三次元のシュレーディンガー方程式の導出

1 次元の場合と同様に、

$$\begin{aligned} E &= \frac{\|\boldsymbol{p}\|^2}{2m} + V \\ &= \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V \end{aligned}$$

が成り立っていることに注意しよう。ここで対応原理、

$$\begin{aligned} E \to \quad \hat{E} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \\ p_x \to \quad \hat{p_x} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \\ p_y \to \quad \hat{p_y} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \\ p_z \to \quad \hat{p_z} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}, \end{aligned}$$

によって量子化すると、

$$\begin{aligned} \hat{E}\Psi(x,y,z,t) &= i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ &= \left[\frac{\hat{p_x}^2 + \hat{p_y}^2 + \hat{p_z}^2}{2m} + V(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z,t) \\ &= \left[\frac{1}{2m}\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)^2\right] + V(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z,t) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z,t) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z,t) \\ &= \hat{H}\Psi(x,y,z,t) \end{aligned}$$

より、

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi$$

を得る。これを三次元のシュレーディンガー方程式と呼ぶ。