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,

$$\overline{\dot{f}} = \dot{\bar{f}}. \qquad (9,1)$$

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

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

Здесь $\partial\hat{f}/\partial t$ есть оператор, получающийся дифференцированием оператора $\hat{f}$ по времени, от которого последний может зависеть, как от параметра. Подставляя для производных $\partial\Psi/\partial t$, $\partial\Psi^*/\partial t$ их выражения согласно (8,1), получим

$$\bar{\dot{f}} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \Psi \, dq + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^* \Psi^*) \hat{f} \Psi \, dq - \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \hat{f} (\hat{H} \Psi) \, dq.$$

Поскольку оператор $\hat{H}$ эрмитов, то

$$\int (\hat{H}^* \Psi^*)(\hat{f} \Psi) \, dq = \int \Psi^* \hat{H} \hat{f} \Psi \, dq;$$

таким образом имеем

$$\bar{\dot{f}} = \int \Psi^* \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{f} - \frac{i}{\hbar} \hat{f} \hat{H} \right) \Psi \, dq.$$

Поскольку, с другой стороны, должно быть, по определению средних значений, $\bar{\dot{f}} = \int \Psi^* \hat{\dot{f}} \Psi \, dq$, то отсюда видно, что выражение, стоящее в скобках под интегралом, представляет собой искомый оператор $\hat{\dot{f}}$ [1]):

$$\hat{\dot{f}} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{f} - \hat{f} \hat{H}). \tag{9,2}$$

---

[1]) В классической механике имеем для полной производной по времени от величины f, являющейся функцией обобщенных координат q_i и импульсов p_i системы:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right).$$

Подставляя, согласно уравнениям Гамильтона, $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$, получим

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + [H, f], \qquad [H, f] \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right);$$

$[H, f]$ есть так называемая скобка Пуассона для величин f и H (см. I, § 42). Сравнив с выражением (9,2), мы видим, что при переходе к классическому пределу оператор $i(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H})$ в первом приближении обращается, как и следовало, в нуль, а в следующем (по $\hbar$) приближении — в величину $\hbar [H, f]$. Этот результат справедлив и для любых двух величин f и g: оператор $i(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})$ в пределе переходит в величину $\hbar [f, g]$, где $[f, g]$ есть скобка Пуассона

$$[f, g] \equiv \sum_i \left(\frac{\partial g}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial q_i} \right).$$

Это следует из того, что мы всегда можем формально представить себе систему, гамильтониан которой совпадает с $\hat{g}$.

Если оператор $\hat{f}$ не зависит от времени явно, то $\hat{\dot{f}}$ сводится, с точностью до множителя, к коммутатору оператора $\hat{f}$ с гамильтонианом.

Очень важной категорией физических величин являются те, операторы которых не зависят явно от времени и, кроме того, коммутативны с гамильтонианом, так что $\hat{\dot{f}} = 0$. Такие величины называют *сохраняющимися*. Для них $\overline{\dot{f}} = \dot{\overline{f}} = 0$, т. е. $\overline{f} = \mathrm{const}$. Другими словами, среднее значение величины остается постоянным во времени. Можно также утверждать, что если в данном состоянии величина f имеет определенное значение (т. е. волновая функция является собственной функцией оператора $\hat{f}$), то и в дальнейшие моменты времени она будет иметь определенное — то же самое — значение.

§ 10. Стационарные состояния

Гамильтониан замкнутой системы (а также системы, находящейся в постоянном — но не в переменном — внешнем поле) не может содержать времени явно. Это следует из того, что по отношению к такой физической системе все моменты времени эквивалентны. Поскольку, с другой стороны, всякий оператор, конечно, коммутативен сам с собой, то мы приходим к выводу, что у систем, не находящихся в переменном внешнем поле, функция Гамильтона сохраняется. Как известно, сохраняющаяся функция Гамильтона называется энергией. Смысл закона сохранения энергии в квантовой механике состоит в том, что если в данном состоянии энергия имеет определенное значение, то это значение остается постоянным во времени.

Состояния, в которых энергия имеет определенные значения, называются *стационарными состояниями* системы. Они описываются волновыми функциями Ψ_n, являющимися собственными функциями оператора Гамильтона, т. е. удовлетворяющими уравнению $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$, где E_n — собственные значения энергии. Соответственно этому, волновое уравнение (8,1) для функции Ψ_n

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

может быть непосредственно проинтегрировано по времени и дает

$$\Psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(q), \tag{10,1}$$

где ψ_n — функция только от координат. Этим определяется зависимость волновых функций стационарных состояний от времени.

Малой буквой ψ мы будем обозначать волновые функции стационарных состояний без временного множителя. Эти функции,