

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} a \\ z \end{pmatrix}, \quad \vec{r}_{1,2} = \begin{pmatrix} 0 \\ \pm \frac{d}{2} \end{pmatrix}$$

Zwei Elementarwellen
 welche von einem Spalt mit
 Abstand d ausgesendet.
 Wie interferieren diese auf
 dem Schirm mit Abstand
 $a \gg d$?

Ansatz (wie im Huygenschen Prinzip der Zerlegung in Elementarwellen)

$$\psi_{\vec{r}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} e^{ik|\vec{r} - \vec{r}_j| - i\omega t} \quad f = 1, 2, \quad |e^{ix}| = 1$$

$$\Rightarrow |\psi_1 + \psi_2|^2 = (\psi_1 + \psi_2)(\psi_1^* + \psi_2^*) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1 \psi_2^* + \psi_2 \psi_1^*$$

$$= \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^2} + \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_2|^2} + \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_1| |\vec{r} - \vec{r}_2|} \left(e^{ik(|\vec{r} - \vec{r}_1| - |\vec{r} - \vec{r}_2|)} + \text{h.c.} \right)$$

$$= 2 \cos k(|\vec{r} - \vec{r}_1| - |\vec{r} - \vec{r}_2|)$$

$$|\vec{r} - \vec{r}_{1,2}| = \sqrt{a^2 + (z \pm \frac{d}{2})^2} = \sqrt{a^2 + z^2 \pm zd + \frac{d^2}{4}}$$

$$= a \left(1 + \frac{z^2}{a^2} \pm \frac{zd}{a^2} + \frac{d^2}{4a^2} \right)^{\frac{1}{2}} = a \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{z^2}{a^2} \pm \frac{zd}{a^2} + \frac{d^2}{4a^2} \right) + O\left(\frac{1}{a^4}\right) \right)$$

$$= a + \frac{z^2}{2a} \pm \frac{zd}{2a} + \frac{d^2}{8a} + O\left(\frac{1}{a^3}\right)$$

$$\Rightarrow |\vec{r} - \vec{r}_1| - |\vec{r} - \vec{r}_2| = \frac{zd}{a} + O\left(\frac{1}{a^3}\right)$$

• für $|\vec{r} - \vec{r}_1|^2, |\vec{r} - \vec{r}_2|^2, |\vec{r} - \vec{r}_1| |\vec{r} - \vec{r}_2|$ vernachlässige alle
 Terme der Ordnung $\frac{1}{a^2}$

$$\Rightarrow |\psi_1 + \psi_2|^2 = \frac{2|N|^2}{a^2} + \frac{2|N|^2}{a^2} \cos\left(k \frac{z d}{a}\right)$$

$$= \frac{2|N|^2}{a^2} \left(1 + \cos\left(k \frac{z d}{a}\right)\right)$$

$\uparrow \frac{d}{a} \ll 1$ d.h. stark
 oszillierend
 $\in [0, 2]$

mit $\cos = -1$ destruktive Interferenz
 $= +1$ konstruktive \rightarrow

14. Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung [Münst. 22, Fließbach II.6]

• die Zeitabhängigkeit von $\Psi(\vec{r}, t)$ ist durch die zeitabhängige Schrödi

gegeben
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right]}_{\text{Hamilton-OP}} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t)$$

- die Raumabhängigkeit von $\Psi(\vec{r}, t)$ läßt sich durch die 3D Fourier-Darstellung ausdrücken. Für freie Teilchen war die t-Abhängigkeit durch die Dispersionsrelation $\omega = \omega(\vec{k})$ gegeben.

→ was passiert, wenn $V(\vec{r}) \neq 0$, d.h. das Teilchen nicht frei ist?

• betrachte Hamiltonoperatoren \hat{H} , die nicht explizit von t abhängen, d.h. $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ (z.B. WKB), " " " " " "

Ansatz:
$$\Psi(\vec{r}, t) = \int dE c_E \Psi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

↑ ↑ zeitunabh. Anteil von Ψ
 ↑ E -abh. Normierungskonstante $\neq 0$
 (kann dafür sorgen, daß $\int d\vec{r} \Psi \rightarrow \sum_{E \in \text{diskr.}}$)

$$\Rightarrow \int dE c_E \Psi_E(\vec{r}) E e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = \int dE c_E \Psi_E(\vec{r}) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

$$= \int dE c_E \hat{H} \Psi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{+\frac{i}{\hbar} \tilde{E} t}$ auf beiden Seiten

$$\Rightarrow \int dE c_E \Psi_E(\vec{r}) E \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar} (\tilde{E} - E) t} = \int dE c_E \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{H} \Psi_E(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} (\tilde{E} - E) t}$$

↑ t -unabhängig
↑ $\delta(\tilde{E} - E)$

$$\Rightarrow c_{\tilde{E}} \tilde{E} \Psi_{\tilde{E}}(\vec{r}) = c_E \hat{H} \Psi_E(\vec{r}), \text{ d.h. } \boxed{\hat{H} \Psi_E(\vec{r}) = E \Psi_E(\vec{r})} \text{ da } c_E \neq 0$$

Dies ist die zeitunabhängige oder stationäre Schrödi

⇒ die erlaubten Energien E sind die Eigenwerte von \hat{H} , alles ist ε-unabhängig!

Diese E sind reell wenn $V(\vec{r}) = V(\vec{r})^*$ reell ist, denn:

$$\hat{H}\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) \Leftrightarrow \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) \quad \text{i) } |\psi_E\rangle$$

• komplex konjugiert $\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r})^* \right] \psi_E^*(\vec{r}) = E^* \psi_E^*(\vec{r}) \quad \text{ii) } \langle \psi_E |$

• Differenz:

$$\begin{aligned} (E - E^*) |\psi_E(\vec{r})|^2 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \psi_E^* \nabla^2 \psi_E - \psi_E \nabla^2 \psi_E^* \right\} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \left\{ \psi_E^* \nabla \psi_E - (\nabla \psi_E^*) \psi_E \right\} \quad (= \hbar^2 \nabla \cdot \vec{j}) \\ &\quad \text{s. S. 10} \end{aligned}$$

• $\int_{G_1} d^3\vec{r}$ mit $G_1 \rightarrow \mathbb{R}^3$, wie S. 11

$$\Rightarrow (E - E^*) \underbrace{\int_{G_1} d^3\vec{r} |\psi_E(\vec{r})|^2}_{C = \text{const} > 0} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\partial G_1} d\vec{S} \cdot \left\{ \psi_E^* \nabla \psi_E - (\nabla \psi_E^*) \psi_E \right\}$$

* Wenn $|\psi_E(\vec{r})|^2$ integrierbar ist, d.h. $\sim \frac{1}{|\vec{r}|^\alpha}$ mit $\alpha > 3$ & der Limes $G_1 \rightarrow \mathbb{R}^3$ und rechte Seite $\rightarrow 0$

d.h. $(E - E^*) C = 0 \Leftrightarrow E = E^*$ reell

Bemerkung: es gibt $\psi_E(\vec{r})$ mit reellen E 's die nicht quadrat-integrierbar (sogar $\hat{H} \neq \hat{H}^\dagger$ mit E reell)

* Was für Lösungen E der Operator \hat{H} hat hängt von $V(\vec{r})$ ab. Wie bereits für das H-Atom erwähnt kann ein und dasselbe \hat{H} sowohl diskrete als auch kontinuierliche E als Lösung haben.

iiA. gilt: * diskretes Spektrum = Energie Eigenwerte E
 \leftrightarrow entsprechen gebundenen Zuständen.

Dann ist $\Psi_E(\vec{r})$ lokalisiert in der Nähe vom Minimum von $V(\vec{r})$ und $\int d^3\vec{r} |\Psi_E(\vec{r})|^2 < \infty$

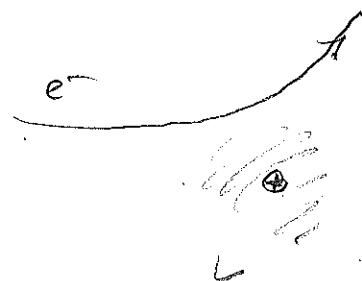
Als Konvention wählen wir ψ , d.h. die E sind die Amplituden mit denen verschiedene E s auf tauschen.

* kontinuierliches Spektrum von E -Eigenwerten

\leftrightarrow entsprechen Stromzuständen

z.B. kann man für große Entfernungen diese als einlaufende ebene Wellen präparieren,

dann verschwindet $\int d^3\vec{r} \vec{j}$ nicht $\int_G G \rightarrow \mathbb{R}^3$ und $\int_G d^3\vec{r} |\Psi_E(\vec{r})|^2 \rightarrow \infty$



die Spektraltheorie von beschränkten und unbeschränkten H ist ein Teilgebiet der Mathematik.

* Wir zeigen nun noch, dass die $\Psi_E(\vec{r})$ eine auf S orthonormierte Basis unserer Zustände bilden:

$$\left. \begin{aligned} \int d^3\vec{r} \Psi_E^*(\vec{r}) \Psi_{E'}(\vec{r}) &= \delta_{E,E'} \quad \text{für } \int dE \rightarrow \mathbb{Z} \text{ diskret} \\ \int d^3\vec{r} \Psi_E^*(\vec{r}) \Psi_{E'}(\vec{r}) &= \delta(E-E') \quad \text{für Kontinuum} \end{aligned} \right\}$$

(z.B. wie ebene Wellen $\int d^3\vec{r} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \vec{k}'\vec{r})} = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}')$)

Sei $E \neq E'$, dann gilt

$$E' \int d^3\vec{r} \Psi_E^*(\vec{r}) \Psi_{E'}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} \Psi_E^*(\vec{r}) E' \Psi_{E'}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} \Psi_E^*(\vec{r}) \hat{H} \Psi_{E'}(\vec{r})$$

$$= \int d^3\vec{r} \Psi_E^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \Psi_{E'}(\vec{r})$$

Wenn die Randterme verschwinden können wir ex. partiell integrieren (d.h. ∇ vorziehen)

$$= \int d^3\vec{r} \left[\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi_E^*(\vec{r}) \right) \Psi_{E'}(\vec{r}) + \Psi_E^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \Psi_{E'}(\vec{r}) \right]$$

$$= \int d^3\vec{r} \left(\hat{H} \Psi_E^*(\vec{r}) \right) \Psi_{E'}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} E \Psi_E^*(\vec{r}) \Psi_{E'}(\vec{r})$$

$$\text{d.h. } \underbrace{(E' - E)}_{\neq 0} \underbrace{\int d^3\vec{r} \Psi_E^*(\vec{r}) \Psi_{E'}(\vec{r})}_{= \text{Skalarprodukt von } \Psi_E^* \text{ und } \Psi_{E'} \text{ d.h. sind } \perp} = 0$$

$$\Rightarrow \text{Volle Lösung } \Psi(\vec{r}, t) = \int dt C_E \Psi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

für t -unabh. \hat{H}

\vec{r} und t -unabh. ∇ ON Basis

der zeitabhängigen Schrödingergl. mit WW