① GEEF DE POSTULATEN VAN DE QUANTUM FYSICA EN STEL DE ONZEKERHEIDSRELATIE OP.

POSTULAAT 1: DE TOESTAND VAN EEN NIET-RELAT. QUANTUMSYSTEEM WORDT BESCHREVEN DOOR EEN GOLFFUNCTIE $\psi(\vec{r},t) \in L_2$

$|\psi(\vec{r},t)|^2$ IS DE AANWEZIGHEIDSWAARSCHIJNLIJKHEIDSDICHTHEID

$$\|\psi(\vec{r},t)\| = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, d^3\vec{r} = 1$$

POSTULAAT 2: ELKE MEETBARE FYSISCHE GROOTHEID Q WORDT BESCHREVEN DOOR DE HERMITISCHE OPERATOR $\hat{Q}$. VOOR DE BESCHRIJVING VAN EEN MASSAPUNT KAN ELKE MEETBARE GROOTHEID GESCHREVEN WORDEN ALS $Q(x_i, p_i)$. DE HERMITISCHE OPERATOR KAN NU GEVORMD WORDEN DOOR $Q(x_i, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_i})$

POSTULAAT 3: BIJ METING VAN EEN FYSISCHE GROOTHEID Q KRIJGT MEN STEEDS EEN VAN DE EIGENWAARDEN VAN $\hat{Q}$ ALS RESULTAAT

$$\hat{Q}|\psi\rangle = q|\psi\rangle$$

POSTULAAT 4: ALS MEN EEN MEETBARE GROOTHEID Q MEET OP EEN SYSTEEM DAT ZICH IN DE TOESTAND $|\psi\rangle$ BEVINDT, DAN WORDT DE PROBABILITEIT $P(q_n)$ OM DE EIGENWAARDE q_n TE VINDEN GEGEVEN DOOR

$P(q_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$ WAARBIJ $\hat{Q}|u_n\rangle = q_n|u_n\rangle$ IN GEVAL VAN GEEN ONTAARDING

$P(q_n) = \sum_{i=1}^{OG} |\langle u_n^{(i)}|\psi\rangle|^2$ ~~MET~~ IN GEVAL VAN ONTAARDING OG = ONTAARDINGSGRAAD

POSTULAAT 5: ALS BIJ EEN METING VAN $\hat{Q}$ OP EEN TOESTAND $|\psi\rangle$ HET RESULTAAT q_n WORDT GEVONDEN, DAN BEVINDT HET SYSTEEM ZICH DADELIJK NA DE METING IN TOESTAND $|u_n\rangle$. DIT IS DE "COLLAPSE OF THE WAVEFUNCTION"

POSTULAAT 6: DE EVOLUTIE VAN DE TOESTAND $|\psi\rangle$ IN DE TIJD WORDT BESCHREVEN DOOR DE SCHRÖDINGER VERGELIJKING

$$i\hbar \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle \quad \text{MET} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$$

POSTULAAT 7: POSTULAAT VOOR DE SYMMETRIEVOORWAARDEN VOOR UITWISSELING

VOOR IDENTISCHE DEELTJES IS DE OPLOSSING VAN DE SCHRÖDINGER VERGELIJKING SYMMETRISCH OF ANTISYMMETRISCH EN DE TOESTAND VERANDERT NOOIT BIJ TIJDSEVOLUTIE

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \pm\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

① OPSTELLEN VAN DE ONZEKERHEIDSRELATIE

COMMUTATOR : $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)\psi | (\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)\psi \rangle = \langle f|f\rangle$ met $f \hat{=} (\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)\psi$

GELIJKAARDIG : $\sigma_B^2 = \langle g|g\rangle$ met $g \hat{=} (\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)\psi$

SCHWARZ ONGELIJKHEID TOEPASSEN !

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 = \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

VOOR ELK COMPLEX GETAL $z = x + iy$ GELDT : $|z|^2 = x^2+y^2 \geq y^2$

$$y^2 = \mathrm{Im}(z)^2 = \left[\frac{1}{2i}(z-z^*)\right]^2$$

$\Rightarrow \sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left[\frac{1}{2i}(\langle f|g\rangle - \langle f|g\rangle^*)\right]^2 = \left[\frac{1}{2i}(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)\right]^2$

$\langle f|g\rangle = \langle (\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)\psi | (\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)\psi\rangle$

$= \langle\psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle\hat{B}\rangle - \hat{B}\langle\hat{A}\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle)\psi\rangle$

$= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$

ANALOOG : $\langle g|f\rangle = \langle\hat{B}\hat{A}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$

$\Rightarrow \sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left[\frac{1}{2i}(\langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}\hat{A}\rangle)\right]^2 = \left[\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right]^2$ GEGENERALISEERD ONZEKERHEIDSPRINCIPE

HEISEMBERG $[\hat{x},\hat{p}]$ UITREKENEN EN INVULLEN

$[\hat{x},\hat{p}]f(x) = \left[x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(f) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(xf)\right] = \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{df}{dx} - x\frac{df}{dx} - f\right] = i\hbar f(x)$

$\Rightarrow [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ CANONISCHE COMMUTATOR RELATIE

$\sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \left[\frac{1}{2i}i\hbar\right]^2 = \frac{\hbar^2}{4} \Rightarrow \boxed{\sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{2}}$

② LOS HET PROBLEEM OP VAN DE HARMONISCHE OSCILLATOR (MET LADDEROPERATOREN)

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

HAMILTONIAAN WORDT DUS $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2\right]$

STEL $\hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x})$ EN $\hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x})$

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}(i\hat{p} + m\omega\hat{x})(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left(\hat{p}^2 + m^2\omega^2x^2 - im\omega\underbrace{[\hat{x},\hat{p}]}_{=i\hbar}\right) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}$$

$\Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)$ ANALOOG: $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right) \Rightarrow [a_-a_+] = 1$

DE SCHRÖDINGER VERGELIJKING (TIJDSONAFH) $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ WORDT

DUS $\hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ EN $\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

<u>STELLING</u>: $\hat{a}_+$ TOEPASSEN OP EIGENFUNCTIE ψ GEEFT EEN EIGENFUNCTIE MET EIGENENERGIE $E + \hbar\omega$

<u>BEWIJS</u> $\hat{H}(\hat{a}_+|\psi\rangle) = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\hat{a}_+|\psi\rangle = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hat{a}_+\right)|\psi\rangle$

$= \hbar\omega\left(a_+(a_+a_- + 1) + \frac{1}{2}a_+\right)|\psi\rangle = \hbar\omega a_+\left(a_+a_- + 1 + \frac{1}{2}\right)|\psi\rangle$

$= a_+(E + \hbar\omega)|\psi\rangle = (E + \hbar\omega)a_+|\psi\rangle$ □

ANALOOG VOOR a_- : $\hat{H}(a_-|\psi\rangle) = (E - \hbar\omega)a_-|\psi\rangle$

$\boxed{a_+ \text{ EN } a_- \text{ ZIJN LADDEROPERATOREN}}$

a_- BLIJVEN TOEPASSEN GEEFT DE GRONDTOESTAND. HIERVOOR GELDT:

$$a_-|\psi_0\rangle = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x})\psi_0 = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega x}{\hbar}\psi_0 \Rightarrow \ln\psi_0 = -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} + \text{CONSTANTE}$$

$$\psi_0 = A e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$ GAUSSIAAN

2. NORMALISATIE VAN DE GRONDTOESTAND GEEFT

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \Rightarrow |A| = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

BEPALEN VAN DE GRONDENERGIE:

$$\hat{H}|\psi_0\rangle = \hbar\omega\left(a_+a_- + \tfrac{1}{2}\right)|\psi_0\rangle = \hbar\omega(a_+\underbrace{a_-|\psi_0\rangle}_{=0}) + \frac{\hbar\omega}{2}|\psi_0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|\psi_0\rangle$$

HERHAALDELIJK TOEPASSEN VAN DE $\hat{a}_+$ OPERATOR GEEFT DUS DE VOLGENDE ENERGIEWAARDEN: $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

$$\begin{cases} a_+|\psi_n\rangle = c_n|\psi_{n+1}\rangle \\ a_-|\psi_n\rangle = d_n|\psi_{n-1}\rangle \end{cases} \qquad \langle a_+\psi_n | a_+\psi_n\rangle = \langle \psi_n | a_-a_+\psi_n\rangle$$

$a_-^\dagger = a_+$

$$\Leftrightarrow c_n^2 \langle \psi_{n+1}|\psi_{n+1}\rangle = (n+1)\langle\psi_n|\psi_n\rangle \; *$$

$$* \; a_-a_+|\psi_n\rangle = \left(\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right)|\psi_n\rangle = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}|\psi_n\rangle + \frac{1}{2}|\psi_n\rangle = \frac{E_n}{\hbar\omega}|\psi_n\rangle + \frac{1}{2}|\psi_n\rangle = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)|\psi_n\rangle$$

WE VINDEN DUS DAT $c_n = \sqrt{n+1}$ GELIJKAARDIG: $d_n = \sqrt{n}$

WE VINDEN DUS $\begin{cases} a_+|\psi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\psi_{n+1}\rangle \\ a_-|\psi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\psi_{n-1}\rangle \end{cases} \Rightarrow$

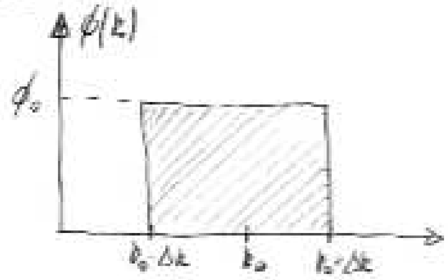
$$|\psi_n\rangle = \frac{a_+}{\sqrt{n}}|\psi_{n-1}\rangle = \frac{a_+^2}{\sqrt{n(n-1)}}|\psi_{n-2}\rangle = \frac{a_+^n}{\sqrt{n!}}|\psi_0\rangle$$

WE VINDEN DUS

$$|\psi_n\rangle = \frac{a_+^n}{\sqrt{n!}}|\psi_0\rangle \quad \text{MET} \quad |\psi_0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad \text{EN} \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

③ BESCHRIJF DE IMPULS EN 1e ORDE PROPAGATIE VAN HET SINC GOLFPAK

SINC GOLFPAK : UNIFORME VERDELING k-WAARDEN



$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \phi_0 \, e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} dk$$

NORMALISATIE : $t = 0 \Rightarrow \psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0+\Delta k}^{k_0+\Delta k} \phi_0 e^{ikx} dk = \frac{\phi_0}{ix\sqrt{2\pi}} \left[e^{ikx} \right]_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}$

$$= \frac{\phi_0}{ix\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left[e^{i\Delta kx} - e^{-i\Delta kx} \right] = \frac{\phi_0 \, 2\Delta k}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \, \mathrm{sinc}(\Delta kx)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{sinc}^2 x \, dx = \pi$$

$$\| \psi(x,0) \| = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\phi_0^2 \Delta k^2}{\pi} \mathrm{sinc}^2(\Delta kx) \, dx = 2\phi_0^2 \Delta k = 1$$

$$\Rightarrow \phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\Delta k}}$$

$$\Rightarrow \psi(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\Delta k \pi}} \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} dk$$

IMPULS $\langle p \rangle$ BEREKENEN IN $T = 0$

$$\langle p \rangle = \langle \psi | p | \psi \rangle = \frac{\Delta k}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x} \mathrm{sinc}(\Delta kx) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \left[e^{ik_0x} \mathrm{sinc}(\Delta kx) \right] dx$$

$$\frac{d}{dx} \left[e^{ik_0x} \mathrm{sinc}(\Delta kx) \right] = ik_0 e^{ik_0x} \mathrm{sinc}(\Delta kx) + e^{ik_0x} \frac{d}{dx} \left[\mathrm{sinc}(\Delta kx) \right]$$

SINC FUNCTIE IS EVEN $\Rightarrow$ AFGELEIDE IS ONEVEN $\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} = 0$

$$\Rightarrow \langle p \rangle = \frac{\Delta k}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x} \mathrm{sinc}(\Delta kx) \frac{\hbar}{i} ik_0 e^{ik_0x} \mathrm{sinc}(\Delta kx) \, dx$$

$$= \frac{\hbar k_0}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{sinc}(\Delta kx) \, d\Delta kx = \boxed{\hbar k_0}$$

Ok !!

③ 1ᵉ ORDE PROPAGATIE VAN HET GOLFPAK

WE MOETEN HET VOLGENDE UITWERKEN: $\psi_k(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk$

DOOR DE KWADRATISCHE TERM IN K IS DIT NIET ANALYTISCH OPLOSBAAR PROBLEEM DUS. DAAROM GAAN WE HET PROBEREN OP TE LOSSEN BIJ ANDERE DISPERSIEVE MEDIA; OF VOOR Δk KLEIN ZODAT TAYLOR MAG

$$\omega(k) = \omega_0 + (k-k_0)\frac{\partial \omega}{\partial k}\Big|_{k_0} + \frac{(k-k_0)^2}{2}\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}\Big|_{k_0} + \dots$$

WE WILLEN DIT NU AFKNOTTEN TOT DE LINEAIRE TERM

$$\rightarrow \frac{|k-k_0|^2}{2}\omega_0'' \ll |k-k_0|\omega_0' \rightarrow \Delta k \ll 2\frac{\omega_0'}{\omega_0''}$$

ONDER DEZE VOORWAARDE WORDT HET SINC GOLFPAK

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\Delta k \pi}}\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{i(kx - \omega_0 t - (k-k_0)\omega_0' t)} dk$$

$$= \frac{e^{-i\omega_0 t} e^{ik_0\omega_0' t}}{2\sqrt{\Delta k \pi}}\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{ik(x-\omega_0' t)} dk = \sqrt{\frac{\Delta k}{\pi}}\, e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \operatorname{sinc}(\Delta k(-\omega_0' t + x))$$

DEZELFDE FUNCTIE, MAAR VERPLAATST!

<u>TWEE DELEN</u>
- HARMONISCHE GOLF $e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$ FASESNELHEID ω_0/k_0
- GEMODULEERD MET SINC GROEPSSNELHEID $\omega_0' = \frac{\partial \omega}{\partial k}\Big|_{k_0}$

VOOR QUANTUMDEELTJE $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ $\qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\rightarrow v_{fase} = \frac{\omega_0}{k_0} = \frac{\hbar k_0}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

$$v_{groep} = \frac{\partial}{\partial k}\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)\Big|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}} \rightarrow \text{klassieke snelheid}$$

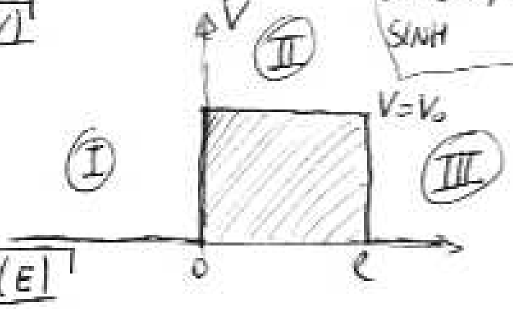
④ BESCHRIJF DE TUNNELING EN SCATTERING DOOR EEN RECHTHOEKIGE POTENTIAALBARRIÈRE

NOOT AAN DE GEBRUIKER: DE BEREKENINGEN ZIJN ANDERS DAN IN DE CURSUS, IK HAAT SINH

V ONAFHANKELIJK VAN DE TIJD $\Rightarrow$ $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

V = CONSTANT BINNEN DEELGEBIED $\rightarrow$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = (E-V)\psi$

$\rightarrow \psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ met $k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$



RECHTHOEKIGE POTENTIAALBARRIÈRE:

I $V=0 \rightarrow \psi_I = Ae^{ik_Ix} + Be^{-ik_Ix}$ $\quad k_I = \sqrt{\frac{2m(E)}{\hbar^2}}$

II $V=V_0 \rightarrow \psi_{II} = Ce^{ik_{II}x} + De^{-ik_{II}x}$ $\quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar^2}$

III $V=0 \rightarrow \psi_{III} = Ge^{ik_Ix} + He^{-ik_Ix}$ $\quad$ WANT $k_{III} = k_I$ $\quad V=0$

GEEN REDEN OM TE WEERKAATSEN NA BERG EN ENKEL DEELTJES VAN LINKS

$\Rightarrow H = 0$

OPLOSSINGEN AAN ELKAAR NAAIEN:

TWEE VOORWAARDEN: ψ CONTINU EN ψ' OOK CONTINU (V = EINDIG)

IN $x=0$: $\begin{cases} A + B = C + D \\ ik_I(A-B) = ik_{II}(C-D) \end{cases}$ $\quad$ IN $x=\ell$ $\begin{cases} Ce^{ik_{II}\ell} + De^{-ik_{II}\ell} = Ge^{ik_I\ell} \\ ik_{II}(Ce^{ik_{II}\ell} - De^{-ik_{II}\ell}) = ik_I Ge^{ik_I\ell} \end{cases}$

5 ONBEKENDEN EN 4 VGL? $|A|^2 = 1$ STELLEN OM TRANSMISSIEPROB. TE KENNEN

G SCHRIJVEN IN FUNCTIE VAN A (HET IS WEL EVEN REKENEN)

$$A = \frac{Ge^{ik_I\ell}}{4k_Ik_{II}}\left[(k_I+k_{II})^2e^{-ik_{II}\ell} - (k_{II}-k_I)^2e^{ik_{II}\ell}\right]$$

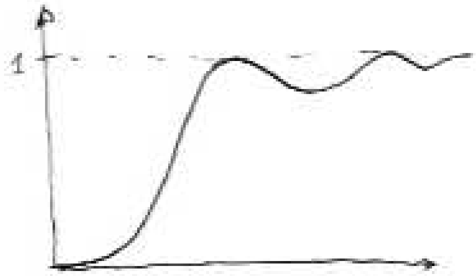
<u>TRANSMISSIEPROBABILITEIT</u>: $T = \frac{\vec{J}_{uit}\cdot\vec{n}_{uit}}{\vec{J}_{in}\cdot\vec{n}_{in}}$

MET $J = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$ OF $J = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]$

④ VOOR INKOMENDE GOLF $\varphi = Ae^{ik_I x}$ IS $J_{in} = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}(|A|^2 ik_I) = \frac{\hbar k_I}{m}|A|^2$

DE TRANSMISSIEPROBABILITEIT $T = \frac{\vec{J}_{uit}\,\vec{n}_{uit}}{\vec{J}_{in}\cdot\vec{n}_{in}} = \frac{|G|^2}{|A|^2} = \frac{|4k_I k_{II}|^2}{|(k_I+k_{II})^2 e^{-ik_{II}\ell} - (k_{II}-k_I)^2 e^{ik_{II}\ell}|^2}$

$$\overset{*}{=} \frac{16k_I^2k_{II}^2}{16k_I^2k_{II}^2 + 4(k_I^2-k_{II}^2)^2\sin^2 k_{II}\ell} = \boxed{\frac{1}{1+\frac{(k_I^2-k_{II}^2)^2}{4k_I^2k_{II}^2}\sin^2 k_{II}\ell}}$$



BESPREKING:

① HEEL HOGE BARRIERE : $V \to \infty$

$k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} \longrightarrow +\infty i$ VEEL GROTER DAN k_I $\quad \sin(ix) \approx e^x$ VOOR x GROOT

$$\Rightarrow T \approx \frac{1}{1+\frac{k_{II}^2}{4k_I^2}\frac{e^{2k_{II}\ell}}{4}} \approx \frac{16k_I^2}{k_{II}^2}e^{-2k_{II}\ell}$$ SNELLER DAN EXPONENTIEEL NAAR NUL

② $E \to V$ ENERGIE = HOOGTE VAN DE BERG

$k_{II} \to 0$ VOOR x KLEIN : $\sin x \approx x$

$$\Rightarrow T \approx \frac{1}{1+\frac{k_I^2}{4\cancel{k_{II}^2}}\cancel{k_{II}^2}\ell^2} = \frac{1}{1+\frac{k_I^2\ell^2}{4}} = \frac{1}{1+\frac{2mE\ell^2}{\hbar^2 4}} < 1$$

③ TRANSMISSIE GELIJK AAN 1 ?

DIT BEKOMEN WE WANNEER $\sin(k_{II}\ell) = 0$ OF $k_{II}\ell = n\pi \quad n \in \mathbb{Z}$

$\Leftrightarrow \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}\ell = n\pi \Leftrightarrow E - V = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}$ ANALOOG AAN ∞ DIEPE POTPUT

$(*)$ $|(k_I+k_{II})^2e^{-ik_{II}\ell} - (k_{II}-k_I)^2e^{ik_{II}\ell}|^2 = |k_I^2(e^{-ik_{II}\ell}-e^{ik_{II}\ell}) + k_{II}^2(e^{-ik_{II}\ell}-e^{ik_{II}\ell}) + 2k_Ik_{II}(e^{-ik_{II}\ell}+e^{ik_{II}\ell})|^2$

$= |-2i(k_I^2+k_{II}^2)\sin(k_{II}\ell) + 4k_Ik_{II}\cos(k_{II}\ell)|^2 = 4(k_I^2+k_{II}^2)^2\sin^2(k_{II}\ell) + 16k_I^2k_{II}^2\cos^2(k_{II}\ell)$

$\boxed{\sin^2 x + \cos^2 x = 1 \Rightarrow \cos^2 x = 1 - \sin^2 x}$ $= 4(k_I^2+k_{II}^2)^2\sin^2(k_{II}\ell) + 16k_I^2k_{II}^2 - 16k_I^2k_{II}^2\sin^2(k_{II}\ell)$

$= 16k_I^2k_{II}^2 + (4(k_I^2+k_{II}^2)^2 - 16k_I^2k_{II}^2)\sin^2 k_{II}\ell = 16k_I^2k_{II}^2 + 4(k_I^2-k_{II}^2)^2\sin^2 k_{II}\ell$

5. HOE WORDEN SYSTEMEN VAN TWEE DEELTJES BESCHREVEN ? MAAK EEN ONDERSCHEID TUSSEN ONDERSCHEIDBARE EN IDENTISCHE DEELTJES . STEL DE UITWISSELKRACHT OP

TWEE DEELTJES : ALGEMEEN $\psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, t)$ MET TIJDSEVOLUTIE BESCHREVEN DOOR DE SCHRÖDINGERVERGELIJKING $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\vec{R}_1, \vec{R}_2, t)$$

$|\psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, t)|^2 d^3\vec{R}_1\, d^3\vec{R}_2$ DE KANS OM DEELTJE 1 IN $d^3\vec{R}_1$ TE VINDEN EN DEELTJE 2 IN VOLUME $d^3\vec{R}_2$

NORMALISATIE GEEFT DUS : $\int_{V_1, V_2} |\psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, t)|^2 d^3\vec{R}_1\, d^3\vec{R}_2 = 1$

ALS TWEE DEELTJES NIET ENTANGLED ZIJN KAN HUN TOESTAND ONTKOPPELD WORDEN IN TWEE 1-DEELTJESTOESTANDEN

$\psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \psi_a(\vec{R}_1)\, \psi_b(\vec{R}_2)$ DIT VERONDERSTELT ONDERSCHEIDBARE DEELTJES

VOOR IDENTISCHE DEELTJES MOET DE OMGEWISSELDE TOESTAND ERBIJ GETELD WORDEN , OMDAT DIE OOK KAN VOORKOMEN.

HIERVOOR GEBRUIKEN WE DE UITWISSEL-OPERATOR $\hat{P}f(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = f(\vec{R}_2, \vec{R}_1)$

$\hat{P}^2 = I \rightarrow$ EIGENWAARDEN ZIJN ± 1

BIJ IDENTIEKE DEELTJES BEHANDELT DE HAMILTONIAAN ELK DEELTJE IDENTIEK DUS $[\hat{H}, \hat{P}] = 0 \rightarrow$ ZE HEBBEN GEMEENSCHAPPELIJKE EIGENFTIES

$$\rightarrow \psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \psi_a(\vec{R}_1)\psi_b(\vec{R}_2) \pm \psi_a(\vec{R}_2)\psi_b(\vec{R}_1) \begin{cases} + & \text{VOOR BOSONEN} \\ - & \text{VOOR FERMIONEN} \end{cases}$$

5) OM DE UITWISSELKRACHT OP TE STELLEN MOET DE VERWACHTINGSWAARDE OP DE AFSTAND TUSSEN DE DEELTJES BEREKEND WORDEN.

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle$$

ONDERSCHEIDBARE DEELTJES

$$\langle x_1^2 \rangle = \int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_a$$

$$\langle x_2^2 \rangle = \int |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2^2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_b$$

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

$$\Rightarrow \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_d = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

IDENTISCHE FERMIONEN

$$\langle x_1 \rangle^2 = \frac{1}{2}\left[\iint \left[\psi_a^*(x_1)\psi_b^*(x_2) - \psi_b^*(x_1)\psi_a^*(x_2)\right] x_1^2 \left[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right] dx_1 dx_2\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b\right]$$ DOORDAT 1-DEELTJESTOESTANDEN ORTHOGONAAL ZIJN

ANALOOG: $\langle x_2 \rangle^2 = \frac{1}{2}\left[\langle x^2 \rangle_b + \langle x^2 \rangle_a\right]$

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \frac{1}{2}\left[\iint \left[\psi_a^*(x_1)\psi_b^*(x_2) - \psi_b^*(x_1)\psi_a^*(x_2)\right] x_1 x_2 \left[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)\right] dx_1 dx_2\right]$$

$$= \frac{1}{2}\Big[\int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 + \int x_1 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_a(x_2)|^2 dx_2$$
$$- \int x_1 \psi_a^*(x_1)\psi_b(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2) dx_2 - \int x_1 \psi_b^*(x_1)\psi_a(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_a^*(x_2)\psi_b(x_2) dx_2\Big]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\langle x_a \rangle_a \langle x_b \rangle_b + \langle x_b \rangle \langle x \rangle_a - \langle x \rangle_{ab} \langle x \rangle_{ba} - \langle x \rangle_{ba} \langle x \rangle_{ab}\right] = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b - |\langle x \rangle_{ab}|^2$$

ALLES SAMEN: $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_- = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x_a \rangle \langle x_b \rangle \boxed{+ 2|\langle x \rangle_{ab}|^2}$

VERSCHILLEND DAN DE ONDERSCHEIDBARE

IDENTISCHE BOSONEN ANALOOG AAN FERMIONEN

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_+ = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \boxed{- 2|\langle x \rangle_{ab}|^2}$$

UITWISSELKRACHT

⑥ BESCHRIJF WAT U WEET OVER DE DENSITEITSMATRIX. BEREKEN HIERBIJ DE EVOLUTIE VAN WAARNEEMBARE GROOTHEDEN VAN HET ENSEMBLE

WE HEBBEN EEN ENSEMBLE VAN EEN GEMIXTE TOESTAND WAAR WE EEN METING OP UITVOEREN. $\hat{Q}$

$$\rightarrow \langle\langle \hat{Q} \rangle\rangle = \overline{\langle Q \rangle} = \sum_j P_j \langle \psi_j | \hat{Q} | \psi_j \rangle$$ MET ψ_j DE MOGELIJKE PURE TOEST.

WE ZOEKEN NU EEN STRUCTUUR DIE TOELAAT OM $\langle\langle \hat{Q} \rangle\rangle$ ELEGANT TE BEREKENEN

$\rho = \sum_j P_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$ UITSCHRIJVEN IN ORTHONORMALE BASIS $|\phi_m\rangle$

$$|\psi_j\rangle = \sum_u c_u^{(j)} |\phi_u\rangle \rightarrow \rho = \sum_j P_j \Big(\sum_u c_u^{(j)} |\phi_u\rangle\Big)\Big(\sum_v (c_v^{(j)})^* \langle\phi_v|$$

$$\rho = \sum_{u,v} \Big(\sum_j P_j c_u^{(j)} (c_v^{(j)})^* \Big) |\phi_u\rangle\langle\phi_v| \qquad \rho_{uv} = \langle\phi_u|\rho|\phi_v\rangle = \sum_j P_j c_u^{(j)} (c_v^{(j)})^*$$

<u>EIGENSCHAPPEN</u> : <u>HERMITISCH</u>

$$\rho_{vu} = \sum_j P_j c_v^{(j)} (c_u^{(j)})^* = \Big(\sum_j P_j c_u^{(j)} (c_v^{(j)})^* \Big)^* = \rho_{uv}^*$$

<u>SOM VAN DE DIAGONAALELEMENTEN IS 1</u>

$$Sp(\rho) = \sum_m \rho_{mm} = \sum_m \sum_j P_j |c_m^{(j)}|^2 = \sum_j P_j \sum_m |c_m^{(j)}|^2 = \sum_j P_j = 1$$

DE DIAGONAAL ELEMENTEN STELLEN DE PROBABILITEIT OM HET SYSTEEM IN 1 VAN ZIJN BASIS-STATES $|\phi_m\rangle$ TE VINDEN. DE NIET-DIAGONAAL ELEMENTEN GEVEN EEN VOORSTELLING V.D. COHERENTIE TSS DE ≠ TOESTANDEN

$$\rho\hat{Q} = \sum_{uv} \Big(\sum_j P_j c_u^{(j)} (c_v^{(j)})^* \Big) |\phi_u\rangle\langle\phi_v| \hat{Q}$$

$$\langle\phi_q|\rho\hat{Q}|\phi_q\rangle = \sum_{uv} \Big(\sum_j P_j c_u^{(j)} (c_v^{(j)})^* \Big) \underbrace{\langle\phi_q|\phi_u\rangle}_{\delta_{qu}} \langle\phi_v|\hat{Q}|\phi_q\rangle$$

$$= \sum_v \sum_j \Big(P_j c_q^{(j)} (c_v^{(j)})^* \Big) \langle\phi_v|\hat{Q}|\phi_q\rangle$$ SOM VAN DEZE GEEFT

$$\sum_q \langle\phi_q|\rho\hat{Q}|\phi_q\rangle = \sum_j P_j \Big(\sum_v (c_v^{(j)})^* \langle\phi_v| \Big) \hat{Q} \Big(\sum_q c_q^{(j)} |\phi_q\rangle \Big) = \sum_j P_j \langle\psi_j|\hat{Q}|\psi_j\rangle$$

WE VINDEN DUS DAT $\langle\langle \hat{Q} \rangle\rangle = \text{Spoor}(\rho\hat{Q})$

6 TIJDSEVOLUTIE VAN DE DENSITEITSMATRIX

IN PURE TOESTAND : EVOLUTIE BESCHREVEN DOOR SCHRÖDINGER

HOE EVOLUTIE V. GEMIXTE TOESTAND SCHRIJVEN ?

SCHRÖDINGER UITSCHRIJVEN IN ORTHONORM. BASIS $|\phi_n\rangle$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial c_n^{(j)}}{\partial t}|\phi_n\rangle = \sum_n c_n^{(j)}(t)\hat{H}|\phi_n\rangle$$ VERMENIGVULDIGEN MET $\langle\phi_m|$

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(j)}}{\partial t} = \sum_n c_n^{(j)}(t) \underbrace{\langle\phi_m|\hat{H}|\phi_n\rangle}_{H_{mn}}$$

NEEM NU DENSITEITSMATRIX

$$\rho_{uv} = \sum_j P_j c_u^{(j)} (c_v^{(j)})^* \qquad \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = \sum_j P_j \left(c_m^{(j)} \frac{\partial (c_n^{(j)})^*}{\partial t} + \frac{\partial c_m^{(j)}}{\partial t} (c_n^{(j)})^* \right)$$

$$= \sum_j P_j \left(\frac{i}{\hbar} c_m^{(j)} \sum_s (c_s^{(j)})^* H_{sn} - \frac{i}{\hbar} (c_n^{(j)})^* \sum_q c_q^{(j)} H_{mq} \right) = \frac{i}{\hbar}\left(\sum_s \rho_{ms} H_{sn} - \sum_q H_{mq}\rho_{qn} \right)$$

$$\rightarrow \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left((\rho\hat{H})_{mn} - (\hat{H}\rho)_{mn} \right) = \frac{i}{\hbar}[\rho, \hat{H}]_{mn}$$

ALGEMEEN : $$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\rho, \hat{H}]$$

7 STEL DE MAXWELL-BOLTZMANN, BOSE-EINSTEIN EN FERMI-DIRAC VERDELING OP

A) ONDERSCHEIDBARE DEELTJES ⟶ MAXWELL-BOLTZMANN

- N_1 DEELTJES IN EERSTE TOESTAND, VOOR HET EERSTE N KEUZES, VOOR HET TWEEDE $N-1$ KEUZES ... $\rightarrow N(N-1)(N-2)\dots(N-N_1) = \frac{N!}{(N-N_1)!}$
- DIT BEVAT NOG $N_1!$ VERSCHILLENDE PERMUTATIES $\Rightarrow \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!}$
- DOOR ONTAARDING KAN ELK DEELTJE OPGEDEELD WORDEN IN $d_1 \neq$ TOESTANDEN
  ER ZIJN DUS $d_1^{N_1}$ EXTRA MOGELIJKHEDEN
  $\Rightarrow$ TOTAAL VOOR HET EERSTE NIVEAU : $\frac{d_1^{N_1} N!}{N_1!(N-N_1)!}$

VOOR NIVEAU TWEE KRIJGEN WE DUS $\frac{d_2^{N_2}(N-N_1)!}{N_2!(N-N_1-N_2)!}$

$$Q(N_1 N_2 N_3 \cdots) = \frac{N!\, d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}\frac{(N-N_1)!\, d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!}\cdots = \boxed{N! \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n^{N_n}}{N_n!}}$$

DE EQUIPARTITIEWET ZEGT DAT ALLE GLOBALE TOESTANDEN MET EENZELFDE TOTALE ENERGIE EEN GELIJKE WAARSCHIJNLIJKHEID HEBBEN
WE MOETEN DUS HET AANTAL UITVOERINGSMOGELIJKHEDEN Q MAXIMALISEREN
TWEE EXTRA CONSTRAINTS : $N = \sum_n N_n \qquad E = \sum_n E_n N_n$

EXTREEM ZOEKEN VAN EEN FUNCTIE $F(x_1, x_2, \dots)$ ONDERHEVIG AAN CONSTRAINTS $f_1 = 0$ $f_2 = 0$ WORDT GEDAAN MET DE METHODE VAN DE MULTIPLICATOREN VAN LAGRANGE :

$G = F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \dots$ EXTREMA WORDEN GEVONDEN HET STELSEL

$\frac{\partial G}{\partial x_n} = 0$, $\frac{\partial G}{\partial \lambda_n} = 0$ OP TE LOSSEN

$$G = \ln Q + \alpha\left[N - \sum_n N_n\right] + \beta\left[E - \sum_n \varepsilon_n N_n\right] = \ln N! + \sum\left(N_n \ln(d_n) - \ln N_n!\right) + \alpha\left[N - \sum N_n\right] + \beta\left[E - \sum E_n N_n\right]$$

$$\boxed{\text{STIRLING APPROXIMATION : } \ln(z!) \approx z\ln(z) - z \rightarrow \frac{d\ln(z!)}{dz} \approx \ln(z)}$$

$$\Rightarrow G \approx \sum_{n=1}^{\infty}\left[N_n \ln(d_n) - N_n \ln(N_n) + N_n - \alpha N_n - \beta E_n N_n\right] + \ln(N!) + \alpha N + \beta E$$

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(d_n) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n = 0 \Rightarrow \boxed{N_n = d_n e^{-(\alpha + \beta E_n)}}$$ MAXWELL BOLTZMANN

7 B) IDENTISCHE FERMIONEN $\longrightarrow$ FERMI-DIRAC

- ZONDER ONTAARDING IS ER SLECHTS 1 ENKELE CONFIGURATIE MOGELIJK OM N_1 DEELTJES IN NIVEAU 1 TE KRIJGEN (PAULI ZEGT DAN OOK NOG $N_1 = 1$)
- MET ONTAARDING KAN MEN AAN ELK VAN DE N_n DEELTJES IN NIVEAU n EEN GETAL TUSSEN 1 EN n GEVEN ZONDER TE HERHALEN

DUS GEWOON BINOMIAAL $\dfrac{d_n!}{(d_n - N_n)!\,N_n!}$ $\Rightarrow Q = \prod_{n=1}^{\infty} \dfrac{d_n!}{(d_n-N_n)!\,N_n!}$

$$G = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\ln(d_n!) - \ln(N_n!) - \ln((d_n - N_n)!) \right] + \alpha \left[N - \sum N_n \right] + \beta \left[E - \sum E_n N_n \right] \quad \text{STIRLING}$$

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = -\ln N_n! + \ln(d_n - N_n) - \alpha - \beta E_n = 0 \Leftrightarrow \boxed{N_n = \frac{d_n}{e^{(\alpha + \beta E_n)} + 1}} \quad \text{FERMI-DIRAC}$$

C) IDENTISCHE BOSONEN $\longrightarrow$ BOSE-EINSTEIN

- d_n VAKJES VOORGESTELD DOOR $d_n - 1$ KRUISJES N_n DEELTJES DOOR N_n BOLLETJES

$\bullet \times \bullet \bullet \bullet \times \bullet \times \bullet \bullet$ BVB 7 DEELTJES IN 4 VAKJES

DIT PERMUTEREN DUS $\dbinom{N_n + d_n - 1}{N_n} = \dfrac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!\,(d_n - 1)!}$ $\Rightarrow Q = \prod_{n=1}^{\infty} \dfrac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!\,(d_n-1)!}$

$$G = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\ln((N_n + d_n - 1)!) - \ln(N_n!) - \ln((d_n - 1)!) \right] + \alpha \left[N - \sum N_n \right] + \beta \left[E - \sum N_n E_n \right]$$

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(N_n + d_n - 1) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n = 0 \Rightarrow \boxed{N_n = \frac{d_n}{e^{(\alpha + \beta E_n)} - 1}} \quad \text{BOSE EINSTEIN}$$

⑧ VOOR IDEALE GASSEN VAN QUANTUM-DEELTJES, GEEF DE FYSISCHE INTERPRETATIE VAN DE LAGRANGE PARAMETERS α EN β IN DE FERMI-DIRAC VERDELING. BEREKEN DE FERMI-ENERGIE VAN EEN IDEAAL FERMI-GAS

WE VULLEN DE MAXWELL BOLTZMANN VERDELING IN IN DE VOLGENDE BETREKKINGEN

$$\sum_j N_j = N \quad \text{EN} \quad \sum_j \varepsilon_j N_j = E \qquad N_j = d_j e^{-(\alpha+\beta \varepsilon_j)}$$

OMDAT WE MET EEN GROOT AANTAL DEELTJES WERKEN WILLEN WE OVERGAAN NAAR $\int$

$$\sum_j d_j e^{-(\alpha+\beta\varepsilon_j)} = \int_0^\infty d_k e^{-\alpha-\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}} dk \; (*)$$

WAT IS NU d_k? STEL EEN 3D ∞ DIEPE POTENTIAALPUT. DIE HEEFT ALS OPLOSSING

$$\psi_{n_xn_yn_z} = \sqrt{\frac{8}{L_xL_yL_z}} \sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)\sin\left(\frac{n_z\pi z}{L_z}\right) \qquad E_{n_xn_yn_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}+\frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$

WE KUNNEN DIT OOK SCHRIJVEN ALS $E_{n_xn_yn_z} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$ MET $k = \left(\frac{n_x\pi}{L_x}, \frac{n_y\pi}{L_y}, \frac{n_z\pi}{L_z}\right)$

IN DE K-RUIMTE STELLEN DEZE OPLOSSINGEN PUNTEN VOOR OP EEN REGELMATIG ROOSTER
ELK PUNT NEEMT EEN VOLUME $\left(\frac{\pi}{L_x}\right)\left(\frac{\pi}{L_y}\right)\left(\frac{\pi}{L_z}\right) = \frac{\pi^3}{Vol}$ MET $Vol = L_xL_yL_z$ IN BESLAG

IN BENADERING KAN MEN DUS HET AANTAL PUNTEN TUSSEN 0 EN k BEPALEN DOOR HET VOLUME VAN EEN OCTANT VAN DE BOL MET STRAAL k TE DELEN DOOR DAT VOLUME:

$$N = \frac{1}{8}\frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\pi^3/Vol} = \frac{k^3 Vol}{6\pi^2}$$

HET AANTAL OPLOSSINGEN TUSSEN k EN $k+dk$: $D(k)dk = \frac{dN}{dk}dk = \frac{k^2 Vol}{2\pi^2}dk$

VOOR FERMIONEN EN BOSONEN KAN SPIN $= \pm 1/2 \Rightarrow d_k = \frac{k^2 Vol}{\pi^2}dk$ (TWEE DEELTJES PER OPLOSSING $\to \times 2$)

$$(*) = \frac{Vol}{\pi^2}e^{-\alpha}\int_0^\infty k^2 e^{-\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}dk = \frac{Vol}{\pi^2}e^{-\alpha}\left(-\frac{m}{\beta\hbar^2}\right)\int_0^\infty k\, d e^{-\frac{\beta\hbar^2k^2}{2m}} \overset{PI}{=} -\frac{Vol\, m e^{-\alpha}}{\pi^2\beta\hbar^2}\left[\underbrace{\left[k e^{-\frac{\beta\hbar^2k^2}{2m}}\right]_0^\infty}_{=0} - \int_0^\infty e^{-\frac{\beta\hbar^2k^2}{2m}}dk\right]$$

$$= \frac{Vol\, m e^{-\alpha}}{2\pi^2\beta\hbar^2}\left(\frac{\pi 2m}{\beta\hbar^2}\right)^{1/2} = 2Vol\, e^{-\alpha}\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2} = N$$

ANALOOG: $\sum_j \varepsilon_j N_j = \sum \varepsilon_j d_j e^{-\alpha-\beta\varepsilon_j} = \int_0^\infty d_k E_k e^{-\alpha-\beta E_k}dk = \frac{Vol}{\pi^2}e^{-\alpha}\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty k^4 e^{-\alpha-\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}dm$

$$= \frac{3Vol}{\beta}e^{-\alpha}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}\right)^{3/2} = E$$

(8) NEEM DE TWEE UITDRUKKINGEN SAMEN $\rightarrow \frac{E}{N} = \frac{3}{2\beta}$

IN KLASSIEKE STATISTISCHE FYSICA : $\frac{E}{N} = \frac{3}{2} k_B T \Rightarrow \beta = \frac{1}{k_B T}$

WE DEFINIËREN α ALS DE CHEMISCHE POTENTIAAL $\mu(T) = -\alpha k_B T$

WE HADDEN VOOR DE DICHTHEID IN DE k RUIMTE : $D(k)dk = \frac{dN}{dk}dk = \frac{k^2 V\ell}{2\pi^2} dk$

WE ZOEKEN NU DE DICHTHEID IN DE E-RUIMTE

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow dE = \frac{\hbar^2}{m} k\,dk \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \rightarrow D(k)dk = \frac{V\ell\, k}{2\pi^2} k\,dk$$

$$D(E)\,dE = \frac{V\ell\sqrt{2}}{2\pi^2\hbar^3} m^{3/2} \sqrt{E}\, dE$$

WE BEREKENEN NU DE FERMI-ENERGIE DOOR $N = \sum_j N_j = \sum d_j n_F(E)$ UIT TE REKENEN

$$= \int_0^\infty 2D(E)\, n_F(E)\, dE$$ x door spin

BIJ LAGE T IS DE FERMI-VERDELING EEN STAPFUNCTIE MET $n_F = 1$

$$N = \int_0^{\mu_F} 2D(E)\,dE = \frac{V\ell\sqrt{2}}{2\pi^2\hbar^3} m^{3/2} \int_0^{\mu_F} \sqrt{E}\, dE = \frac{1}{3} \mu_F^{3/2} \frac{V\ell\sqrt{2}\, m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}$$

$$\Leftrightarrow \mu_F = \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

⑨ BEWIJS DE STELLING VAN BLOCH

<u>STELLING:</u> DE STATIONAIRE TOESTANDEN VAN DE SCHRÖDINGER VGL MET EEN PERIODISCHE POTENTIAAL : $\forall(x): V(x+\Lambda) = V(x)$ KUNNEN GESCHREVEN WORDEN IN DE VORM VAN

$$\psi_E(\vec{x},t) = e^{ikx} u_E(x) e^{-iEt/\hbar} \qquad u_E(x+\Lambda) = u_E(x) \ \forall x \qquad k \in \mathbb{R}$$

<u>BEWIJS</u> STAP 1: POTENTIAAL IS ONEINDIG EN PERIODISCH

$$\Rightarrow |\psi_E(x,t)|^2 = |\psi_E(x+\Lambda,t)|^2 \quad \text{OP } t=0: \ \psi_E(x) = g_E(x) e^{i\gamma(x)}$$

g_E IS PERIODISCH EN $\gamma(x) \in \mathbb{R}$

TIJDSEVOLUTIE VAN STATIONNAIRE TOESTANDEN GEEFT DAN

$$\psi_E(x,t) = g_E(x) e^{i\gamma(x)} e^{-iEt/\hbar}$$

STAP 2 VOER DE TRANSLATIEOPERATOR $\hat{T}_\Lambda$ IN : $\hat{T}_\Lambda \chi(x) = \chi(x+\Lambda)$

STAP 3 BEWIJS DAT $[\hat{T}_\Lambda, \hat{H}] = 0$ ZE HEBBEN DUS GEMEENSCHAPPELIJKE EIG^{N}FTIES

$$\hat{T}_\Lambda \hat{H} \lambda(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \lambda(x+\Lambda)}{\partial (x+\Lambda)^2} + V(x+\Lambda)\lambda(x+\Lambda) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \lambda(x+\Lambda)}{\partial^2 x} + V(x)\lambda(x+\Lambda) = \hat{H}\hat{T}_\Lambda \lambda(x)$$

STAP 4 $\psi_E(\vec{x},t)$ IS DUS OOK EEN EIGENFUNCTIE VAN $\hat{T}_\Lambda$

$$\rightarrow \hat{T}_\Lambda \psi_E(x,t) = t_n \psi_E(x,t) \qquad \text{VOOR } t=0: \ \psi_E = g_E(x) e^{i\gamma(x)}$$

$$\Leftrightarrow \hat{T}_\Lambda \left(g_E(x) e^{i\gamma(x)}\right) = t_n g_E(x) e^{i\gamma(x)} \Leftrightarrow \cancel{g_E(x)} e^{i\gamma(x+\Lambda)} = t_n \cancel{g_E(x)} e^{i\gamma(x)}$$

$$\Leftrightarrow \gamma(x+\Lambda) - \gamma(x) = -i \ln(t_n)$$

$$\hat{T}_\Lambda^n \psi_E(x) = t_n^n \psi_E(x) \Leftrightarrow \gamma(x+n\Lambda) - \gamma(x) = -in \ln(t_n)$$

$$\gamma(x+n\Lambda) = \gamma(x) + n\Lambda \frac{\partial \gamma(x)}{\partial x} + \frac{n^2\Lambda^2}{2} \frac{\partial^2 \gamma(x)}{\partial x^2} + \ldots$$

HOGERE AFGELEIDEN $= 0$
ENKEL EERSTE AFGELEIDE $\neq 0$

$$\Rightarrow \gamma(x) = kx + \gamma_0 \qquad k = \frac{-i \ln(t_n)}{\Lambda} \in \mathbb{R} \ \text{OMDAT } \gamma(x) \in \mathbb{R}$$

STAP 5 $\psi_E(x,t) = g_E(x) e^{ikx + i\gamma_0} e^{-iEt/\hbar}$ ABSORBEER $e^{i\gamma_0}$ IN g_E (CONSTANT)

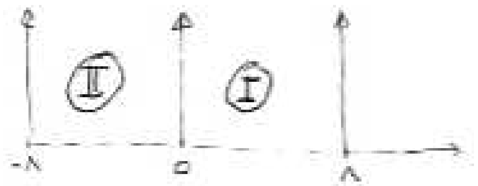
$$\rightarrow \psi_E(x,t) = g_E(x) e^{ikx} e^{-iEt/\hbar} \qquad \text{MET } g_E(x) = g_E(x+\Lambda) \ \forall x \text{ EN } k \in \mathbb{R}$$

(10) LOS HET KRÖNIG-PENNEY MODEL OP VOOR KRISTALLIJNE MATERIALEN

WE STELLEN HET KRISTAL VOOR DOOR EEN DIRACKAM $V(x) = \alpha \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - n\Lambda)$

STAP 1 IN DE PUNTEN $x \neq n\Lambda$ IS $V = 0$

$\Rightarrow \psi_I = A \sin kx + B \cos kx$ met $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$



DE POTENTIAAL IS PERIODISCH, DE STELLING VAN BLOCH GEEFT ONS DUS

$$\psi(x+\Lambda) = u_E(x+\Lambda) e^{ik(x+\Lambda)} = u_E(x+\Lambda) e^{ikx} e^{ik\Lambda} \overset{\text{bloch}}{=} \psi(x) e^{ik\Lambda}$$

DUS $\psi_{II} = e^{-ik\Lambda}\left[A \sin k(x+\Lambda) + B \cos k(x+\Lambda)\right]$ VOOR $x \in [-\Lambda, 0]$: ZONE II

STAP 2 AAN ELKAAR NAAIEN : ψ CONTINU IN $x = 0$

$$\Rightarrow B = e^{-ik\Lambda}\left[A \sin k\Lambda + B \cos k\Lambda\right] \Rightarrow A \sin k\Lambda = \left[e^{ik\Lambda} - \cos k\Lambda\right] B$$

ψ' MOET VOLDOEN AAN $\left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{a+} - \left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{a-} = \frac{2m}{\hbar} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} V(x)\psi(x)\,dx$

BEWIJS INTERMEZZOTJE : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$ INTEGREREN VAN $a-\epsilon$ TOT $a+\epsilon$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \lim_{\epsilon \to 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} V(x)\psi(x)\,dx = \lim_{\epsilon \to 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} E\,\psi(x)\,dx = 0$$ WANT E EN ψ BEGRENSD

$$\Rightarrow \lim_{\epsilon \to 0}\left[\frac{d\psi}{dx}\right]_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} V(x)\psi(x)\,dx \Leftrightarrow \left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{a+} - \left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{a-} = \frac{2m}{\hbar} \lim \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} V(x)\psi(x)\,dx$$

$$\Rightarrow kA - e^{-ik\Lambda}(kA \cos k\Lambda - kB \sin k\Lambda) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} V(x)\psi(x)\,dx = \frac{2m}{\hbar^2}\alpha B$$

STAP 3 CONTINUITEITSVOORWAARDEN COMBINEREN : B ELIMINEREN

$$\Rightarrow \cos(K\Lambda) = \cos(k\Lambda) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\sin(k\Lambda)$$

(11) STEL DE FERMI-GOLDEN RULE OP

GEGEVEN: WE KENNEN DE OPLOSSINGEN VAN HET ONGEPERTURBEERT SYSTEEM: $\hat{H}_0|\psi_0\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ WAARBIJ $|\psi_n\rangle$ EEN ORTHONORMALE BASIS VORMEN $\rightarrow \langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}$

HET SYSTEEM WORDT GEPERTURBEERD MET EEN TIJDSAFHANKELIJKE PERTURBATIE $\hat{V}(t)$ DAT VERONDERSTELT KLEIN TE ZIJN (EN $V(t)=0 \ \forall t<0$)

OP $t=0$ BEVIND HET SYSTEEM ZICH IN TOESTAND $|\psi_i\rangle$

SCHRÖDINGER: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + V(t))|\psi(t)\rangle$

$|\psi(t)\rangle$ SCHRIJVEN IN BASIS GEVORMD DOOR OPLOSSINGEN V. ONGEPER. SYSTEEM

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)e^{-iEt/\hbar}|\psi_n\rangle$$ INVULLEN IN SCHRÖDINGER

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n a_n(t)e^{-iEt/\hbar}|\psi_n\rangle = (\hat{H}_0 + V(t))\sum_n a_n(t)e^{-iEt/\hbar}|\psi_n\rangle$$

$$\rightarrow \sum_n \left(i\hbar\frac{\partial a_n}{\partial t} + E_n a_n\right)e^{-iEt/\hbar}|\psi_n\rangle = \sum_n a_n(t)e^{-iEt/\hbar}\left[\hat{H}_0|\psi_n\rangle + V(t)|\psi_n\rangle\right]$$

BEIDE LEDEN VERMENIGVULDIGEN MET $\langle\psi_k|$

$$\rightarrow \sum_n \left(i\hbar\frac{\partial a_n}{\partial t} + E_n a_n\right)e^{-iE_nt/\hbar}\overbrace{\langle\psi_k|\psi_n\rangle}^{=\delta_{kn}} = \sum_n a_n(t)e^{-iEt/\hbar}\left[\overbrace{\langle\psi_k|\hat{H}_0|\psi_n\rangle}^{=\delta_{kn}} + \underbrace{\langle\psi_k|V(t)|\psi_n\rangle}_{=V_{kn}}\right]$$

$$\rightarrow \left(i\hbar\frac{\partial a_k(t)}{\partial t} + \cancel{E_k a_k}\right)e^{-iE_kt/\hbar} = \cancel{a_k(t)E_k e^{-iE_kt/\hbar}} + \sum_n a_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}V_{kn}$$

$$\rightarrow i\hbar\frac{\partial a_k(t)}{\partial t} = \sum_n a_n(t)V_{kn}e^{-\frac{it(E_n-E_k)}{\hbar}}$$ VOLLEDIG EXACT GEEN BENADERINGEN

PERTURBATIE KLEIN $V \ll H$ WE VINDEN EERSTE ORDE PERTURBATIE DOOR DE NULDE ORDE PERTURBATIE δ_{ni} IN TE VULLEN

$$\frac{\partial a_k^{(1)}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\sum_n \delta_{ni}V_{kn}e^{-\frac{it(E_n-E_k)}{\hbar}} = \frac{1}{i\hbar}e^{-\frac{i(E_i-E_k)t}{\hbar}}V_{ki} = \frac{1}{i\hbar}e^{-i\omega_{ik}t}V_{ki}$$

(11) MONOCHROMATISCHE STORINGEN

$\hat{V}(t) = \hat{F}e^{i\omega t} + \hat{F}^{+}e^{-i\omega t}$ INVULLEN IN EERSTE ORDE PERTURBATIE

$$\frac{\partial a_k^{(1)}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} e^{-i\omega_{ik}t} V_{ki}$$ MET $\hat{V}_{ki}(t) = \hat{F}e^{i\omega t} + \hat{F}^{+}e^{-i\omega t}$ EN $\omega_{ik} = \frac{E_i - E_k}{\hbar}$

$$\Rightarrow \frac{\partial a_k^{(1)}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} e^{-i(\omega_{ik}+\omega)t} F_{ki} + \frac{1}{i\hbar} e^{-i(\omega_{ik}+\omega)t} F_{ki}^{+} \longrightarrow = F_{ik}^{*}$$

$$\Rightarrow a_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \left[e^{-i(\omega_{ik}-\omega)t} F_{ki} + e^{-i(\omega_{ik}+\omega)t} F_{ik}^{*} \right] dt$$

$$= \frac{F_{ki}}{\hbar}\left[\frac{e^{-i(\omega_{ik}-\omega)t} - 1}{(\omega_{ik}-\omega)}\right] + \frac{F_{ik}^{*}}{\hbar}\left[\frac{e^{-i(\omega_{ik}+\omega)t} - 1}{(\omega_{ik}+\omega)}\right]$$

OMVORMEN NAAR SINC $e^{\frac{-i(\omega_{ik}-\omega)t}{2}}$ BUITEN

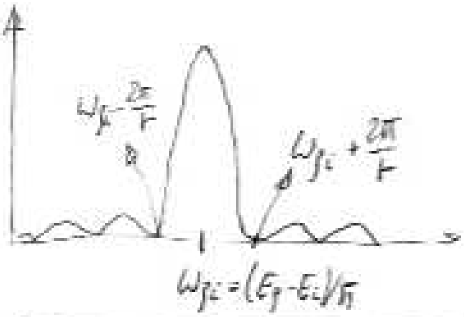
$$= \frac{F_{ki}}{i\hbar} t e^{\frac{-i(\omega_{ik}-\omega)t}{2}} \operatorname{sinc}\left(\frac{(\omega_{ik}-\omega)t}{2}\right) + \frac{F_{ik}^{*}}{i\hbar} t e^{\frac{-i(\omega_{ik}+\omega)t}{2}} \operatorname{sinc}\left(\frac{(\omega_{ik}+\omega)}{2}t\right)$$

DE OVERGANGSWAARSCHIJNLIJKHEID $P_{i\to f}$ VOOR TRANSITIE VAN $i \longrightarrow f$ IS

$$P_{i\to f} = |a_f(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left(|A|^2 + |B|^2 + A^*B + B^*A\right)$$

$A = F_{fi}\, t \operatorname{sinc}\left(\frac{(\omega_{if}-\omega)}{2}t\right)$
$B = F_{if}^{*}\, t \operatorname{sinc}\left(\frac{(\omega_{if}+\omega)}{2}t\right)$

WE VERWAARLOZEN A^*B EN AB^* DIT IS VERANTWOORD ALS $\omega \uparrow\uparrow\uparrow$ ZODAT A STEEDS KLEIN WORDT ALS B GROOT IS EN OMGEKEERD.
OPSPLITSEN IN ABSORBSIE EN EMISSIE (DIT KAN OMDAT DE SINC ENKEL GROOT IS ROND ZIJN NULPUNT.



VB: ABSORBTIE ($E_f - E_i = \hbar\omega$) TERM B

VOOR $T\uparrow\uparrow$ EN $\omega\uparrow\uparrow$ IS DE SINC ENORM SMAL

$$\boxed{\lim_{a\to 0} \frac{1}{a}\operatorname{sinc}^2\left(\frac{x}{a}\right) = \delta(x)\pi}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} P_{i\to f}|_{emissie} \approx \frac{1}{\hbar^2}|A|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|F_{fi}|^2 t^2 \operatorname{sinc}^2\left(\frac{(\omega_{if}-\omega)}{2}t\right) \\ P_{i\to f}|_{absorbtie} \approx \frac{1}{\hbar^2}|B|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|F_{if}^{*}|^2 t^2 \operatorname{sinc}^2\left(\frac{(\omega_{if}+\omega)}{2}t\right) \end{cases}$$

$$\lim_{t\to\infty} P_{i\to f}|_{emissie} = \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} 2\pi t\, \delta\left(\omega_{if} - \omega\right) = \frac{2\pi}{\hbar}|F_{fi}|^2 t\, \delta(E_i - E_f - \hbar\omega)$$