ГЛАВА II

ЭНЕРГИЯ И ИМПУЛЬС

§ 8. Гамильтониан

Волновая функция Ψ полностью определяет состояние физической системы в квантовой механике. Это означает, что задание этой функции в некоторый момент времени не только описывает все свойства системы в этот момент, но определяет ее поведение также и во все будущие моменты времени — конечно, лишь с той степенью полноты, которая вообще допускается квантовой механикой. Математически это обстоятельство выражается тем, что значение производной $\partial\Psi/\partial t$ от волновой функции по времени в каждый данный момент времени должно определяться значением самой функции Ψ в тот же момент, причем зависимость эта должна быть, согласно принципу суперпозиции, линейной. В наиболее общем виде можно написать

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \tag{8,1}$$

где $\hat{H}$ — некоторый линейный оператор; множитель $i\hbar$ введен здесь с целью, которая выяснится ниже.

Поскольку интеграл $\int \Psi^*\Psi\, dq$ есть постоянная, не зависящая от времени величина, то имеем

$$\frac{d}{dt}\int |\Psi|^2\, dq = \int \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi\, dq + \int \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\, dq = 0.$$

Подставив сюда (8,1) и применив в первом интеграле определение транспонированного оператора, пишем (опустив общий множитель $i/\hbar$):

$$\int \Psi\hat{H}^*\Psi^*\, dq - \int \Psi^*\hat{H}\Psi\, dq =$$
$$= \int \Psi^*\tilde{\hat{H}}^*\Psi\, dq - \int \Psi^*\hat{H}\Psi\, dq = \int \Psi^*(\tilde{\hat{H}}^* - \hat{H})\Psi\, dq = 0.$$

Поскольку это равенство должно выполняться для произвольной функции Ψ, то отсюда следует, что должно быть тождественно $\hat{H}^+ = \hat{H}$, т. е. оператор $\hat{H}$ эрмитов.

Выясним, какой физической величине он соответствует. Для этого воспользуемся предельным выражением волновой функции (6,1) и напишем

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\Psi$$

(медленно меняющуюся амплитуду a можно не дифференцировать). Сравнив это равенство с определением (8,1), мы видим, что в предельном случае оператор $\hat{H}$ сводится к простому умножению на величину $-\partial S/\partial t$. Это значит, что последняя и есть та физическая величина, в которую переходит эрмитов оператор $\hat{H}$.

Но производная $-\partial S/\partial t$ есть не что иное, как функция Гамильтона H механической системы. Таким образом, $\hat{H}$ есть оператор, соответствующий в квантовой механике функции Гамильтона. Его называют *гамильтоновым оператором* или, короче, *гамильтонианом* системы. Если вид гамильтониана известен, то уравнение (8,1) определяет волновые функции данной физической системы. Это основное уравнение квантовой механики называется *волновым уравнением*.

§ 9. Дифференцирование операторов по времени

Понятие о производной физической величины по времени не может быть определено в квантовой механике в том смысле, какой оно имеет в классической механике. Действительно, определение производной в классической механике связано с рассмотрением значений величины в два близких, но различных момента времени. Но в квантовой механике величина, имеющая в некоторый момент времени определенное значение, не имеет в следующие моменты вообще никакого определенного значения; подробнее об этом шла речь в § 1.

Поэтому понятие производной по времени должно быть определено в квантовой механике иным образом. Естественно определить производную $\dot{f}$ от величины f как величину, среднее значение которой равно производной по времени от среднего значения $\bar{f}$. Таким образом, имеем, по определению,

$$\overline{\dot{f}} = \dot{\bar{f}}. \tag{9,1}$$

Исходя из этого определения, нетрудно получить выражение для квантовомеханического оператора $\hat{\dot{f}}$, соответствующего величине $\dot{f}$:

$$\overline{\dot{f}} = \dot{\bar{f}} = \frac{d}{dt}\int \Psi^*\hat{f}\Psi\,dq = \int \Psi^*\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}\Psi\,dq + \int \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\hat{f}\Psi\,dq + \int \Psi^*\hat{f}\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,dq.$$