het neutron echter groot genoeg om de transformatie wel te laten plaatsvinden.

Het **muon** μ^\pm is een lepton ongeveer 200 maal zwaarder dan het elektron dat o.a. ontstaat bij het verval van π -mesonen. Daar de elektromagnetische vervalreactie $\mu^- \rightarrow e^- + \gamma$ niet voorkomt, is het muon geen zwaar elektron maar een ander soort lepton. Een muon kan in een elektron overgaan d.m.v. de reactie:



Hierin is ν_μ het **muon neutrino** met $m_\nu < 250\text{keV}$.

Bij alle reacties waar leptonen in optreden geldt dat het netto aantal leptonen behouden blijft:

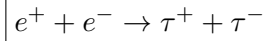
$$\sum n_e = \text{const.} \quad \wedge \quad \sum n_\mu = \text{const.}$$

Hierbij gelden de volgende waarden voor n_e en n_μ :

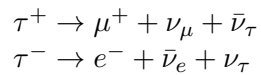
$n_e = 0$ voor $\mu^\pm, \nu_\mu, \bar{\nu}_\mu$, $n_e = +1$ voor e^-, ν_e en $n_e = -1$ voor $e^+, \bar{\nu}_e$.

$n_\mu = 0$ voor $e^\pm, \nu_e, \bar{\nu}_e$, $n_\mu = +1$ voor μ^-, ν_μ en $n_\mu = -1$ voor $\mu^+, \bar{\nu}_\mu$.

Het **taun** τ^\pm is een lepton ongeveer 17 maal zwaarder dan het muon dat o.a. ontstaat uit elektron-positron botsingen:



Het tauon kan vervolgens vervallen d.m.v. de reactie:



Hierin is ν_τ het **tau neutrino** met $m_\tau < 70\text{MeV}$.

Alle 3 soorten leptonen zijn puntvormige spin- $\frac{1}{2}$ deeltjes die de zwakke - en elektromagnetische wisselwerking voelen. Ook voor het tauon en tau neutrino geldt leptonbehoud:

$$\sum n_\tau = \text{const.}$$

De hadronen worden gevormd door groepen deeltjes die bijna dezelfde massa en dezelfde sterke wisselwerking hebben. Deze multipletten worden geklassificeerd door het quantumgetal I , de zgn. **sterke isospin**. Zo is voor het nucleon $I = \frac{1}{2}$, met $I_{p,3} = \frac{1}{2}$ en $I_{n,3} = -\frac{1}{2}$ t.o.v. een as in de interne isospinruimte (die niet verbonden is met de fysieke ruimte). Voor het π -meson is $I = 1$, met $I_3 = 1, 0, -1$. Bij sterke wisselwerkingen blijft I behouden.

Vreemde deeltjes, zoals de hyperonen, zijn zware hadronen die in sterke wisselwerkingen ontstaan, maar via de zwakke wisselwerking vervallen. Ze worden gekenmerkt door het quantumgetal S , zijnde de **vreemdheid**, die bij de sterke wisselwerking behouden blijft. Bij

de zwakke wisselwerking is een verandering $|\Delta S| = 1$ wel mogelijk.
De **sterke hyperlading** Y wordt gedefinieerd als:

$$Y = B + S$$

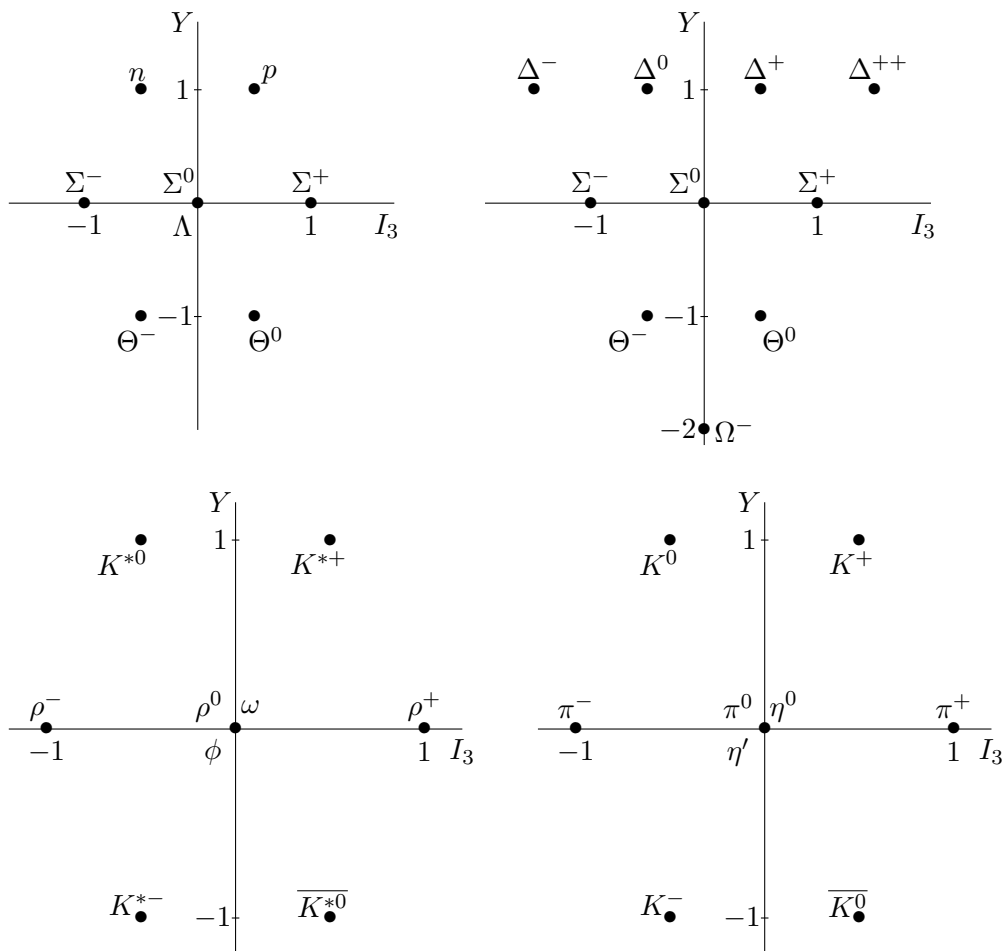
Hierin is B het **baryongetal**, en wel $+1$ voor baryonen en nul voor bosonen. Voor het antihadron van een hadron (Y, B, S) geldt nu $(-Y, -B, -S)$.

Empirisch geldt nu voor het verband tussen Q , I_3 en Y :

$$Q = I_3 + \frac{1}{2}Y$$

Q , I , I_3 , B en S zijn behouden bij de sterke wisselwerking, terwijl bij de zwakke wisselwerking alleen Q en B behouden blijven.

De (lichte, laagste energietoestand) baryonen en mesonen vormen (Y, I_3) -multipletten, te weten een spin- $\frac{1}{2}^+$ octet en spin- $1\frac{1}{2}^+$ decuplet van baryonen, en een spin- 0^- octet en -singlet en een spin- 1^- octet en -singlet van mesonen. De spin van de 3 quarks in de baryonen kan $\frac{1}{2}$ of $1\frac{1}{2}$ zijn; de spin van de 2 quarks in de mesonen is nul of 1.



Er zijn 6 verschillende soorten quarks, met als voornaamste eigenschappen:

quark	spin (\hbar)	B	$Q(e)$	m (MeV)
u	1/2	1/3	+2/3	5
d	1/2	1/3	-1/3	8
s	1/2	1/3	-1/3	175
c	1/2	1/3	+2/3	1270
b	1/2	1/3	-1/3	4200
t	1/2	1/3	+2/3	$\pm 1, 7 \cdot 10^5$

De voornaamste zwakke wisselwerkingen tussen de quarks zijn: $d \rightarrow u \wedge c \rightarrow s \wedge t \rightarrow b$

De wisselwerking tussen deeltjes geschiedt d.m.v. het uitwisselen van **veldbosonen**. Daar het foton massaloos is, kan het volgens de onzekerheidsrelatie $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ een willekeurig kleine energie bezitten en dus willekeurig lang bestaan. Hieruit volgt dat de reikwijdte van de elektromagnetische wisselwerking oneindig is. De veldbosonen van de zwakke wisselwerking, W^\pm en Z^0 , zijn zeer zwaar, waardoor de reikwijdte van de zwakke wisselwerking slechts 10^{-17} m is. De reden hiervan is dat de sterke wisselwerking (overigens net als de andere wisselwerkingen) een zgn. **ijkkracht** is. De kernkracht tussen nucleonen is ene uitvloeisel van de sterke wisselwerking en wordt gedragen door π -mesonen.

Behalve het afstoten of aantrekken van deeltjes kan een kracht ook een deeltje in andere deeltjes transformeren. Voor de vervaltijd van de respectievelijke wisselwerkingen geldt globaal:

zwakke wisselwerking $\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu \mid \tau \approx 10^{-6}$ s

elektromagnetische wisselwerking $\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma \mid \tau \approx 10^{-15}$ s

sterke wisselwerking $\Delta^{++} \rightarrow p + \pi^+ \mid \tau \approx 10^{-23}$ s

De **dwarsdoorsnede** voor een (verstrooiings)reactie is het equivalente oppervlak van een deeltje dat aan de reactie deelneemt. Als d de dikte van het doel is, n het aantal deeltjes hierin per volume-eenheid, σ de dwarsdoorsnede van de deeltjes en N het aantal opvallende deeltjes, dan geldt voor het aantal verstrooide deeltjes: $N_s = Nnd\sigma$. Als $d\Omega$ de ruimtehoek is bij het doel in een bepaalde richting, dan geldt voor het aantal deeltjes dat binnen $d\Omega$ verstrooid wordt:

$$N_s = Nnd \frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta\Omega$$

Hierin is $d\sigma/d\Omega$ de differentiële dwarsdoorsnede in een bepaalde richting en wordt uitgedrukt in m^2 /sterad of brn/sterad, waarbij 1 barn = 10^{-24} m².

Voor de totale dwarsdoorsnede σ geldt dan:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

De niet-relativistische spin op - en spin neer toestanden van een elektron zijn te beschrijven d.m.v. een spinor ϕ_s :

spin op: $\phi_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ en spin neer: $\phi_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$.

Daar er in totaal 4 toestanden van een elektron zijn, te weten 2 met pos. energie en 2 met neg. energie (elk met een ϕ_+ en een ϕ_-), wordt een relativistisch elektron beschreven d.m.v. een viercomponenten spinor $u(p, s)$, waarin p de vierimpuls is en s de 3-de component van

de spin:

$$u(p, s) = \sqrt{E + m} \begin{bmatrix} \phi_s \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\phi_s \\ E + m \end{bmatrix}$$

Hierin is $\phi_s = \phi_{\pm}$ voor $s = \pm \frac{1}{2}$, \vec{p} de impuls en $\vec{\sigma}$ de Pauli spinmatrix.

Voor de golffunctie van een vrij relativistisch elektron met vierimpuls p_{μ} geldt dan:

$$\psi(p, s) = u(p, s)e^{-ip_{\mu}x_{\mu}}$$

Deze golffunctie voldoet aan de Diracvergelijking die te schrijven is als:

$$(i\gamma_{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi = 0$$

Hierin is γ_{μ} een viervector waarvan de componenten (4,4)-matrices zijn die in de spinruimte werken die opgespannen wordt door $u(p, s)$ en $m \equiv mI_4$, met I_4 de (4,4)-eenheidsmatrix.

Als een elektron zich in een elektromagnetisch veld $A = (A_0, \vec{A})$ bevindt, dan heeft het een energie van: $E = (2m)^{-1}(\vec{p} - e\vec{A})^2 + eA_0$

Dit betekent dat de vierimpuls p getransformeerd is in $p - eA \equiv (E - eA_0, \vec{p} - e\vec{A})$. Hieruit volgt voor de Diracvergelijking bij aanwezigheid van een elektromagnetisch veld:

$$(\gamma_{\mu}p_{\mu} + e\gamma_{\mu}A_{\mu} - m)\psi = 0 \rightarrow$$

$$(i\gamma_{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi = -e\gamma_{\mu}A_{\mu}\psi$$

Daar neutrino's geen massa en lading bezitten worden ze beschreven door een tweecomponenten spinor $w(\nu)$ die voldoet aan de vergelijking:

$$Ew(\nu) = -\vec{\sigma} \cdot \vec{p}w(\nu)$$

Daar $m_{\nu} = 0$, is $E = |\vec{p}| \rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{p}/|\vec{p}|$ is de spinorcomponent langs de bewegingsrichting, genaamd de **heliciteit** λ , met eigenwaarden ± 1 . Het neutrino is *linksdraaiend* met $\lambda = -1$ en het antineutrino is **rechtsdraaiend** met $\lambda = +1$.

De elektromagnetische wisselwerking wordt beschreven door de **quantumelektrodynamica**, waarbij gebruik gemaakt wordt van zgn. **Feynmandiagrammen**. De overgang van een begintoestand naar een eindtoestand is de som van alle mogelijke Feynmandiagrammen. De amplitude T van de begin- naar de eindtoestand is dan een oneindige storingsom waarvan de eerste termen het belangrijkst zijn, daar elke volgende term een olopende macht van $\alpha = 1/137$ bevat.

Voor de uitwisseling van een elektron met vierimpuls q_{μ} tussen 2 stilstaande bronnen Q is de Diracvergelijking te schrijven als: $(i\gamma_{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi = Q$. Substitutie van de elektrongolffunctie $\psi = ue^{-iq_{\mu}x_{\mu}}$ geeft: $(\gamma_{\mu}q_{\mu} - m)\psi = Q \rightarrow \psi = Q/(\gamma_{\mu}q_{\mu} - m)$

Voor de uitwisseling van een boson met massa m is de Klein-Gordonvergelijking te schrijven als: $(-\partial_{\mu}\partial_{\mu} - m^2)\psi = Q$. Substitutie van een vlakke golf geeft:

$$(q^2 - m^2)\psi = Q \rightarrow \psi = Q/(q^2 - m^2)$$

Voor een foton geldt $m = 0 \rightarrow \psi = Q/q^2$

Algemeen geldt dat de binnenste lijnen van een Feynmandiagram een factor $i/(q_{\mu}\gamma_{\mu} - m)$ aan de amplitude bijdragen voor fermionen, een factor i/q^2 voor fotonen en een factor $1/(q^2 - m^2)$

voor bosonen. Deze termen die het gevolg zijn van de uitwisseling van een deeltje heten **voortbrengingstermen**. Tevens draagt elk knooppunt een factor $-ie\gamma_\mu$ bij.

De vierimpuls van de uitwisselingsdeeltjes hoeven alleen aan het vierimpulsbehoud in elk knooppunt te voldoen. Deze deeltjes zijn dus virtueel.

De berekening van een amplitude is meestal een integraal over alle vierimpulsen van een binnenste lijn. In geval van een gesloten lijn (lus) zoals die van een e^+e^- -paar geldt:

$$T = \int \frac{d^4p}{[\gamma(p-k) - m][\gamma p - m]} \approx \int \frac{d^4p}{p^2}$$

Hierin is k de vierfotonimpuls, p de vierelektronimpuls en $(k-p)$ de vierpositronimpuls. Daar d^4p sneller toeneemt dan p^2 , is deze integraal divergent. Echter, de Feynmandiagrammen hebben betrekking op naakte deeltjes, terwijl echte deeltjes altijd een wolk van uitgezonden en geabsorbeerde virtuele fotonen rond zich hebben. Alle divergenties zijn te elimineren d.m.v. **renormalisatie** van massa en lading. De waargenomen massa m en lading Q van een deeltje zijn dan te schrijven als:

$$\begin{cases} m = m_0 + \Delta m \\ Q = Q_0 + \Delta Q \end{cases}$$

Hierin is Δm en ΔQ het massaverschil resp. ladingsverschil tussen de waargenomen massa cq lading en de naakte massa m_0 cq lading Q_0 .

Substitutie van $\Phi(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx'/\hbar} \Psi(x') dx'$ in de golffunctie $\Psi(x, t)$ van een deeltje op een later tijdstip t geeft:

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(px-Et)/\hbar} \Phi(p) dp = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} e^{-ip^2t/2m\hbar} e^{-ipx'/\hbar} \Psi(x') dx' \Leftrightarrow$$

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x') e^{[ip(x-x')/\hbar] - [ip^2t/2m\hbar]} \Psi(x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x') G(x'; x, t) dx'$$

Hierin is $G(x'; x, t) = (2\pi\hbar)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{[ip(x-x')/\hbar] - [ip^2t/2m\hbar]} dp$ de **Greenfunctie** die als *vrij deeltje voortbrenger* fungeert, ofwel de waarschijnlijkheidsamplitude dat een deeltje op $t = 0$ van punt x' in tijd t naar punt x beweegt.

Algemeen geldt voor de overgang van een deeltje van (x', t') naar (x, t) :

$$G(x', t'; x, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{[ip(x-x')/\hbar] - [ip^2(t-t')/2m\hbar]} dp$$

Het argument van de exponent in de integrand is te schrijven als:

$$\frac{ip(x-x')}{\hbar} - \frac{ip^2(t-t')}{2m\hbar} = -\frac{i(t-t')}{2m\hbar} \left[p + \frac{m(x'-x)}{t'-t} \right] + \frac{im(x'-x)^2}{2\hbar(t'-t)}$$

Substitutie van $y = p + \frac{m(x'-x)}{t'-t}$ en $dy = dp$ geeft:

$$G(x', t'; x, t) = \frac{e^{[im(x'-x)^2]/2\hbar(t'-t)}}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-[i(t'-t)/2m\hbar]y^2} dy = \frac{e^{[im(x'-x)^2]/2\hbar(t'-t)}}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{i(t'-t)}} \rightarrow$$

$$G(x', t'; x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t'-t)}} e^{[im(x'-x)^2]/2\hbar(t'-t)}$$

Vacuümpolarisatie ontstaat als een elektron een foton uitzendt dat vervolgens overgaat in een E^-E^+ -paar. Het oorspronkelijke elektron trekt het positron aan en stoot het andere elektron af. Hierdoor wordt het naakte elektron afgeschermd en meet men het “aangeklede” elektron.

Als een relativistisch elektron op een ander elektron botst, dan kan dit elektron dichter doordringen tot het doel, d.w.z. het afschermingseffect vermindert, zodat de gemeten elektronlading groter wordt. Dit betekent dat de lading van een elektron niet *constant* is, maar afhangt van de vierimpuls van het inkomende elektron. Hierdoor is de fijnstructuurconstante ook niet constant, waardoor er verschuivingen ontstaan in de energieniveaus van een atoom, de zgn. **Lambverschuiving**.

Voor de amplitude voor de uitwisseling van 1 foton tussen 2 geladen deeltjes, d.w.z. voor het elektromagnetische proces $1 + 2 \rightarrow 3 + 4$ voor 4 spin- $\frac{1}{2}$ fermionen, geldt:

$$T = [\bar{u}(k_3, s_3)\gamma_\mu u(k_1, s_1)] \frac{e^2}{q^2} [\bar{u}(k_4, s_4)\gamma_\mu u(k_2, s_2)]$$

Elke term tussen rechte haken heet een stroom die een spinor bevat voor het inkomende deeltje en een geconjugeerde spinor voor het uitgaande deeltje. Er tussen staat de voortbrenger voor het uitgewisselde foton met vierimpuls $q = k_1 - k_3$. De (4,4)-matrix γ_μ werkt op de spinor u , waarbij $\gamma_\mu u(k, s)$ de spintoestand van een fermion beschrijft dat een foton absorbeert of emitteert.

Een **ijktheorie** ofwel **Yang-Millstheorie** is een beschrijving van deeltjes en krachten waarbij het bestaan van bepaalde behoudswetten automatisch de mathematische vorm van de wisselwerking beschrijft.

Krachten worden beïnvloed door afschermingseffecten van virtuele deeltjes. Bij de elektromagnetische wisselwerking vind de afscherming plaats d.m.v. creatie van virtuele e^-e^+ -paren, waardoor de aangeklede lading kleiner is dan de naakte lading. Bij de sterke wisselwerking treden 2 afschermingseffecten op, nl. een verzwakkend effect in de vorm van virtuele $q\bar{q}$ -paren, en een groter versterkend effect in de vorm van virtuele gluon-antigluonparen. Hierdoor is de aangeklede kleurlading groter dan de naakte kleurlading. Naarmate de energie van deeltjes toeneemt wordt de wisselwerking minder beïnvloed door de afschermingseffecten.

Bij een energie van meer dan 10^{14}GeV verdwijnt het verschil in sterkte tussen de sterke -, zwakke - en elektromagnetische wisselwerking en blijft er dus 1 fundamentele koppelingsconstante over. Er is dan een symmetrietoestand die bij lagere energieën niet zichtbaar is, een zgn. **verborgen symmetrie**. De ene fundamentele koppelingsconstante bepaalt de onderlinge verhouding van de verschillende krachten in de niet-symmetrische lagere energietoestand. De overgang van de symmetrische - naar de niet-symmetrische toestand heet een **fase-overgang** die *spontaan* heeft plaatsgevonden.

De ijktheorieën van de sterke - en elektrozwakke wisselwerking zijn renormaliseerbaar, d.w.z.

de er in optredende omeindigheden voor de massa, lading e.d. zijn te elimineren door i.p.v. de naakte - de aangeklede koppelingsconstanten te gebruiken. De gravitationele wisselwerking is echter *niet* renormaliseerbaar. Bovendien vervormen deeltjes zelf lokaal de ruimte om zich heen.

IJkinvariantie houdt in dat het mogelijk is een theorie zo te formuleren dat ze invariant is onder een groep van transformaties onder externe coördinaten. Bij *globale* ijk-invariantie is de theorie onafhankelijk onder transformaties van de interne coördinaten die dezelfde zijn in alle punten van de ruimtetijd. Bij *lokale* ijk-invariantie is de theorie onafhankelijk onder transformaties van de interne coördinaten die van punt tot punt in de ruimtetijd variëren. Elke kracht is verbonden met een bepaalde symmetrie van de natuur en dus met een bepaalde groep transformaties en bepaalde behoudswetten.

Het behoud van lading ligt ten grondslag aan de elektromagnetische wisselwerking en de QED. Daar lading globaal behouden blijft, d.w.z. $\sum q = \text{const.}$, kan elke golf-functie van elk deeltje met een factor $e^{i\alpha q}$ (met α een universele constante) vermenigvuldigd worden, zonder dat dit de waargenomen eigenschappen van het deeltje beïnvloedt: $\psi \rightarrow \psi e^{i\alpha q}$

Voor de verwachtingswaarde van $\psi\psi^*$ geldt dan: $\psi\psi^* = \psi e^{i\alpha q}\psi^* e^{-i\alpha q} = \psi\psi^*$

De transformatie $\psi \rightarrow \psi e^{i\alpha q}$ stelt een rotatie voor in een 1-dimensionale complexe “interne” ruimte die los staat van de ruimtetijd, de zgn. ladingsruimte.

Lading is ook lokaal behouden, d.w.z. lading kan zich niet instantaan over een eindige afstand verplaatsen. Een lokale ijktransformatie is dan van de vorm $\psi \rightarrow \psi e^{i\alpha(\vec{x},t)q}$, waarbij $\alpha(\vec{x},t)$ een continue functie is. Voor de overeenkomstige verandering in de vierimpuls geldt dan:

$$\psi^* \partial_\mu \psi \rightarrow \psi^* \partial_\mu \psi + iq|\psi|^2 \partial_\mu \alpha$$

Om de vierimpuls invariant te maken onder lokale ijktransformaties moet de afgeleide vervangen worden door een zgn. **covariante afgeleide** D_μ , die gedefinieerd wordt als:

$$D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu$$

Hierin is A_μ een functie van de ruimtetijd die onder lokale ijktransformaties transformeert via:

$$A_\mu \rightarrow A_\mu - \partial_\mu \alpha$$

Nu geldt: $\psi^* D_\mu \psi = \psi^* \partial_\mu \psi + iq\psi^* A_\mu \psi \rightarrow$

$$\psi^* \partial_\mu \psi + iq|\psi|^2 \partial_\mu \alpha + iq\psi^* A_\mu \psi - iq|\psi|^2 \partial_\mu \alpha = \psi^* \partial_\mu \psi + iq\psi^* A_\mu \psi = \psi^* D_\mu \psi$$

Uit de elektromagnetische veldtensor volgt: $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \rightarrow \partial_\nu \partial_\nu F_{\mu\nu} = 0$

Daar $\partial_\nu j_\nu = 0$ volgt hieruit: $\partial_\mu F_{\mu\nu} = j_\nu$

Sammen met de vergelijking $\partial_\sigma F_{\mu\nu} + \partial_\mu F_{\nu\sigma} + \partial_\nu F_{\sigma\mu} = 0$ zijn dit de Maxwellvergelijkingen voor het elektromagnetische veld. De functie A_μ is een ijkveld en is dus het viervector elektromagnetische veld.

Een lokale ijktransformatie laat de direct waarneembare vectorvelden \vec{E} en \vec{B} onveranderd. Dit geldt algemeen, d.w.z. ijktransformaties mogen geen enkele waarneembare grootte veranderen.

Het behoud van lading vereist dus een invariantie onder een groep van lokale ijktransformaties, alsmede het bestaan van een ijkveld (het elektromagnetische veld). Daar termen als $A_\mu A_\mu$ niet ijk-invariant zijn, kan $m A_\mu A_\mu$ geen massa aan het foton toekennen, d.w.z. uit de lokale ijk-invariantie volgt dat de massa van het foton nul is. De groep $\alpha(\vec{x},t)$ van ijktransformaties vormt een unitaire groep $U(1)$, d.w.z. de grootte van $|\psi|^2$ blijft dezelfde en de rotatie vindt plaats in een 1-dimensionale complexe ruimte.

Elke toestandsgolffunctie ψ kan volgens het superpositieprincipe geschreven worden als een lineaire som: $\psi = \sum_{i=1}^n a_i \phi_i$, waarin ϕ_i orthonormale eigenfuncties zijn. De toestandsvector $|\phi\rangle$ kan dan geschreven worden als:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \text{ met } a_j = \int \phi_j^* \psi dV = \langle \phi_j | \psi \rangle$$

De toestandsvector $\langle \psi |$ die overeenkomt met ψ^* is dan te schrijven als: $\langle \psi | = (a_1^* \cdots a_n^*)$. De toestandsvector is, i.t.t. de golffunctie die de toestand beschrijft voor een bepaald coördinatenstelsel, onafhankelijk van het gebruikte stelsel.

Een transformatie T die tot een geldige symmetrie behoort laat alle verwachtingswaarden onveranderd: $\langle \psi | \psi \rangle = \langle T\psi | T\psi \rangle = \langle \psi | T^\dagger T | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$

Hierin is $T^\dagger = T^{-1}$, d.w.z. T is unitair, en kan zodoende via een Hermitische operator $D = D^\dagger$ geconstrueerd worden volgens:

$$T = e^{iaD}$$

Hierin is a een constante en heet D de **voortbrenger** van T .

Een verzameling transformaties g vormen een groep G als geldt:

1. Er is een samenstellingswet die 2 opeenvolgende transformaties $g_1 g_2$ definieert.
2. Alle producten $g_1 g_2$ behoren ook tot G .
3. De inverse transformatie g^{-1} en de identiteit $I = g^{-1} g$ behoren ook tot G .

Als $g_1 g_2 = g_2 g_1$, dan heet G een **Abelse groep**. Een groep kan continu zijn, zoals de verplaatsings- en rotatiegroep, of discontinu zoals de pariteitsgroep. Transformaties in de ruimtetijd veroorzaken overeenkomstige transformaties op de toestandsvectoren. Voor scalaire golffuncties geldt dan:

$$\psi'(r) = \psi(g^{-1}r)$$

Voor vector- en spinor golffuncties geldt (met $\psi = a_j \phi_j$ en sommatie over j):

$$\psi' = T(g)\psi = a_j T(g)\phi_j = a_j \langle \phi_i | T(g) | \phi_j \rangle \phi_i = a_j T_{ij}(g)\phi_i$$

De matrices $T_{ij}(g_1), T_{ij}(g_2), \dots$ vormen een groep met dezelfde samenstellingswet als G en verschaffen een **representatie** van G . Een representatie heet *irreducibel* als het effect van elk element van de representatie op elke eigenfunctie ϕ_j een andere eigenfunctie geeft of een lineaire superpositie van eigenfuncties in dezelfde representatie. De term representatie slaat dan ook tevens op de grondtoestanden ϕ_i .

Een **Lie groep** is een continue groep waarvan de transformaties functies zijn van een eindige verzameling van reële parameters.

Een infinitesimale transformatie in 1 parameter a_i van een Lie groep is te schrijven als:

$$T(\dots \delta a_i \dots) = 1 + i\delta a_i X_i + \dots, \text{ met de } X_i \text{ de voortbrengers van } T.$$

Een eindige transformatie is dan te schrijven als: $T(\dots a_i \dots) = \lim_{n \rightarrow \infty} [1 + i(a_i/n)X_i]^n = e^{ia_i X_i}$

Voor een aantal opeenvolgende infinitesimale transformaties geldt:

$$T(\dots \delta a_i \dots)T(\dots \delta a_j \dots) = 1 + i\delta a_i X_i \delta a_j X_j - \delta a_i \delta a_j X_i X_j + \dots \rightarrow$$

$$T(\dots \delta a_i \dots)T(\dots \delta a_j \dots)T^{-1}(\dots \delta a_i \dots)T^{-1}(\dots \delta a_j \dots) = 1 - \delta a_i \delta a_j [X_i, X_j]$$

Wegens de samenstellingswet is dit equivalent met een transformatie van de vorm:

$$T(\dots \delta a_k \dots) = 1 + i \delta a_k X_k \rightarrow$$

$$[X_i, X_j] = -i \frac{\delta a_k}{\delta a_i \delta a_j} X_k = C_{ijk} X_k$$

Deze vergelijking definieert de zgn. **groep algebra** van de voortbrengers; de coëfficiënten C_{ijk} heten de **structuur constanten**.

De **rang** van een Lie groep is het minimale aantal commuterende voortbrengers van de groep.

Rotaties rond de oorsprong in de ruimte laten de lengte van de vectoren en de hoek tussen deze onveranderd. Ze vormen een reële orthogonale groep, d.w.z. de getransponeerde van een transformatie is gelijk aan zijn inverse ($\tilde{T} = T^{-1}$ en $\tilde{g} = g^{-1}$). In n dimensies heet de groep $O(n)$. De voorwaarde dat $\det(T) = +1$ sluit reflecties in de oorsprong uit; de groep die hieraan voldoet heet de **speciale orthogonale groep** in n dimensies $SO(n)$. Voor de bijbehorende groep algebra geldt:

$$[J_i, J_j] = i \varepsilon_{ijk} J_k$$

Hierin is $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = +1$, $\varepsilon_{213} = \varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = -1$ en $\varepsilon = 0$ voor elk paar indices van ijk dat dezelfde waarde heeft.

Er bestaan nu 2 simultane observabelen, nl. J^2 en 1 van zijn componenten, bv. J_3 . Toestanden die de basis vormen van een irreducibele representatie worden gekarakteriseerd door de waarden die J^2 en J_3 aannemen: $|j, j_3\rangle$

Voor gehele waarden l van j wordt een representatie van $SO(3)$ gevormd door bol harmonische functies $Y_l^m(\theta, \varphi)$. Voor halftallige representaties van $SO(3)$ zijn 2-component spinoren (niet-relativistisch) ϕ_+ en ϕ_- vereist. Voor een rotatie van een spinor ϕ over een hoek α rond een as \vec{n} met poolcoördinaten θ, φ geldt: $R_n(\alpha)\phi = e^{i\alpha \vec{J} \cdot \vec{n}} \phi \rightarrow$

$$R_n(\alpha)\phi = [I_2 \cos \frac{1}{2}\alpha + i \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin \frac{1}{2}\alpha] \phi$$

Hierin is I_2 de (2,2)-eenheidsmatrix en $\vec{J} = \frac{1}{2} \vec{\sigma}$.

Voor $\alpha = 2\pi$ geldt: $R_n(2\pi)\phi = -\phi$. Een spinor moet dus over een hoek van 4π gerooteerd worden om zijn oorspronkelijke waarde weer te verkrijgen.

De representatie van een willekeurige rotatie $R(\alpha)$ in een spinorruimte is te schrijven als:

$$R(\alpha) = \left(\begin{array}{cc} a & -b^* \\ b & a^* \end{array} \right) \left| \begin{array}{l} aa^* + bb^* = 1 \end{array} \right.$$

Deze matrix is unitair met $\det(R(\alpha)) = +1$ en heeft dezelfde eigenschappen als de rotatiematrix in 2 complexe dimensies, d.w.z. komt overeen met een transformatie die tot de $SU(2)$ -groep behoort. De groepen $SU(2)$ en $SO(3)$ hebben daarom dezelfde algebra. Het verschil tussen de groepen is dat als $\alpha = 2\pi$ in $SU(2)$ $\alpha = 4\pi$ in $SO(3)$.

Uit het bestaan van spinoren (waardoor alle fundamentele materiedeeltjes beschreven kunnen worden en die spin- $\frac{1}{2}$ hebben) volgt dat de natuur gekozen heeft voor een $SU(2)$ -symmetrie.

Optelling van 2 impulsmomenttoestanden $|j, m\rangle$ en $|j', m'\rangle$ geeft een toestand $|J, M\rangle$ waarbij J en M voldoen aan: $|j - j'| \leq |j + j'|$ en $M = m + m'$

Algemeen kan de som van 2 toestanden $|j, m\rangle$ en $|j', m'\rangle$ als een produktrepresentatie $|j, m\rangle |j', m'\rangle$

geschreven worden, die ontbonden kan worden in een som van irreducibele representaties $|J, M\rangle$:

$$|j, m\rangle |j', m'\rangle = \sum_{J, M} (J, M | j, m; j', m') |J, M\rangle$$

Hierin heten de getalwaarden $(J, M | j, m; j', m')$ **Clebsch-Gordan coëfficiënten**.

Zo is de ontbinding van het produkt van 2 doublet representaties in een singlet - en een triplet representatie symbolisch te schrijven als: $2 \otimes 2 = 1 \oplus 3$

Interne symmetrieën zijn symmetrieën die geen betrekking hebben op verplaatsingen of rotaties in de ruimtetijd maar direct op de deeltjes werken. Sterke isospin is een interne symmetrie die behouden blijft bij sterke wisselwerkingen. Daar de sterke wisselwerking geen onderscheid maakt tussen een u - en een d -quark, kunnen deze beschouwd worden als subtoestanden van 1 quark met $I = \frac{1}{2}$ in de sterke isospin ruimte. De u -quark heeft een component $+\frac{1}{2}$ en de d -quark een component $-\frac{1}{2}$, ofwel: $u : (\frac{1}{2}, +\frac{1}{2})$ resp. $d : (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$.

De zgn. **zwakke isospin** blijkt uit de gepaardheid van quarks in de zwakke wisselwerking en vormt de ijksymmetrie die ten grondslag ligt aan de zwakke wisselwerking. Dit i.t.t. de sterke isospin symmetrie die toevallig is en geen ijkkraft tot gevolg heeft.

Een interne ruimte heeft een representatie ofwel een aantal grondtoestanden die gevormd worden door deeltjes eigentoestanden, waarbij elke toestand uitgedrukt kan worden als een lineaire som van dergelijke eigentoestanden met complexe numerieke coëfficiënten a_i . Lineaire transformaties $a_i \rightarrow b_i = A_{ij}a_j$ in een interne ruimte met $\sum b_i b_i^* = \sum a_i a_i^*$ vormen een Lie groep, te weten de unitaire groep in n dimensies $U(n)$ die rotaties voorstellen. Als $\det(A_{ij}) = +1$, dan heet de groep de **speciale unitaire groep** in n dimensies $SU(n)$.

Elke $SU(n)$ -groep heeft $(n^2 - 1)$ voortbrengers en de fundamentele representatie heeft n grondtoestanden. Als de wisselwerkingen aan een $SU(n)$ -symmetrie voldoen, dan vormen de elementaire deeltjes n -voudige multipletten. De ladingssymmetrie is een $U(1)$ -symmetrie (die voor 1 dimensie equivalent is met een $SU(1)$ -symmetrie) zodat alle representaties singletten zijn. Hierdoor hebben alle deeltjes van een bepaalde soort dezelfde lading.

De voornaamste **discrete symmetrieën** hebben een groep die slechts 2 elementen bevat, waarvan er één het identieke element is. Bij de **pariteit** P is het ene element de spiegeling in de oorsprong en P^2 het identieke element. Bij de **ladingsconjugatie** C is het ene element de ladingswisseling van een deeltje en C^2 het identieke element. Als T de tijdomekeer voorstelt en de symmetrie CPT geldig is, dan moeten een deeltje en zijn antideeltje identieke massa en levensduur hebben.

Pariteit blijft behouden bij de sterke - en elektromagnetische wisselwerking, maar niet bij de zwakke wisselwerking.

Aan deeltjes kan een intrinsieke pariteit worden toegekend van $+1$ of -1 . Als aan quarks en leptonen een pariteit $+1$ wordt toegekend, dan hebben hun antideeltjes een pariteit -1 . Bosonen hebben dezelfde pariteit als hun antideeltjes. onder de pariteitstransformatie keert het elektromagnetische veld \vec{A} om, zodat het foton een negatieve pariteit heeft.

C -pariteit blijft behouden bij de sterke - en elektromagnetische wisselwerking maar niet bij de zwakke wisselwerking. Het produkt CP is een bijna totale symmetrie, die slechts voor 0,1% wordt geschonden bij het zwakke verval van het K^0 -meson.

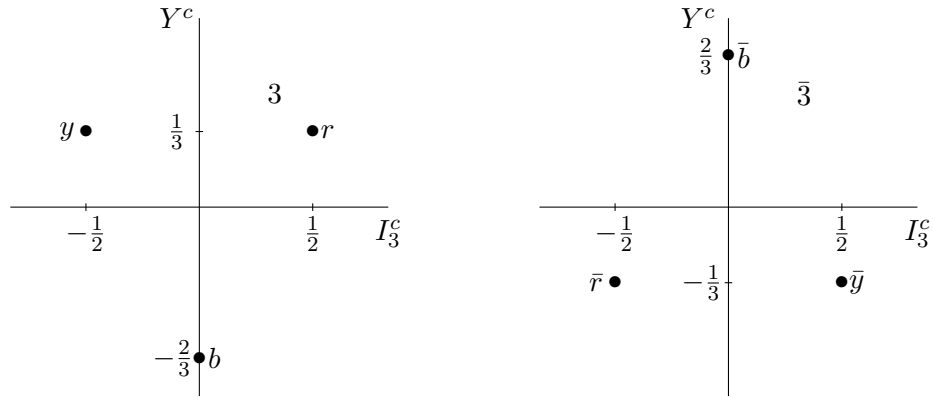
Invariantie van tijdomekeer T betekent dat reacties en hun omgekeerde dezelfde amplituden moeten hebben. bij K^0 -verval moet T gebroken worden zodat CPT wel behouden blijft.

De **quantum chromodynamica** is de quantum veldtheorie van de sterke wisselwerking.

De onderliggende symmetrie is de **kleursymmetrie**, die een gevolg is van het quantumgetal **kleur** dat nodig is om de golffuncties van de baryonen antisymmetrisch te maken. De veldquanta van het kleurveld zijn de massaloze gluonen, die echter wel een kleurlading bezitten en dus met elkaar wisselwerken (i.t.t. fotonen). Hierdoor neemt de kleurkracht toe met toenemende afstand. Quarks, antiquarks en gluonen vormen samen de **partons**.

Het Δ^{++} -baryon heeft een spin $3/2$, hetgeen betekent dat de spins van de 3 u -quarks parallel lopen. Dit houdt in dat de quarks (fermionen) dan dezelfde quantumtoestand bezitten, hetgeen echter vanwege het Pauliprincipe niet mag. Om de totale golffunctie van Δ^{++} antisymmetrisch te maken moet aan het quark een kleurquantumgetal toegekend worden dat 3 verschillende waarden kan hebben, nl. *rood*, *geel* of *blauw*. Daar er 3 verschillende verwisselingen tussen de quarks in een baryon mogelijk zijn, is kleur een 3-voudige symmetrie. De quarks vormen zo een fundamentele 3-dimensionale representatie van de kleurgroep $SU(3)_c$. Alle hadronen blijken kleursingletten te zijn, d.w.z. “gkleurde” hadronen bestaan niet. Dit houdt in dat quarks die alleen in kleur verschillen dezelfde massa bezitten.

Elk element van een representatie wordt gekenmerkt door 2 getallen, te weten de 3-de component van de kleur isospin I_3^c en de kleur hyperlading Y^c .



De fundamentele representaties 3 en $\bar{3}$ bestaan uit de quarks resp. antiquarks en hebben tegengestelde eigenwaarden: $I_3^c(\bar{q}) = -I_3^c(q)$ en $Y^c(\bar{q}) = -Y^c(q)$. De 3 quark grondtoestanden zijn te schrijven als:

$$r = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \wedge y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \wedge b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Er zijn $(3^2 - 1) = 8$ voortbrengers van $SU(3)_c$ waarvoor geldt: $F_i = \frac{1}{2}\lambda_i$; hierin zijn λ_i (3,3)-matrices. Voor de groep algebra geldt:

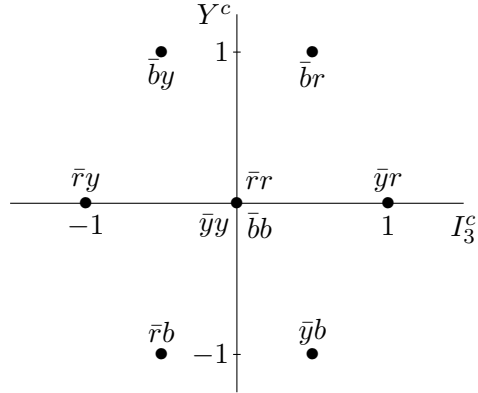
$$\boxed{[F_i, F_j] = if_{ijk}F_k}$$

Voor de structuur constanten geldt:

$$f_{123} = 1 \wedge f_{147} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{516} = f_{637} = \frac{1}{2} \wedge f_{458} = f_{678} = \frac{1}{2}\sqrt{3}$$

Cyclische permutatie van de indices geeft structuurconstanten met dezelfde waarde, anticyclische permutatie met tegengestelde waarde. Alle andere constanten zijn nul.

Hogere orde representaties ontstaan uit produkten van 3 en $\bar{3}$. Zo ontstaat de representatie $3 \otimes \bar{3}$ door $\bar{3}$ te centreren rond y resp. r en resp. b . Eén van de 9 resulterende combinaties met $I_3^c = Y^c = 0$ is $3^{-1/2}(r\bar{r} + y\bar{y} + b\bar{b})$. Daar elke voortbrenger deze toestand vernietigt moet dit een kleursinglet zijn: het beschrijft de kleurinhoud van de mesonen.



De eenvoudigste produkt representaties voor 2 resp. 3 (anti)quarks kunnen worden ontbonden als:

$$\begin{aligned}
 q\bar{q} & 3 \otimes \bar{3} = 8 \oplus 1 \\
 q\bar{q} & 3 \otimes 3 = 6 \oplus \bar{3} \\
 qqq & 3 \otimes 3 \otimes 3 = 10 \oplus 8 \oplus 8 \oplus 1 \\
 qq\bar{q} & 3 \otimes 3 \otimes \bar{3} = 15 \oplus \bar{6} \oplus 3 \oplus 3
 \end{aligned}$$

Hieruit volgt dat alleen de combinaties $q\bar{q}$ (mesonen) en qqq (baryonen) kleursingletten kunnen geven. Combinaties als $qqq(q\bar{q})$ zijn mogelijk in de vorm van aangeslagen toestanden die d.m.v. $q\bar{q}$ annihilatie vervallen in de qqq toestand.

De ijktheorie van de kleurkracht is gebaseerd op de eis dat de Diracvergelijking voor quarks invariant is onder een infinitesimale lokale kleurtransformatie

$$\psi \rightarrow e^{ig_s F_a n_a \theta(x)} \psi \approx [1 + ig_s F_a n_a \theta(x)] \psi$$

Hierin is $\theta(x)$ de rotatiehoek in de kleuruimte in een punt x van de ruimtetijd en g_s de sterkte van de kleurlading. Onder een dergelijke transformatie is de normale afgeleide niet invariant en wordt daarom vervangen door een covariante afgeleide D_μ waarvoor geldt:

$$D_\mu = \partial_\mu + ig_s F_a G_{a\mu}(x)$$

Hierin is het ijkveld $G_{a\mu}(x)$ een vector in de ruimtetijd dat kleur draagt. Voor de wijze waarop $G_{a\mu}$ onder lokale kleurtransformaties transformeert waarbij D_μ invariant blijft geldt:

$$G_{a\mu}(x) \rightarrow G_{a\mu}(x) - n_a \partial_\mu \theta(x) - g_s f_{abc} n_b G_{c\mu}(x) \theta(x)$$

Voor de energie van $G_{a\mu}$ geldt:

$$E_G = G_{a\mu\nu} G_{a\nu\mu}$$

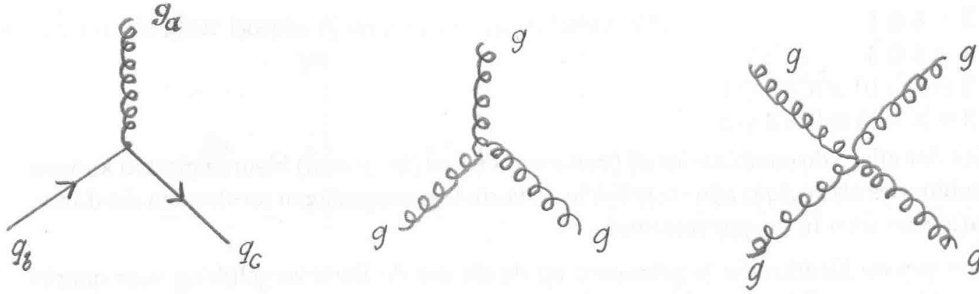
Hierin geldt voor $G_{a\mu\nu}$:

$$G_{a\mu\nu} = \partial_\mu G_{a\nu} - \partial_\nu G_{a\mu} - g_s f_{abc} G_{b\mu} G_{c\nu}$$

Het ijkveld $G_{a\mu\nu}$ heeft 8 kleurcomponenten met daarmee corresponderend 8 veldquanta, de gluonen, die overeenkomen met de toestanden $\bar{b}y$, $\bar{b}r$, etc. De gluonen koppelen met de kleurlading van de quarks met een sterkte g_s . Voor de overeenkomstige fijnstructuurconstante α_s geldt:

$$\alpha_s = \frac{g_s^2}{4\pi}$$

Uit de eis van ijk-invariantie van de gluon veldenergiedichtheid volgt dat de gluonen massaloos zijn. Daar de kleurgroep $SU(3)_c$ - i.t.t. de ladingsgroep $U(1)$ - een niet-Abelse groep is, kunnen 3 of 4 gluonen in 1 punt met elkaar in wisselwerking treden waardoor er niet-lineaire effecten ontstaan. In analogie met de Coulombkracht veroorzaakt een enkele gluon uitwisseling tussen 2 quarks een kracht in de vorm $\vec{F}_g = (\vec{F}_1 \cdot \vec{F}_2)/r^2$, waarbij \vec{F}_1 en \vec{F}_2 vectoren zijn die op de quarks betrekking hebben en waarvan de componenten de kleurvoortbrengers zijn.

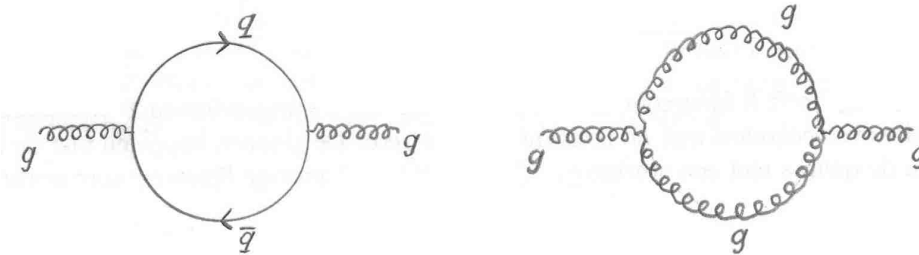


De berekening van de amplitude d.m.v. storingsrekening kan in de QCD niet altijd worden toegepast daar op nucleaire schaal (10^{-15}m) de koppelingsconstante g_s ongeveer 1 is. Daar elk knooppunt van een diagram nog een factor g_s aan de amplitude bijdraagt, zijn de hogere orde diagrammen niet te verwaarlozen (i.t.t. de elektromagnetische wisselwerking).

Bij diep inelastische (d.w.z. bij grote vierimpulsoverdracht, $-q^2 \gg 1\text{GeV}^2$) lepton verstrooiing aan nucleonen nadert g_s naar nul, d.w.z. de quarks bewegen zich dan vrij in het nucleon. Dit heet **asymptotische vrijheid** en is een unieke eigenschap van niet-Abelse ijktheorieën. In de QCD treden lusdiagrammen op die een kleurpolarisatie van het vacuüm veroorzaken. Hierbij schermen de quarklussen de kleurlading af, maar aangezien de gluonen ook kleur dragen (i.t.t. de fotonen die geen lading bezitten) vergroten deze de kleurlading. Voor de gerenormaliseerde, van q^2 afhankende koppelingsconstante $\alpha_s(q^2)$ geldt dan:

$$\alpha_s(q^2) = \frac{\alpha_s(\mu^2)}{1 + B\alpha_s(\mu^2) \ln(|q^2|/\mu^2)}$$

Hierin is μ^2 een referentie vierimpuls en $B = \frac{11 - (2N_F/3)}{4\pi}$, waarin N_F het aantal quarks maken is. Voor $N_F = 6$ is $B > 0$ en nadert $\alpha_s(q^2)$ naar nul als $q^2 \rightarrow \infty$.



De **schaalparameter** Λ van de QCD wordt gedefinieerd als:

$$\Lambda^2 = \frac{\mu^2}{e^{1/B\alpha_s(\mu^2)}}$$

Substitutie in $\alpha_s(q^2)$ geeft dan:

$$\alpha_s(q^2) = \frac{1}{B \ln(|q^2|/\Lambda^2)}$$

Voor de grootte van Λ geldt: $\Lambda \approx 0,2 \text{ GeV} \rightarrow \Lambda^{-1} \approx 10^{-13} \text{ m}$

Voor de massa van de verschillende quarks geldt nu: $m_u, m_d \ll \Lambda$, $m_s \approx \Lambda$, $m_c, m_b, m_t \gg \Lambda$. De sterke isospin symmetrie $SU(2)$ is het gevolg van de geringe u - en d -quarkmassa t.o.v. Λ .

De potentiaal van een quark-antiquark paar kan bij benadering geschreven worden als:

$$V(r) = -\frac{4\alpha_s}{3r} + \lambda r$$

Hierin is $\alpha_s \approx 0,2$ en $\lambda \approx 0,16$. Op korte afstand is $V(r)$ een Coulombpotentiaal daar er maar 1 gluon wordt uitgewisseld. Op grote afstand worden er i.h.a. meer gluonen uitgewisseld en is de potentiaal lineair. Dit komt omdat de kleurveldlijnen elkaar aantrekken, waardoor het kleurveld tussen een $q\bar{q}$ -paar de vorm van een fluxbuis met constante doorsnede heeft. Een toename van de afstand tussen de quarks resulteert dan alleen in een toename van de lengte van de fluxbuis. Als de afstand groot genoeg is geworden, dan kan uit de energietoename een $q\bar{q}$ -paar gevormd worden. De fluxbuis breekt dan en er is dan een 2-de meson gevormd.

Voor de amplitude T van de zwakke wisselwerking tussen 2 deeltjes $1 + 2 \rightarrow 3 + 4$ in de vorm van een punt-contact wisselwerking geldt volgens Fermi:

$$T = \frac{G}{\sqrt{2}} [\bar{u}(4)\gamma_\mu u(2)] [\bar{u}(3)\gamma_\mu u(1)]$$

De 2 stromen worden nu niet gescheiden door een voortbrenger zoals in de QED, Daar de zwakke wisselwerking wordt overgebracht door de intermediaire vectorbosonen W^+ en W^- , is de correcte amplitude:

$$T = \frac{1}{8} g^2 [\bar{u}(4)\gamma_\mu u(2)] \frac{1}{q^2 - M_W^2} [\bar{u}(3)\gamma_\mu u(1)]$$

Hierin is g de sterkte van de koppeling in de knooppunten en q de uitgewisselde vierimpuls. Bij lage energieën ($|q^2| \ll M_W^2$) zijn de beide amplituden ongeveer gelijk. Daar $M_W \approx 83 \text{ GeV}$ heeft de zwakke wisselwerking een korte dracht.

er zijn ook andere stromen mogelijk waarbij de vectorkoppeling (V) γ_μ vervangen is door de axiale koppeling (A) $\gamma_\mu \gamma_5$; hierin is $\gamma_5 = i\gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3$. Dit is een (4,4)-matrix waarvan alle elementen nul zijn m.u.v. de diagonaalelementen van rechtsboven naar linksonder die de waarde 1 hebben. Daar de vector - en axiale koppelingssterkte ongeveer gelijk zijn, is de Fermi-amplitude nu te schrijven als:

$$T = \frac{G_V}{\sqrt{2}} [\bar{u}(4)\gamma_\mu u(2)] [\bar{u}(3)\gamma_\mu u(1)] + \frac{G_A}{\sqrt{2}} [\bar{u}(4)\gamma_\mu \gamma_5 u(2)] [\bar{u}(3)\gamma_\mu \gamma_5 u(1)]$$

Daar onder de pariteitstransformatie $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ $\gamma_\mu \rightarrow -\gamma_\mu$ en $\gamma_\mu \gamma_5 \rightarrow \gamma_\mu \gamma_5$, blijft T gelijk. De stroom moet daarom zowel een vector - als een axiale component hebben om onder een pariteitstransformatie T van teken te kunnen laten veranderen. Maximale pariteitsschending

ontstaat als de stroom van de vorm $\frac{1}{2}\bar{u}\gamma_\mu(1 \pm \gamma_5)u$ is. Daar het neutrino massaloos is, bezit het een bepaalde draaizin en wel linksdraaiend. De hierbij behorende koppeling is van de vorm $V - A$. De uiteindelijke vorm van de Fermi-amplitude (voor kern β -verval) is dan:

$$T = \frac{G_V}{\sqrt{2}}[\bar{u}(4)\gamma_\mu(1 - \gamma_5)u(2)][\bar{u}(3)\gamma_\mu\{1 - (\gamma_5 G_a G_V^{-1})\}u(1)]$$

Hierin is de 1-ste stroom de zuivere $V - A$ leptonstroom en de 2-de de hadronstroom. Het zwakke verval van π -mesonen, $\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$, wordt vervolgt door het zwakke verval van het muon, $\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$. De amplitude voor het μ -verval is te schrijven als het produkt van 2 zuivere $V - A$ leptonstromen:

$$T = \frac{G_\mu}{\sqrt{2}}[\bar{u}(4)\gamma_\mu(1 - \gamma_5)u(2)][\bar{u}(3)\gamma_\mu(1 - \gamma_5)u(1)]$$

De K -mesonen komen voor in de vorm $K^+(u\bar{s})$ en $K^0(d\bar{s})$, welke een sterk isospin doublet vormen. Hun antideeltjes zijn $K^-(\bar{u}s)$ en $\bar{K}^0(\bar{d}s)$. De neutrale K -mesonen kunnen via 2 mogelijke kanalen vervallen:

$$K_s^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^- \quad | \quad \tau_s \approx 0,9 \cdot 10^{-10} \text{ s}$$

$$K_l^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^0 + \pi^- \quad | \quad \tau_l \approx 5 \cdot 10^{-8} \text{ s}$$

De zwakke wisselwerking eigentoestanden K_s^0 en K_l^0 zijn in de sterke wisselwerking eigentoestanden K^0 en \bar{K}^0 uit te drukken volgens:

$$K_s^0 = \frac{K^0 + \bar{K}^0}{\sqrt{2}} \quad \wedge \quad K_l^0 = \frac{K^0 - \bar{K}^0}{\sqrt{2}}$$

Experimenteel blijkt dat een K_l^0 -meson heel soms in 2 π -mesonen kan vervallen waarbij CP geschonden wordt. Hieruit volgt dat als CPT een geldige symmetrie is, T geschonden moet worden. In alle andere zwakke wisselwerkingen is CP invariant.

Het Σ^- -hyperon kan o.a. zwak vervallen in $\Sigma^- \rightarrow n + e^- + \bar{\nu}_e$, waarbij een s -quark in een u -quark transformeert, en $\Sigma^- \rightarrow \Lambda^0 + e^- + \bar{\nu}_e$, waarbij een d -quark in een u -quark transformeert. Hierbij is het quark dat in het u -quark transformeert geen zuivere d - of s -quark maar een lineaire superpositie:

$$d' = d \cos \theta_c + s \sin \theta_c$$

Hierin is θ_c een menghoek, de zgn. **Cabibbohoek**.

De superpositie orthogonaal aan het d' -quark is het s' -quark:

$$s' = s \cos \theta_c - d \sin \theta_c$$

Het s' -quark koppelt d.m.v. de zwakke interactie aan het c -quark. Hadronen die een c -quark bevatten heten **charmed** deeltjes.

Door invoering van de Cabibbohoek kunnen quarks en leptonen beide aan het intermediaire vectorboson gekoppeld worden, en wel met dezelfde sterkte.

Het blijkt dat de theorie van de zwakke wisselwerking ook na invoering van het intermediaire vectorboson niet renormaliseerbaar is. De **Glashow-Weinberg-Salam theorie** is een ijktheorie waarin de elektromagnetische- en zwakke wisselwerking geünificeerd zijn tot de zgn. **elektrozwakke wisselwerking** die wel renormaliseerbaar is.

Daar zowel quarks als leptonen dezelfde koppelingsconstante hebben, is de onderliggende symmetrie van de zwakke wisselwerking $SU(2)$, d.w.z. zwakke isospin symmetrie. Experimenteel blijkt dat bij hoge energieën alleen linksdraaiende deeltjes of hun rechtsdraaiende antideeltjes de zwakke wisselwerking voelen. Hierdoor wordt de symmetrie beperkt tot $SU(2)_L$. Hierbij vormen de linksdraaiende fermionen doubletten, te weten:

$$\begin{array}{lll} (u, d')_L & (c, s')_L & (t, b')_L \\ (e^-, \nu_e)_L & (\mu^-, \nu_\mu)_L & (\tau^-, \nu_\tau)_L \end{array}$$

Hierin zijn de $'$ -quarks de zwakke eigentoestanden van de quarks.

Alle rechtsdraaiende fermionen zijn singletten: $(u, d, c, s, t, b, e^-, \mu^-, \tau^-)_R$

De ijkbosonen van de zwakke wisselwerking alléén zouden massaloos zijn, i.t.t. hetgeen in werkelijkheid het geval is. Echter, d.m.v. het zgn. **Higgsmechanisme** waarbij er een *spontane symmetriebreking* optreedt, verkrijgen de velddeeltjes massa. Als in een vacuümtoestand een bepaalde symmetrie ontbreekt, dan zullen er bij een symmetrie transformatie van het ene vacuüm naar het andere vacuüm massalozes scalar deeltjes worden uitgezonden of geabsorbeerd, de zgn. **Goldstone bosonen**. Alleen in een ijktheorie nu zal het ijkboson d.m.v. het absorberen van een Goldstone boson massa kunnen verkrijgen.

De zgn. **zwakke hyperlading** y is met de 3-de component van de zwakke isospin verbonden aan de elektromagnetische lading via de vergelijking:

$$Q = t_3 + \frac{1}{2}y$$

Voor linksdraaiende quarks geldt $y = +\frac{1}{3}$, voor linksdraaiende leptonen $y = -1$ en voor rechtsdraaiende fermionen $Q = \frac{1}{2}y$.

De elektrozwakke wisselwerking is nu gebaseerd op de samengestelde symmetrie $SU(2)_L \otimes U(1)$, waarbij $U(1)$ de zwakke hyperladingsymmetrie is. Uitgangspunt is hierbij dat de Diracvergelijking invariant moet zijn onder lokale $SU(2)_L \otimes U(1)$ transformaties, welke bestaan uit infinitesimale rotaties $\alpha_i(x)$ in de zwakke isospin ruimte en $\beta(x)$ in de zwakke hyperladings ruimte die afhangen van de positie x in de ruimtetijd. De fermionspinor transformeert dan als: $\psi \rightarrow [1 + ig\alpha_i(x)t_i^L + \frac{1}{2}ig'\beta(x)y]\psi$

Hierin is $t_i^L = \frac{1}{2}\tau_i[\frac{1}{2}(1 - \gamma_5)]$ de linksdraaiende zwakke isospin en τ_i een Paulimatrix. Daar $\alpha_i(x)$ en $\beta(x)$ variabel zijn in de ruimtetijd, moet om ijkinvariantie te behouden de afgeleide vervangen worden door een covariante afgeleide:

$$D_\mu = \partial_\mu + igt_i^L W_{i\mu}(x) + \frac{1}{2}ig'y B_\mu(x)$$

Hierin zijn g en g' de boson-fermion koppelingsconstanten voor zwakke isospin en hyperlading (analoog aan g_s in de QCD en e in QED), $W_{i\mu}(x)$ is het $SU(2)_L$ -ijkveld, zijnde een vector in de ruimtetijd (index μ) en een vector in de isospin ruimte (index i). Hierbij zijn 3 ladingscombinaties mogelijk: $W^\pm = (W_1 \pm W_2)/\sqrt{2}$ en $W^0 = W_3$; $B_\mu(x)$ is het $U(1)$ -ijkveld, zijnde een vector in de ruimtetijd en een zwakke isospin scalar en dus neutraal. De Diracvergelijking wordt nu:

$$[i\gamma_\mu \partial_\mu - g\gamma_\mu t_i^L W_{i\mu}(x) - \frac{1}{2}g'y\gamma_\mu B_\mu(x) - m]\psi = 0$$

Het Goldstone veld kan worden beschreven als een zwakke isospin doublet:

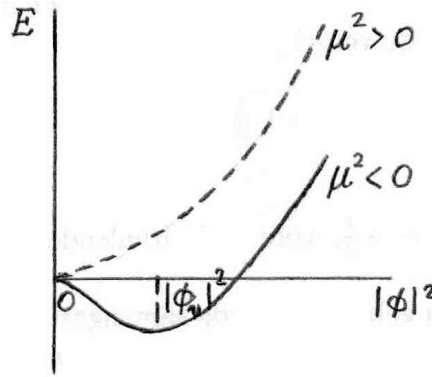
$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} \quad \wedge \quad \phi^+ = [\phi_1^*, \phi_2^*]$$

Voor de energiedichtheid van het veld geldt:

$$E = D_\mu \phi^\dagger D_\mu \phi + \mu^2 \phi^\dagger \phi + \lambda (\phi^\dagger \phi)^2$$

Hierin heeft μ de dimensie GeV (massa) en λ is een positieve koppelingsconstante.

In de laagste energietoestand (het vacuüm) is $\phi = \phi_v$ overal constant. Voor $\mu^2 > 0$ is $\phi_v = 0$, maar voor $\mu^2 < 0$ geldt: $\phi_v^\dagger \phi_v = -\mu^2/2\lambda \equiv \eta^2$, d.w.z. $\phi \neq 0$, zodat er dan vele vacuümtoestanden bestaan die alleen in de fase van ϕ_v verschillen en waartussen massaloze Goldstone bosonen worden uitgezonden en geabsorbeerd. Hoewel de energievergelijking symmetrisch is onder zwakke isospin rotaties, is het vacuüm dat niet door ϕ_v een zekere absolute isospin bezit. Hier treedt de spontane symmetriebreking op.



Stel: $\phi_v = \begin{bmatrix} 0 \\ \eta \end{bmatrix} \wedge \phi = \begin{bmatrix} 0 \\ \eta + \{\sigma(x)/\sqrt{2}\} \end{bmatrix}$, met $\eta \in \mathbb{R}$ en $\sigma(x)/\sqrt{2}$ het waargenomen veld.

Voor de energiedichtheid van het Goldstone veld geldt dan (exclusief termen in het Higgs-veld):

$$E = \frac{1}{2} \partial_\mu \sigma^*(x) \partial_\mu \sigma(x) + \frac{1}{4} g^2 \eta^2 (W_1^2 + W_2^2) + \frac{1}{4} \eta^2 (gW_3 - g'B)^2$$

De velddeeltjes hebben nu een massa gekregen die bepaald wordt door de coëfficiënten van de kwadratische termen. Daar de termen in de neutrale velden W_3 en B gemengd zijn, volgt het waarneembare veld uit de diagonalisatie van W_3 en B met als resultaat:

$$\begin{aligned} Z^0 &= W^0 \cos \theta_w - B \sin \theta_w \\ A &= W^0 \sin \theta_w + B \cos \theta_w \end{aligned}$$

Hierin is θ_w een menghoek, de zgn. **Weinberghoek** waarvoor geldt:

$$\cos \theta_w = \frac{g}{\sqrt{g^2 + g'^2}} \wedge \sin \theta_w = \frac{g'}{\sqrt{g^2 + g'^2}}$$

Voor de veldenergiedichtheid geldt dan:

$$E = \frac{1}{4} g^2 \eta^2 \left[(W^+)^2 + (W^-)^2 + \frac{(Z^0)^2}{\cos^2 \theta_w} \right]$$

Daar er geen kwadratische term in A is, heeft dit veld massaloze veldquanta en stelt dus het elektromagnetische veld voor.

De W^\pm - en Z^0 -bosonen hebben elk één van de 4 componenten van het Goldstone boson geabsorbeerd en massa verkregen waarvoor geldt:

$$M_W = \frac{g\eta}{\sqrt{2}} \quad \wedge \quad M_Z = \frac{M_W}{\cos \theta_w}$$

De overgebleven component heeft massa gekregen en heet het **Higgsboson**; de massa hiervan wordt niet door de theorie voorspeld. Ze moeten aan fermionen koppelen met een kracht die evenredig is aan de fermionmassa.

De Diracvergelijking is nu te schrijven in termen van waarneembare bosonen (exclusief de Higgsbosonen):

$$\left[i\gamma_\mu \partial_\mu - \gamma_\mu \left\{ \frac{g}{\sqrt{2}} (W_\mu^- t_+^L + W_\mu^+ t_-^L) + g \sin \theta_w Q A_\mu + \frac{g}{\cos \theta_w} (t_3^L - Q \sin^2 \theta_w) Z_\mu \right\} - m \right] \psi = 0$$

Hierin is $t_\pm^L = t_1^L \pm it_2^L$ en $Q = t_3^L + \frac{1}{2}y$.

Daar de koppelingsconstante van het elektromagnetische veld A_μ de elektrische lading is, volgt uit de Diracvergelijking:

$$e = g \sin \theta_w$$

Naast de zwakke ladingswisselwerking term komt er in de Diracvergelijking ook een zwakke **neutraalstroom wisselwerking** term voor die door het Z^0 -boson overgedragen wordt. Hierdoor zijn wisselwerkingen zoals $\nu_\mu + e^- \rightarrow \nu_\mu + e^-$ mogelijk.

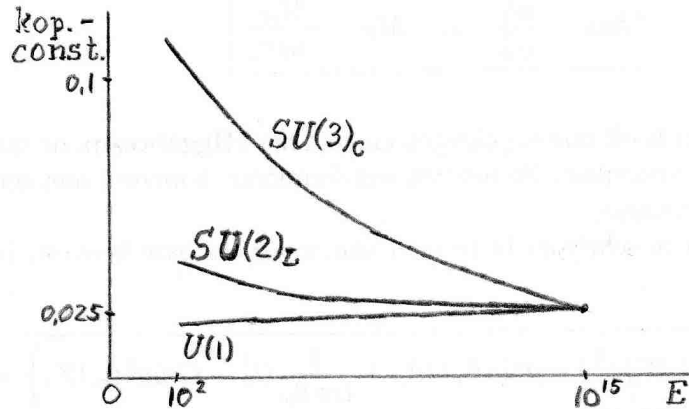
Daar voor lage energieën de elektrozwakke amplitude m.b.t. de W^\pm -bosonen tot de Fermi punt-contact amplitude nadert, geldt:

$$G = \frac{g^2}{4\sqrt{2}M_W^2}$$

De grootheden g , M_W , M_Z , θ_w en e zijn onderling aan elkaar gerelateerd, maar hun absolute waarden worden niet door de theorie voorspeld.

De theorie van de vereniging van de elektromagnetische- en zwakke wisselwerking vormt het **Standaard Model**. Een verdere vereniging van de elektrozwakke - en sterke wisselwerking vormt de **Grote Unificatie Theorie**. Hierin wordt de basis gevormd door de eis dat de natuurwetten invariant zijn onder lokale ijktransformaties van de $SU(3)_c \otimes SU(2)_L \otimes U(1)$ -symmetrie groep. Alle wisselwerkingen worden dan beschreven in termen van een enkele koppelingsconstante.

De unificerende groep G moet de $SU(3)_c \otimes SU(2)_L \otimes U(1)$ -groep omvatten; daarom moet G tenminste van rang 4 zijn. De eenvoudigste groep is dan $SU(5)$. De energie waarbij de unificatie optreedt is ongeveer 10^{15} GeV. De linksdraaiende fermionen en hun antiferionen van 1 generatie bezetten een $\bar{5}$ - en een 10-multiplet van $SU(5)$: $\bar{5}(\bar{d}_b, \bar{d}_y, \bar{d}_r, e^-, \nu_e)$ resp. $10(\bar{u}_b, \bar{u}_y, \bar{u}_r, d_b, d_y, d_r, u_b, u_y, u_r, e^+)$. In tegenstelling tot de Abelse ijktheorie $U(1)$ hebben de voortbrengers van de niet-Abelse ijktheorie $SU(5)$ alleen discrete eigenwaarden, waaronder lading, die dus gequantiseerd is. Daar de som van de eigenwaarden van de ladingsvoortbrenger voor elke representatie nul is, geldt voor het $\bar{5}$ -multiplet: $-3q_d e - e = 0 \rightarrow q_d = -\frac{1}{3}$. Hieruit volgt dat de lading van het proton en het elektron exact gelijk zijn.



Er zijn $5^2 - 1 = 24$ ijkbosonen in $SU(5)$: 8 gluonen, W^\pm , Z^0 , γ en 12 X - en Y -ijkbosonen met massa van ongeveer 10^{15} GeV, de zgn. **leptoquarks** met lading $+\frac{4}{3}(X_i)$, $+\frac{1}{3}(Y_i)$ en $-\frac{1}{3}(\bar{Y}_i)$, waarbij de i de kleurindex is. Het proton is nu niet langer meer stabiel, maar kan vervallen d.m.v. een **X-boson** via: $p \rightarrow \pi^+ + \bar{\nu}_e$ of $p \rightarrow \pi^0 + e^+$. De gemiddelde levensduur van een proton is min. ongeveer 10^{33} j.

Een theorie waarin fermionen en bosonen in 1 multiplet worden gebracht en in elkaar over kunnen gaan heet **supersymmetrie**. Bij een supersymmetrische theorie heeft elk ijkboson een fermionpartner (...ino) en elk fermion een bosonpartner (s...). In het huidige heelal is deze symmetrie verbroken. Elk deeltje bezit tevens een nieuw quantumgetal, te weten **R-pariteit**, dat nul is voor alle gewone deeltjes en ± 1 voor hun supersymmetrische tegenhangers. De grote unificatie verschuift hierbij naar rond de 10^{17} GeV. Om alle deeltjes te kunnen beschrijven zijn 11 dimensies nodig i.p.v. 4 zoals in de ART. Een theorie van meer dan 4 dimensies heet een **Kaluza-Kleintheorie**.

In supersymmetrische theorieën zitten automatisch een aantal aspecten van een quantumtheorie van de gravitatiekracht ingebouwd.

Unificatie van de gravitatiekracht met de 3 andere krachten zou plaats kunnen vinden bij de Planckenergie van 10^{19} GeV. Als een supersymmetrie geïjkt wordt, dan ontstaat er een spin-2 ijkveld en een supersymmetrisch spin- $1\frac{1}{2}$ ijkveld. Het spin-2 ijkveld stelt het gravitatieveld voor met als velddeeltje het spin-2 **graviton**. Een $N = 1$ supersymmetrische theorie heet **supergravitatie**. Deze is echter niet renormaliseerbaar en de hoogste symmetrie $O(8)$ is te klein om de symmetrie van het Standaard Model te incorporeren.

Elke *lokale* quantum gravitatie veldtheorie loopt stuk t.g.v. quantumfluctuaties op de Planckschaal van ongeveer 10^{-35} m, waardoor de theorie niet renormaliseerbaar is. Als deeltjes echter niet als puntdeeltjes worden opgevat maar als 1-dimensionale lijndeeltjes (snaren ofwel strings), dan blijken 10- (en 26-) dimensionale supersymmetrische **stringtheorieën** wel renormaliseerbaar te zijn. Hierbij zijn de 6 extra dimensies compact, d.w.z. deze vormen gesloten krommen met een afmeting van 10^{-35} m of kleiner. De ART blijkt nu uit de stringtheorie af te leiden te zijn. Zonder de ART is de stringtheorie zelfs inconsistent. De stringtheorie mist wel een onderliggend fysisch principe. De eis van 10 dimensies volgt uit het feit dat de in de stringtheorie optredende anomalieën met een vermenigvuldigingsfactor $(N - 10)$ voorkomen en alleen geëlimineerd kunnen worden als $N = 10$. Het getal 10 volgt uit de gegeneraliseerde modulaire Ramanujanfunctie. Deze heeft 8 modes die elk overeenkomen met een bepaalde trilling van een string. Daar in een relativistische theorie er nog 2 extra dimensies nodig zijn om alle trillingen in rekening te kunnen brengen, is het totaal aantal dimensies 10. De niet-gegeneraliseerde Ramanujanfunctie kent 24 nodes en geeft dus 26 dimensies. Alleen in

10 - en 26 dimensies kan een string zelfconsistent bestaan.

De zgn. **heterotische string** is een gesloten string met 2 typen trillingen, te weten rechtsom in 10 dimensies en linksom in 26 dimensies waarvan er 16 zijn opgerold. De 16-dimensionale ruimte heeft een $E(8) \times E(8)$ -symmetrie die groot genoeg is om alle andere symmetrieën te omvatten. Nu kan een hyperoppervlak in een N -dimensionale ruimte bij verschillende frequenties trillen hetgeen overeenkomt met een bepaalde $SU(N)$ -symmetrie. Als de golf functie van een deeltje over een dergelijk oppervlak trilt, dan neemt het de $SU(N)$ -symmetrie over, ofwel de $SU(N)$ -symmetrieën van de deeltjes vloeien voort uit de symmetrie van de N -dimensionale ruimte.

Een probleem is wel dat de stringtheorie teveel (miljoenen) oplossingen toelaat en dat de klassieke storingsrekening niet toepasbaar is.

Speciale Relativiteitstheorie

Het **scalarprodukt** van 2 vectoren A^μ en B_μ wordt gedefinieerd als:

$$A^\mu B_\mu = A^0 B^0 - A^1 B^1 - A^2 B^2 - A^3 B^3$$

Als de lichtsnelheid $c = 1$ wordt gesteld, dan is het 4-dimensionale ruimtetijdinterval te schrijven als:

$$d\tau^2 = dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$$

Een **viervector** is een grootheid met 4 componenten van de vorm $x^\mu \mid \mu = 0, 1, 2, 3$. Het ruimtetijdinterval is nu te schrijven als:

$$d\tau^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$$

Hierin is $\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ de **metrische tensor**.

De covariante componenten zijn te schrijven als: $x_\mu = \eta_{\mu\nu} x^\nu \Leftrightarrow$

$$x_0 = ct \wedge x_1 = -x \wedge x_2 = -y \wedge x_3 = -z$$

De contravariante componenten zijn te schrijven als: $x^\nu = \eta^{\nu\mu} x_\mu \Leftrightarrow$

$$x^0 = ct \wedge x^1 = x \wedge x^2 = y \wedge x^3 = z$$

Hierbij is $\eta_{\mu\nu} = \eta^{\nu\mu}$.

Het ruimtetijdinterval is nu te schrijven als:

$$d\tau^2 = dx^\mu dx_\nu$$

Als O en O' t.o.v. elkaar een eenparig rechtlijnige beweging uitvoeren waarbij O' een snelheid \vec{v} heeft t.o.v. O , met de X - en X' -as langs \vec{v} en $Y \parallel Y'$ en $Z \parallel Z'$ en op $t = 0$ O en O' samenvallend, dan geldt " $O\vec{O}' = \vec{v}t$ "

A;s A een voorwerp is met positievector $\vec{OA} = \vec{r}$ resp. $\vec{O'A} = \vec{r}'$, dan geldt: $\vec{OA} = \vec{OO}' + \vec{O'A}$, ofwel: $\vec{r} = \vec{v}t + \vec{r}' \rightarrow$

Galileitransformaties:

$$\begin{aligned} x' &= x - vt \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= t \end{aligned}$$

Differentiatie naar t geeft de voor snelheid van A :

$$\begin{aligned} V'_{x'} &= V_x - v \\ V'_{y'} &= V_y \\ V'_{z'} &= V_z \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{r} = \vec{v}t + \vec{r}' \rightarrow \vec{V} = \vec{v} + \vec{V}' \rightarrow \frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{d\vec{V}'}{dt} \\ \vec{a}_A \text{ tov } O = \frac{d\vec{V}}{dt} \quad \wedge \quad \vec{a}_A \text{ tov } O' = \frac{d\vec{V}'}{dt} \end{aligned} \right\} \rightarrow$$

$$\boxed{\vec{a} = \vec{a}'}$$

De versnelling van een voorwerp is dus voor alle waarnemers die eenparig rechtlijnig t.o.v. elkaar bewegen hetzelfde.

Als op $t = 0$ een foton uit $O = O'$ vertrekt, dan zal een waarnemer in O na een tijd $t = t$ het foton in A zien aankomen, met $r = ct \rightarrow x^2 + y^2 + z^2 = c^2t^2$

Een waarnemer in O' ziet het foton in A aankomen na een tijd $t = t'$, met $r' = ct' \rightarrow x'^2 + y'^2 + z'^2 = c^2t'^2$

Als de lichtsnelheid invariant is en men een lineair verband postuleert tussen x en x' en tussen t en t' van de vorm $x' = k(x - vt)$ resp. $t' = a(t - bx)$, dan geeft substitutie hiervan (met $y' = y$ en $z' = z$): $k^2(x^2 - 2xvt + v^2t^2) + y^2 + z^2 = c^2a^2(t^2 - 2tbx + b^2x^2) \Leftrightarrow$

$$(k^2 - b^2a^2c^2)x^2 - 2(k^2v - ba^2c^2)xt + y^2 + z^2 = \left[a^2 - \frac{k^2v^2}{c^2} \right] c^2t^2 \rightarrow$$

$$k^2 - b^2a^2c^2 = 1 \quad \wedge \quad k^2v - ba^2c^2 = 0 \quad \wedge \quad a^2 - \frac{k^2v^2}{c^2} = 1 \rightarrow$$

$$k = a = \frac{1}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \quad \wedge \quad b = \frac{v}{c^2} \rightarrow$$

Lorentztransformaties:

$$\boxed{\begin{aligned} x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= \frac{t - (vx/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \end{aligned}}$$

De scalar $A^\mu B_\mu$ en $d\tau^2$ zijn invariant onder een Lorentztransformatie.

Differentiatie naar t geeft:

$$dx' = \frac{dx - vdt}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} = \frac{V_x - v}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} dt \quad \wedge \quad dy' = dy \quad \wedge \quad dz' = dz \quad \wedge$$

$$dt' = \frac{dt - (vdx/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} = \frac{1 - (vV_x/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} dt \rightarrow$$

Lorentztransformaties voor snelheden:

$$\boxed{\begin{aligned} V_{x'}' &= \frac{V_x - v}{1 - (vV_x/c^2)} \\ V_{y'}' &= \frac{V_y \sqrt{1 - (v^2/c^2)}}{1 - (vV_x/c^2)} \\ V_{z'}' &= \frac{V_z \sqrt{1 - (v^2/c^2)}}{1 - (vV_x/c^2)} \end{aligned}}$$

Als een voorwerp in de X -richting beweegt, dan geldt:

$$V_x = V \wedge V_y = V_z = 0 \wedge V'_{x'} = V' \wedge V'_{y'} = V'_{z'} = 0 \rightarrow$$

$$V'_{x'} = V' = \frac{V - v}{1 - (vV/c^2)} \rightarrow V = \frac{V' + v}{1 - (vV'/c^2)}$$

Hieruit volgt voor de relativistische formule voor het optellen van 2 snelheden u en v :

$$w = \frac{u + v}{1 + (uv/c^2)}$$

Voor $u = v = c$ volgt hieruit dat $w = c$, d.w.z. de max. waarneembare snelheid is de lichtsnelheid.

Als een voorwerp evenwijdig aan de X -as in rust is t.o.v. O' en een lengte heeft van $L' = x'_b - x'_a$ en t.o.v. O beweegt met een snelheid v met lengte $L = x_b - x_a$ dan geldt:

$$x'_a = \frac{x_a - vt}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \wedge x'_b = \frac{x_b - vt}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \rightarrow x'_b - x'_a = \frac{x_b - x_a}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}$$

Lengtecontractieformule:

$$L = \sqrt{1 - (v^2/c^2)} L'$$

Daar $\sqrt{1 - (v^2/c^2)} < 1$, is $L < L'$, d.w.z. bewegende voorwerpen lijken korter.

Als 2 gebeurtenissen op dezelfde positie x' plaatsvinden t.o.v. O' , dan geldt voor het tijdsinterval: $T' = t'_b - t'_a$

Als O' een snelheid v heeft t.o.v. O in de richting van de X -as, dan geldt voor O : $T = t_b - t_a$

De inverse van $t' = \frac{t - (vx/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}$ is $t = \frac{t' + (vx'/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \rightarrow$

$$t_a = \frac{t'_a + (vx'/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \wedge t_b = \frac{t'_b + (vx'/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \rightarrow t_b - t_a = \frac{t'_b - t'_a}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}$$

Tijddilatatieformule:

$$T = \frac{T'}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}$$

Daar $1/\sqrt{1 - (v^2/c^2)} > 1$, is $T > T'$, d.w.z. processen duren langer als ze plaatsvinden in een stelsel dat t.o.v. de waarnemer beweegt.

Speciale relativiteitsprincipe: Alle natuurwetten moeten dezelfde zijn voor alle inertiaalwaarnemers die met constante snelheid t.o.v. elkaar bewegen.

Dit betekent dat de lichtsnelheid voor alle inertiaalwaarnemers dezelfde moet zijn, hetgeen alleen mogelijk is als men de Lorentztransformaties i.p.v. de Galileitransformaties toepast.

Experimenteel blijkt dat de massa m van een voorwerp toeneemt als zijn snelheid toeneemt:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}$$

Hierin is m_0 de **rustmassa** van het voorwerp, d.w.z. de massa als het voorwerp in rust is.

Voor de **relativistische impuls** \vec{p} geldt dan:

$$\vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}}$$

Voor de kracht \vec{F} geldt nu:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \right)$$

Als een voorwerp een rechtlijnige beweging uitvoert, dan geldt:

$$F = \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 v}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \right) = \frac{m_0}{[1 - (v^2/c^2)]^{3/2}} \cdot \frac{dv}{dt} = \frac{m}{1 - (v^2/c^2)} \cdot \frac{dv}{dt} \neq ma$$

Voor een eenparige cirkelbeweging geldt: $|\vec{v}| = \text{constant} \rightarrow$

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \right) = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} = m \frac{\vec{v}}{dt} = ma_N$$

Algemeen geldt voor een kromlijnige beweging:

$$F_T = \frac{m}{1 - (v^2/c^2)} a_T \quad \wedge \quad F_N = ma_N$$

Daar de coëfficiënten van a_T en a_N verschillen, zijn de kracht en de versnelling bij hoge snelheden dus niet gelijkgericht.

Voor de kinetische energie T van een relativistisch deeltje geldt:

$$T = \int_0^s F ds = \int_0^s \frac{d}{dt}(mv) ds = \int_0^{mv} v d(mv) = mv^2 - \int_0^v m v dv = \frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} - \int_0^v \frac{m_0 v dv}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \Leftrightarrow$$

$$T = \frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} + m_0 c^2 \sqrt{1 - (v^2/c^2)} - m_0 c^2 \rightarrow$$

$$T = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} - m_0 c^2$$

Substitutie van $m = m_0 / \sqrt{1 - (v^2/c^2)}$ geeft:

$$T = (m - m_0) c^2$$

Hierin is $m_0 c^2$ de **rustenergie** van het deeltje.

Algemeen geldt dat met een energieverandering ΔE een massaverandering Δm overeenkomt:

$$\Delta E = (\Delta m) c^2$$

$v \approx c \Rightarrow p \approx mc \rightarrow$

$$T = pc - m_0c^2$$

Voor de totale energie E (excl. potentiële energie) geldt nu $E = T + m_0c^2 \rightarrow$

$$E = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} = mc^2$$

Substitutie van $m = \vec{p}/\vec{v}$ geeft:

$$E = \frac{\vec{p}c^2}{\vec{v}}$$

Substitutie van $v^2 = \frac{p^2c^4}{E^2}$ in $E^2 = \frac{m_0^2c^4}{1 - (v^2/c^2)}$ geeft de **energie-impulsvergelijking**:

$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$$

Voor het foton geldt $m_0 = 0 \rightarrow$

$$E_{foton} = pc$$

Substitutie in $v = pc^2/E$ geeft dan $v_{foton} = c$.

Substitutie van $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ in $p^2 - (E^2/c^2) = -m_0c^2$ geeft voor een waarnemer O :

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - (E^2/c^2) = -m_0c^2$$

Voor een waarnemer O' die met snelheid v t.o.v. O beweegt geldt dan:

$$p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2 - (E'^2/c^2) = -m_0c^2$$

Volgens het relativiteitsprincipe moet dan gelden:

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - (E^2/c^2) = p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2 - (E'^2/c^2)$$

Dit is analoog aan de vergelijkingen voor de Lorentztransformaties als

$$p_x \equiv x \wedge p_y \equiv y \wedge p_z \equiv z \wedge ct \equiv E/c \rightarrow$$

De energie-impulsvergelijking is dus invariant voor inertiaalwaarnemers als geldt:

$$\begin{aligned} p_x' &= \frac{p_x - (vE/c^2)}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \\ p_y' &= p_y \\ p_z' &= p_z \\ E' &= \frac{E - vp_x}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \end{aligned}$$

De **energie-impulsviervector** p^μ wordt nu gedefinieerd als:

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right)$$

Uit $p_\mu = \left(\frac{E}{c}, -p_x, -p_y, -p_z \right)$ volgt:

$$p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2$$

De **viërsnelheid** u^μ wordt gedefinieerd als: $u^\mu = \left(\frac{c}{\gamma}, \frac{dx/dt}{\gamma}, \frac{dy/dt}{\gamma}, \frac{dz/dt}{\gamma} \right) \Big| \gamma = \sqrt{1 - (v^2/c^2)}$

$$dT' = dT \sqrt{1 - (v^2/c^2)} \Leftrightarrow d\tau = dt \sqrt{1 - (v^2/c^2)} \rightarrow u^\mu = \left(c \frac{dt}{d\tau}, \frac{dx}{d\tau}, \frac{dy}{d\tau}, \frac{dz}{d\tau} \right) \rightarrow$$

$$\boxed{u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}}$$

Hieruit volgt:

$$\boxed{u_\mu u^\mu = c^2 \wedge p^\mu = m_0 u^\mu}$$

Uit $p_\mu p^\mu = m_0 u_\mu m_0 u^\mu$ volgt:

$$\boxed{p_\mu p^\mu = m_0^2 c^2}$$

De **vierdimensionale covariante gradient operator** ∂_μ wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)}$$

∂_μ opereert op een scalarveld $\Phi \Rightarrow$ vectorveld $\partial_\mu \Phi$

∂_μ opereert op een vectorveld $B_\nu \Rightarrow$ tensorveld $\partial_\mu B_\nu$

∂_μ opereert op een tensorveld $F_{\alpha\beta} \Rightarrow$ tensorveld $\partial_\mu F_{\alpha\beta}$

De **vierdimensionale contravariante gradient operator** ∂^μ wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\partial^\mu = \eta^{\mu\nu} \partial_\nu = \left(\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\partial}{\partial z} \right)}$$

De **D'Alembert operator** ofwel **golfoperator** $\partial_\mu \partial^\mu$ wordt gedefinieerd als het 4-dimensionale analogon van de Laplace operator:

$$\boxed{\partial_\mu \partial^\mu = \left(\frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2}, -\frac{\partial^2}{\partial x^2}, -\frac{\partial^2}{\partial y^2}, -\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}$$

De **vierdimensionale Laplacevergelijking** wordt dan:

$$\boxed{\partial_\mu \partial^\mu \Phi(t, \vec{x}) = 0}$$

Stel: $\square = \partial_\mu \partial^\mu \rightarrow$ **Vierdimensionale golfvergelijking**:

$$\boxed{\square \Phi(t, \vec{x}) = \frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial^2 \Phi(t, \vec{x})}{\partial t^2} - \nabla^2 \Phi(t, \vec{x})}$$

Algemene Relativiteitstheorie

Stel: $S_N : (x^1, \dots, x^N) \mid 0 < N < \infty$ is een hyperruimte.

Voor de transformatievergelijkingen die (x^1, \dots, x^N) aan $(\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^N)$ koppelen geldt dan:
 $\bar{x}^r = f_r(x^1, \dots, x^N) \mid r = 1, 2, \dots, N$

Stel: $f_r = \bar{x}^r \rightarrow \bar{x}^r = \bar{x}^r(x^1, \dots, x^N) \rightarrow d\bar{x}^r = \frac{\partial \bar{x}^r}{\partial x^1} dx^1 + \dots + \frac{\partial \bar{x}^r}{\partial x^N} dx^N = \sum_{s=1}^N \frac{\partial \bar{x}^r}{\partial x^s} dx^s \Leftrightarrow$

$$\begin{pmatrix} d\bar{x}^1 \\ \vdots \\ d\bar{x}^N \end{pmatrix} = \bar{J} \begin{pmatrix} dx^1 \\ \vdots \\ dx^N \end{pmatrix}, \text{ met } \bar{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^1} & \dots & \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^N} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \bar{x}^N}{\partial x^1} & \dots & \frac{\partial \bar{x}^N}{\partial x^N} \end{pmatrix} \equiv \left(\frac{\partial \bar{x}^r}{\partial x^s} \right) \mid r, s = 1, 2, \dots, N$$

$\bar{J} \neq 0 \Rightarrow x^s = x^s(\bar{x}^1, \dots, \bar{x}^N) \mid s = 1, 2, \dots, N$

Een **affiene ruimte** is een intrinsiek gekromde N -dimensionale ruimte.

Een **Riemannruimte** R_N is een hyperruimte met een metriek ofwel elementair afstandselement.

In S_3 geldt: $P(\bar{x}^1, \bar{x}^2, \bar{x}^3) \wedge Q(\bar{x}^1 + d\bar{x}^1, \bar{x}^2 + d\bar{x}^2, \bar{x}^3 + d\bar{x}^3) \Rightarrow d^2P(P, Q) = ds^2 = (d\bar{x}^1)^2 + (d\bar{x}^2)^2 + (d\bar{x}^3)^2$

$$(d\bar{x}^r)^2 = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \left(\frac{\partial \bar{x}^r}{\partial x^m} \cdot \frac{\partial \bar{x}^r}{\partial x^n} \right) dx^m dx^n \rightarrow$$

$$ds^2 = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \left(\frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^m} \cdot \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^n} + \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^m} \cdot \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^n} + \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^m} \cdot \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^n} \right) dx^m dx^n$$

Stel: $g_{mn} = g_{nm} = \left(\frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^m} \cdot \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^n} + \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^m} \cdot \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^n} + \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^m} \cdot \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^n} \right) \rightarrow ds^2 = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 g_{mn} dx^m dx^n$

Algemeen geldt voor S_N voor de **metrische vorm** ofwel **metriek** ofwel het **lijnelement** ds^2 :

$$ds^2 = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N g_{mn} dx^m dx^n$$

De N^2 g_{mn} 's heten de **metrische coëfficiënten** en vormen de componenten van de **metrische tensor**.

Sommatieconventie: als een index zowel boven als onder voorkomt, moet er over deze index gesommeerd worden.

Het lijnelement is nu te schrijven als:

$$ds^2 = g_{mn} dx^m dx^n$$

$S_3 : ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \rightarrow g_{11} = g_{22} = g_{33} = 1 \wedge g_{mn} = 0 \mid m \neq n$

Het lijnelement is *invariant*, d.w.z. onafhankelijk van het gebruikte coördinatenstelsel.

In bolcoördinaten geldt: $x = r \sin \nu \cos \varphi \wedge y = r \sin \nu \sin \varphi \wedge z = r \cos \nu \rightarrow$

$$\begin{cases} dx = \sin \nu \cos \varphi dr + r \cos \nu \cos \varphi d\nu - r \sin \nu \sin \varphi d\varphi \\ dy = \sin \nu \sin \varphi dr + r \cos \nu \sin \varphi d\nu + r \sin \nu \cos \varphi d\varphi \\ dz = \cos \nu dr - r \sin \nu d\nu \end{cases}$$

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\nu^2 + r^2 \sin^2 \nu d\varphi^2$$

Hieruit volgt voor de metrische componenten:

$$g_{rr} = 1 \wedge g_{\nu\nu} = r^2 \wedge g_{\varphi\varphi} = r^2 \sin^2 \nu \wedge g_{mn} = 0 \mid m \neq n$$

Voor elke Euclidische N -dimensionale ruimte geldt: $g_{mn} = 1 \mid m = n$ en $g_{mn} = 0 \mid m \neq n$, en is $ds^2 \geq 0$.

Als $ds^2 = g_{mn} dx^m dx^n$ van een ruimte S voor geen enkele coördinatentransformatie herleid kan worden tot $ds^2 = (dx^n)^2$ over de gehele ruimte S , dan is S *intrinsiek gekromd*.

In niet-Euclidische ruimten kan ds^2 **indefinieet** zijn, d.w.z. $ds^2 = 0$ met niet alle dx -en nul (**nulverplaatsing**), of ds^2 pos. voor sommige dx -en en neg. voor andere dx -en.

In de **Minkovski-tijdruimte** wordt de t -as (die loodrecht op de 3 ruimte-assen staat) vermenigvuldigd met $c \rightarrow ct$ wordt in ruimte-eenheid uitgedrukt; vermenigvuldiging met i geeft ict , welke (imaginaire) as per definitie loodrecht op de reële ruimte-assen staat.

Zo ontstaat het **Minkovski-diagram**: $(ict, x, y, z) \rightarrow$

$$\text{Afstand tussen 2 punten: } (\Delta s)^2 = (ic\Delta t)^2 + (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2 \Leftrightarrow$$

$$ds^2 = -c^2 dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2$$

Stel: $c = 1 \rightarrow$

$$ds^2 = -dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2$$

Dit is een **pseudo-Euclidische** indefiniete tijdruimte, daar $g_{mn} = \pm 1 \mid m = n$.

De **signatuur** van ds^2 wordt bepaald door de volgorde van de algebraïsche tekens; $-, +, +, + \rightarrow$

$ds^2 > 0 \Rightarrow$ ruimte-achtige intervallen

$ds^2 < 0 \Rightarrow$ tijdachtige intervallen

$ds^2 = 0 \Rightarrow$ lichtachtige intervallen

(Bij een signatuur $+, +, +, -$ is dit omgekeerd.)

In de ART geldt dat de componenten van de metrische tensor overeenkomen met de potentialen van het gravitatieveld, en dat de affiniteiten (afgeleiden van de metrische tensor) overeenkomen met de veldsterkte van het gravitatieveld.

De metriek van R_4 is evenredig aan de gravitatie, die evenredig is aan (massa + energie), die evenredig is aan de energie-impulstensor.

Een reëel gravitatieveld is alleen in een zeer beperkt gebied van de ruimte te benaderen d.m.v. een homogeen statisch gravitatieveld \rightarrow

Equivalentieprincipe: In elk punt P van R_4 van een willekeurig gravitatieveld kan men een lokaal inertiaalstelsel oprichten zodat in een klein gebied rond P de gravitatiekrachten nul zijn ("wegtransformeren" van de gravitatiekracht). In een dergelijk gebied geldt dan de SRT.

Algemene covariantie: Een fysische vergelijking is juist in aanwezigheid van de gravitatie als:

1. De vergelijking algemeen covariant is, d.w.z. dezelfde blijft onder een coördinatentransformatie $x^r \rightarrow \bar{x}^r$
2. De vergelijking juist blijft als de gravitatie afwezig is.

Hieruit volgt dat de vergelijkingen inclusief gravitatie op te stellen zijn door de analoge vergelijkingen uit de SRT algemeen covariant te maken.

Bij een verplaatsing van een vector V van punt A naar B kan V , onafhankelijk van het coördinatenstelsel, een verandering W_1 krijgen, alsmede een verandering W_2 krijgen die wél van het coördinatenstelsel afhangt. Voor de totale verandering W t.g.v. de verplaatsing geldt dan: $W = W_1 + W_2$

De **covariante afgeleide** wordt nu gedefinieerd als:

$$\boxed{W_1 = W - W_2}$$

Alle wisselwerkingen m.u.v. de gravitatie staan in verband met W_1 ; alleen de gravitatie staat i.v.m. W_2 . In de ART is een gravitatieveld géén veld op zich, maar intrinsiek verbonden met de ruimte zelf.

Stel: kromme $\gamma : x^i = x^i(s) \mid s$ de booglengte

dx^i zijn de componenten van een contravariante vector, ds is een invariant $\rightarrow dx^i/ds$ is een contravariante vector in $P(x^i)$ met grootte - in een R_N met metriek $ds = (g_{ij}dx^i dx^j)^{1/2}$ - :

$$\left(g^{ij} \frac{dx^i}{ds} \cdot \frac{dx^j}{ds} \right)^{1/2} = 1; \frac{dx^i}{ds} \text{ zijn dus de componenten van een eenheidsvector rakend aan } \gamma.$$

Een **geodeet** wordt gedefinieerd als een kromme waarvan de raaklijnen in elk punt dezelfde richting hebben.

Stel: een eenheidsraakvector wordt parallel verplaatst van punt $P(x^i)$ naar punt $P'(x^i + dx^i)$

$$\delta B^k = -\Gamma_{ij}^k B^i dx^j = -\left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} B^i dx^j \rightarrow \delta \left(\frac{dx^i}{ds} \right) = -\left\{ \begin{matrix} i \\ kj \end{matrix} \right\} \frac{dx^k}{ds} dx^j = -\left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} \frac{dx^j}{ds} \cdot \frac{dx^k}{ds} ds \rightarrow$$

$$\text{componenten in } P': \frac{dx^i}{ds} + \delta \left(\frac{dx^i}{ds} \right) = \frac{dx^i}{ds} - \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} \frac{dx^j}{ds} \cdot \frac{dx^k}{ds} ds$$

$$\text{Tevens geldt voor de componenten in } P': \left(\frac{dx^i}{ds} \right)_{s+ds} = \frac{dx^i}{ds} + \frac{d^2 x^i}{ds^2} ds \rightarrow$$

Bewegingsvergelijkingen voor een deeltje langs γ :

$$\boxed{\frac{d^2 x^i}{ds^2} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} \frac{dx^j}{ds} \cdot \frac{dx^k}{ds} = 0}$$

$$\text{Stel: } u^l = \frac{dx^l}{ds} \rightarrow$$

$$\boxed{\frac{du^i}{ds} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} u^j u^k = 0}$$

Deze vergelijkingen gelden niet voor een foton, daar dan $ds = 0$.

Stel: $x^i(p) \rightarrow dx^i/dp$ zijn dan de componenten van een contravariante raakvector met grootte nul: $g_{ij} \frac{dx^i}{dp} \cdot \frac{dx^j}{dp} = 0$

De kromme is nu een **nulgeodeet**:

$$\frac{d^2x^i}{dp^2} + \begin{Bmatrix} i \\ jk \end{Bmatrix} \frac{dx^j}{dp} \cdot \frac{dx^k}{dp} = 0$$

Vrije deeltjes volgen altijd een geodetische baan; de eigenschappen van een dergelijke baan zijn onafhankelijk van de deeltjes. Hieruit volgt dat zware massa gelijk is aan trage massa. Een homogeen statisch gravitatieveld is dan equivalent met een versnelde beweging. Dit geldt *niet* voor een reëel veld, daar dat inhomogeen is. Een reëel veld kan dus niet weggetransformeerd worden d.m.v. een versneld coördinatenstelsel. Wel geldt dat in elk punt van een gravitatieveld men een lokaal inertiaalstelsel kan oprichten zo, dat in een voldoende klein gebied rond dit punt de natuurwetten dezelfde vorm aannemen als in een onversneld stelsel bij afwezigheid van gravitatie (SRT).

Een lichaam dat alleen aan inwendige krachten onderworpen is, wordt beschreven door een spanningstensor. Als $d\vec{F}$ de kracht is die het lichaam aan de ene kant van een oppervlakte-element dS uitoefent op de andere kant van dS , dan geldt voor de i -de component van $d\vec{F}$: $d\vec{F}_i = \sigma_{ij} n^j dS$

Hierin is n^j de grootte van de projectie van de naar buiten gerichte eenheids normaalvector \vec{n} op de j -de coördinaatas, en σ_{ij} de spanningstensor. In R_3 is σ_{ij} te schrijven als:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

De diagonaalelementen vormen orthogonale spanningscomponenten, d.w.z. ze staan loodrecht op het corresponderende oppervlakte-element van een elementaire kubus in het voorwerp; de overige elementen zijn schuifspanningscomponenten die tanentieel werken.

Als het lichaam in evenwicht is, dan mag er geen koppel optreden; hieruit volgt dat $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, waaruit volgt dat σ te diagonaliseren is, hetgeen inhoudt dat de coördinaatassen zo gekozen kunnen worden dat $\sigma_{ij} = 0$ voor $i \neq j$. Als het lichaam tevens isotroop is, dan geldt: $\sigma_{ij} = p$ voor $i = j \rightarrow$

$$\sigma = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} \Leftrightarrow \sigma_{ij} = p\delta_{ij} \rightarrow dF_i = p\delta_{ij} n^j dS = pn^i dS$$

In R_4 (ongekromd) heeft σ_{ij} 4 diagonaalelementen; de 3 ruimtecomponenten vormen de drukken p , en de tijdcomponent vormt de energiedichtheid ε :

$$\tilde{T}_{11} = \tilde{T}_{22} = \tilde{T}_{33} = p \wedge \tilde{T}_{j0} = 0 \text{ voor } j = 1, 2, 3 \wedge \tilde{T}_{00} = \varepsilon.$$

Als er geen schuifkrachten zijn, dan is \tilde{T} te schrijven als:

$$\tilde{T}_{mn} = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p \end{pmatrix}$$

\tilde{T}_{mn} heet de **energie-impulstensor**.

De **Minkovski-tensor** η_{mn} van de SRT wordt gedefinieerd als:

$$\eta_{mn} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Voor een bewegend lichaam waaraan een coördinatenstelsel is verbonden geldt voor de 4-snelheid (u^0, u^1, u^2, u^3) : $u^0 = 1 \wedge u^j = 0$ voor $j = 1, 2, 3$. Er geldt dan:

$$\eta_{mn}u^m u^n = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} u^0 u^0 = -1$$

$$\varepsilon u_m u_n = \varepsilon \cdot 1 \cdot 1 = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$p\eta_{mn} = \begin{pmatrix} -p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p \end{pmatrix} \wedge pu_m u_n = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Uit de laatste 4 vergelijkingen volgt: $\tilde{T}_{mn} = \varepsilon u_m u_n + p\eta_{mn} + pu_m u_n \rightarrow$

$$\boxed{\tilde{T}_{mn} = (\varepsilon + p)u_m u_n + p\eta_{mn}}$$

Deze vergelijking geldt ook voor niet-meebewegende coördinatenstelsels.

$\tilde{T}_{j0} = \tilde{T}_{0j}$ voor $j = 1, 2, 3$ zijn de impulsdichtheden ofwel de energiedichtheidsfluxen door de coördinaatvlakken. Voor een meebewegende waarnemer is u_j voor $j = 1, 2, 3$ nul, en dus $\tilde{T}_{j0} = 0 \wedge \tilde{T}_{11} = \tilde{T}_{22} = \tilde{T}_{33} = p \wedge \tilde{T}_{00} = \varepsilon$.

In een stromende vloeistof zal er door elk vlak van een infinitesimale kubus met zijde l energie in- en uitstromen. Wegens de Wet van behoud van energie zal de som van de in- en uitstromende energie gelijk moeten zijn aan de energieverandering in de kubus \rightarrow

$$l^2\{\tilde{T}_{01}(x=0) - \tilde{T}_{01}(x=l)\} + l^2\{\tilde{T}_{02}(y=0) - \tilde{T}_{02}(y=l)\} + l^2\{\tilde{T}_{03}(z=0) - \tilde{T}_{03}(z=l)\} = l^3 \frac{\partial \tilde{T}_{00}}{\partial t} \Leftrightarrow$$

$$\frac{\tilde{T}_{01}(x=0) - \tilde{T}_{01}(x=l)}{l} + \frac{\tilde{T}_{02}(y=0) - \tilde{T}_{02}(y=l)}{l} + \frac{\tilde{T}_{03}(z=0) - \tilde{T}_{03}(z=l)}{l} = \frac{\partial \tilde{T}_{00}}{\partial t} \rightarrow$$

$$\boxed{\frac{\partial \tilde{T}_{00}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{T}_{01}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{T}_{02}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{T}_{03}}{\partial z} = 0}$$

Hieruit volgt:

$$\boxed{\tilde{T}_{00,0} + \tilde{T}_{01,1} + \tilde{T}_{02,2} + \tilde{T}_{03,3} = \tilde{T}_{0n,n} = 0}$$

Dit stelt dus de Wet van behoud van energie voor.

Analoog geldt voor de Wet van behoud van impuls:

$$\boxed{\tilde{T}_{mm,n} = 0}$$

Voor de Wet van behoud van energie én impuls geldt dan:

$$\boxed{\tilde{T}_{mn,n} = 0 \mid m, n = 0, 1, 2, 3}$$

Hieruit volgt dan voor de ART:

$$\boxed{T_{ik;k} = 0}$$

De covariante divergentie van T_{ik} is dus nul voor gesloten systemen.

De covariante vergelijking voor \tilde{T}_{mn} wordt:

$$\boxed{T_{mn} = (\varepsilon + p)u_m u_n + p g_{mn}}$$

Hierin is $g_{mn}u^m u^n = -1$.

De behoudswet $T_{ik;k} = 0$ heeft betrekking op de massa én het gravitatieveld. Om de gravitatievergelijkingen van Einstein te bepalen is een tensor nodig die de energie en materie in de ruimte bepaalt en die gerelateerd kan worden aan de metrische tensor, welke de tijdruimte structuur bepaalt. Deze tensor is de covariante veralgemening T_{mn} van \tilde{T}_{mn} .

Als y^i de coördinaten zijn van een orthonormaal Cartesisch inertiaalstelsel in een klein gebied rond een punt P van de tijdruimte, x^i de algemene coördinaten rond P , en \tilde{T}_{rs} de componenten van \tilde{T} in P uitgedrukt in y^i , dan geldt voor de componenten van T_{mn} in x^i :

$$T_{mn} = \frac{\partial y^r}{\partial x^m} \cdot \frac{\partial y^s}{\partial x^n} \tilde{T}_{rs}$$

$$\text{In } y^i \text{ geldt: } \tilde{T}_{rs} = \tilde{T}^{rs} = \tilde{T}_s^r \rightarrow T^{mn} = \frac{\partial y^m}{\partial x^r} \cdot \frac{\partial y^n}{\partial x^s} \tilde{T}_{rs} \wedge T^m_n = \frac{\partial y^m}{\partial x^r} \cdot \frac{\partial y^s}{\partial x^n} \tilde{T}_{rs}$$

Dit geldt voor elk punt in R_4 , zodat er dus sprake is van een energie-impulstensorveld in x^i . $T^{mn}_{;n} = 0 \rightarrow$ In y^i wordt dit: $\tilde{T}_{mn,n} = 0 \rightarrow$ Als $T^{mn}_{;n} = 0$ geldig is in y^i , is ze tevens geldig in x^i .

Het verband tussen T^{mn} en g^{mn} moet dus zo zijn dat $T^{mn}_{;n} = 0$ er uit volgt.

In de klassieke mechanica geldt voor de gravitatiepotentiaal V : $V = -Gm/r \rightarrow$

$\nabla^2 V = 4\pi G \rho$, met ρ de materiedichtheid.

Deze vergelijking moet een limietgeval zijn van de gravitatiewet in de ART. Verder moet T_{00} overeenkomen met de energie(=massa)dichtheid en ∇^2 met de 2-de orde afgeleiden van g^{mn} .

De Einsteintensor voldoet aan deze eisen. Dit leidt tot het poneren van de

Gravitatiewet van Einstein:

$$\boxed{R^{mn} - \frac{1}{2}g^{mn}R = K T^{mn}}$$

Hierin is K een negatieve evenredigheidsfactor die gerelateerd is aan G d.m.v. de vergelijking:

$$\boxed{K = -\frac{8\pi G}{c^4}}$$

De vergelijking van Einstein bestaat uit $4^2 = 16$ veldvergelijkingen, waarvan er 10 onafhankelijk zijn.

Er zijn een aantal equivalente formuleringen mogelijk, en wel de volgende:

$$\boxed{R_{mn} - \frac{1}{2}g_{mn}R = KT_{mn}}$$

$$g_{nl}R^{ml} - \frac{1}{2}g_{nl}g^{ml}R = K g_{nl}T^{ml} \rightarrow$$

$$\boxed{R^m_n - \frac{1}{2}\delta^m_n R = KT^m_n}$$

$$\text{Hieruit volgt: } R^m_m - \frac{1}{2}\delta^m_m R = KT^m_m \Leftrightarrow R - \frac{1}{2}NR = KT \rightarrow N = 4 \Rightarrow R = -KT \rightarrow$$

$$\boxed{R^{mn} = -K(\frac{1}{2}g^{mn}T - T^{mn})}$$

Een andere mogelijke formulering van de gravitatiewet is:

$$\boxed{R^{mn} - \frac{1}{2}g^{mn}R + \Lambda g^{mn} = KT^{mn}}$$

Hierin is Λ de **kosmologische constante**. De veldvergelijkingen zijn niet-lineair; daar het gravitatieveld zelf energie bevat (er wordt a.h.w. massa-energie overgebracht, i.t.t. het elektromagnetische veld, dat gèèn lading overbrengt). Voor *zwakke* gravitatievelden kunnen in eerste benadering de vergelijkingen echter gelineariseerd worden.

In een lege ruimte is $T^{mn} = 0 \rightarrow$

$$\boxed{R^{mn} - \frac{1}{2}g^{mn}R = 0}$$

Tevens is dan $R = 0$, zodat $R^{mn} = 0$.

Dit betekent echter niét dat deze lege ruimte Euclidisch is, daar uit $R^{mn} = 0$ niet per se volgt dat $R_{srmn} = 0$.

Voor zwakke gravitatievelden geldt: $g_{mn} = \eta_{mn} + h_{mn}$ met $|h_{mn}| \ll 1 \rightarrow$

$$\left\{ \begin{matrix} k \\ i, j \end{matrix} \right\} = g^{ij}[i, j, r] \approx \frac{1}{2}\eta^{kr} \left(\frac{\partial h_{jr}}{\partial x^i} + \frac{\partial h_{ri}}{\partial x^j} - \frac{\partial h_{ij}}{\partial x^r} \right); \text{ in geodetische coördinaten geldt dan:}$$

$$R^i_{jkl} = \frac{\partial}{\partial x^k} \left\{ \begin{matrix} i \\ jl \end{matrix} \right\} - \frac{\partial}{\partial x^l} \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} \Leftrightarrow$$

$$R^i_{jkl} \approx \frac{1}{2}\eta^{ir} \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\frac{\partial h_{lr}}{\partial x^j} + \frac{\partial h_{rj}}{\partial x^l} - \frac{\partial h_{jl}}{\partial x^r} \right) - \frac{1}{2}\eta^{ir} \frac{\partial}{\partial x^l} \left(\frac{\partial h_{kr}}{\partial x^j} + \frac{\partial h_{rj}}{\partial x^k} - \frac{\partial h_{jk}}{\partial x^r} \right) \rightarrow$$

$$R_{jk} = \frac{1}{2}\eta^{ir} \left(\frac{\partial^2 h_{ir}}{\partial x^k \partial x^j} + \frac{\partial^2 h_{rj}}{\partial x^k \partial x^i} - \frac{\partial^2 h_{ji}}{\partial x^k \partial x^r} - \frac{\partial^2 h_{kr}}{\partial x^i \partial x^j} - \frac{\partial^2 h_{rj}}{\partial x^i \partial x^k} + \frac{\partial^2 h_{jk}}{\partial x^i \partial x^r} \right) \Leftrightarrow$$

$$R_{jk} = \frac{1}{2}\eta^{ir} \left(\frac{\partial^2 h_{ir}}{\partial x^k \partial x^j} - \frac{\partial^2 h_{ji}}{\partial x^k \partial x^r} - \frac{\partial^2 h_{kr}}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{\partial^2 h_{jk}}{\partial x^i \partial x^r} \right) \rightarrow$$

$$R_{00} = \frac{1}{2}\eta^{ir} \left(\frac{\partial^2 h_{ir}}{\partial x^0 \partial x^0} - \frac{\partial^2 h_{0i}}{\partial x^0 \partial x^r} - \frac{\partial^2 h_{0r}}{\partial x^i \partial x^0} + \frac{\partial^2 h_{00}}{\partial x^i \partial x^r} \right)$$

Voor een statische massaverdeling zijn de afgeleiden naar de tijd (0-coördinaten) nul \rightarrow

$$R_{00} = \frac{1}{2} \eta^{ir} \frac{\partial^2 h_{00}}{\partial x^i \partial x^r} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{\partial^2 h_{00}}{\partial x^i \partial x^r} \Leftrightarrow$$

$$R_{00} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 h_{00}}{(\partial x^0)^2} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial^2 h_{00}}{(\partial x^1)^2} + \frac{\partial^2 h_{00}}{(\partial x^2)^2} + \frac{\partial^2 h_{00}}{(\partial x^3)^2} \right\} = \frac{1}{2} \nabla^2 h_{00}$$

$$v \ll c \Rightarrow T_{00} \gg T_{ij} \mid i, j = 1, 2, 3 \rightarrow T_{ij} \approx 0 \mid i, j \neq 0 \rightarrow R_{ij} - \frac{1}{2} g_{ij} R = 0 \Leftrightarrow R_{ij} \approx \frac{1}{2} \eta_{ij} R \rightarrow$$

$$R_{11} = R_{22} = R_{33} = \frac{1}{2} R \rightarrow R = R^r{}_r = g^{ri} R_{ir} \approx \eta^{ir} R_{ir} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} R_{ir} \Leftrightarrow$$

$$R = -R_{00} + R_{11} + R_{22} + R_{33} = -R_{00} + \frac{3}{2} R \rightarrow R_{00} = \frac{1}{2} R$$

$$R_{00} = \frac{1}{2} g_{00} R + K T_{00} \approx \frac{1}{2} \eta_{00} \cdot 2 R_{00} + K T_{00} = -R_{00} + K T_{00} \Leftrightarrow R_{00} = \frac{1}{2} K T_{00} = \frac{1}{2} K \varepsilon \rightarrow \nabla^2 h_{00} = K \varepsilon$$

$$\text{Stel: } \varepsilon = \rho c^2 \rightarrow$$

$$\boxed{\nabla^2 h_{00} = K \rho c^2}$$