Zustandsraum und Schrödingergleichung eines Teilchens im dreidimensionalen Raum

erhalten wir durch folgende Verallgemeinerung der bisherigen q.m. Beschreibung eines Teilchens in 1D:

1D		3D

Ortsbasis

$$\{\varphi_x\}_{x\in\mathbb{R}} \quad \rightarrow \quad \{\varphi_{\vec{r}}\}_{\vec{r}=(x_1,x_2,x_3)\in\mathbb{R}^3}$$

Wellenfkt:

$$\psi(x) = \langle\varphi_x|\psi\rangle \quad \rightarrow \quad \psi(\vec{r}) = \langle\varphi_{\vec{r}}|\psi\rangle \equiv \psi(x_1,x_2,x_3)$$

Orthonormalität:

$$\langle\varphi_x|\varphi_{x'}\rangle = \delta(x-x') \quad \rightarrow \quad \langle\varphi_{\vec{r}}|\varphi_{\vec{r}'}\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

Vollständigkeit:

$$\mathbb{1}_{x_1} = \int_{\mathbb{R}} dx\, |\varphi_x\rangle\langle\varphi_x| \quad \rightarrow \quad \mathbb{1}_{x_3} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\, |\varphi_{\vec{r}}\rangle\langle\varphi_{\vec{r}}|$$

Γ d.h. z.B.:

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\chi|\mathbb{1}_{x_3}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}\, \underbrace{\langle\chi|\varphi_{\vec{r}}\rangle}_{\chi(\vec{r})^*}\underbrace{\langle\varphi_{\vec{r}}|\psi\rangle}_{=\psi(\vec{r})}$$

$$= \int d^3\vec{r}\, \chi(\vec{r})^*\, \psi(\vec{r})$$

Impulsoperator(en)

$$p := i\hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}T(\alpha)\Big|_{\alpha=0} \quad \rightarrow \quad p_\ell := i\hbar\frac{\partial}{\partial\alpha_\ell}T(\vec{\alpha})\Big|_{\vec{\alpha}=0}, \quad \vec{\alpha} = (\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$$

$\rightarrow$ in Ortsdarstellung:

$$p \mathrel{\hat{=}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \qquad \rightarrow \qquad p_\ell \mathrel{\hat{=}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\ell}$$

d.h.

$$\vec{p} \equiv (p_1, p_2, p_3) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$$

$$\equiv -i\hbar \vec{\nabla}$$

Impulseigenzustände

$|\tilde{\varphi}_p\rangle$ mit $\quad \rightarrow \quad$ $|\tilde{\varphi}_{\vec{p}}\rangle$ mit

$$\tilde{\varphi}_p(x) = e^{ipx/\hbar} \qquad \qquad \tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

$|\tilde{\varphi}_{\vec{p}}\rangle$ ist gemeinsamer EZ der Operatoren p_1, p_2, p_3; d.h.

$$\hat{p}_\ell \, |\tilde{\varphi}_{(p_1,p_2,p_3)}\rangle = p_\ell \, |\tilde{\varphi}_{(p_1,p_2,p_3)}\rangle$$

$\ell = 1, 2, 3$.

Impulsbasis: $\quad \{ |\tilde{\varphi}_p\rangle \}_{p\in\mathbb{R}} \quad \rightarrow \quad \{ |\tilde{\varphi}_{\vec{p}}\rangle \}_{\vec{p}\in\mathbb{R}^3}$

Orthonormalität:

$$\langle \tilde{\varphi}_p | \tilde{\varphi}_{p'} \rangle = 2\pi\hbar\, \delta(p-p') \quad \rightarrow \quad \langle \tilde{\varphi}_{\vec{r}} | \tilde{\varphi}_{\vec{r}'} \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}-\vec{p}\,')$$

Vollständigkeit

$$\mathbb{1}_{x_1} = \int_{\mathbb{R}} \frac{dp}{2\pi\hbar} \, |\tilde{\varphi}_p\rangle\langle\tilde{\varphi}_p| \quad \rightarrow \quad \mathbb{1}_{x_3} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \, |\tilde{\varphi}_{\vec{p}}\rangle\langle\tilde{\varphi}_{\vec{p}}|$$

Hamiltonoperator

1D

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + u(x)$$

$\longrightarrow$

3D

$$H = \frac{1}{2m} |\vec{p}|^2 + u(\vec{r})$$

$$|\vec{p}|^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$$

→ **3D Schrödingergleichung eines Teilchens im Pot. $u(\vec{r})$**

(Ortsdarstellung)

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + u(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r},t)}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$$

zeitunabhängige S.-GL:

$$\boxed{E\, \psi_E(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + u(\vec{r}) \right) \psi_E(\vec{r})}$$