Аналогичным образом запишутся собственные функции операторов $\hat{y}$ и $\hat{z}$. Так как операторы проекций координат $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ коммутируют между собой, их величины измеримы одновременно. Соответственно, если система обладает тремя степенями свободы, три проекции координат x, y, z могут быть выбраны в качестве величин, образующих полный набор. Волновая функция, описывающая состояние с тремя заданными координатами x_0, y_0, z_0, имеет вид

$$\psi_{r_0}(\boldsymbol{r}) = \delta(x - x_0)\,\delta(y - y_0)\,\delta(z - z_0) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0). \qquad (26,24)$$

Аналогичным образом напишется и собственная функция оператора импульса в импульсном же представлении.

§ 27. Оператор Гамильтона

Важнейшим оператором квантовой механики является оператор полной энергии $\hat{H}$. Как и в классической механике, он слагается из операторов кинетической и потенциальной энергии. Построим, прежде всего, оператор кинетической энергии частицы. Кинетическая энергия связана с импульсом частицы в нерелятивистском приближении, которым мы сейчас только и интересуемся, обычным соотношением

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}. \qquad (27,1)$$

Заменяя в этом соотношении импульс частицы $\boldsymbol{p}$ на оператор $\hat{\boldsymbol{p}}$, получим оператор $\hat{T}$, который назовем оператором кинетической энергии (см. также § 20)

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \qquad (27,2)$$

Оператор кинетической энергии, очевидно, коммутирует с оператором импульса.

Перейдем теперь к оператору полной энергии $\hat{H}$. Поскольку потенциальная энергия зависит только от координат x, y, z, отвечающий ей оператор в координатном представлении просто совпадает с функцией $U(x, y, z)$. Соответственно имеем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z). \qquad (27,3)$$

Поскольку в формуле (27, 3) оператор полной энергии выражен через оператор импульса (но не оператор скорости), он представляет квантовомеханический оператор Гамильтона, часто именуемый гамильтонианом. Выражение для гамильтониана может быть легко обобщено на случай, когда частица движется в нестационарных внешних полях. При этом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{r},\ t), \tag{27,4}$$

где $U(\boldsymbol{r}, t)$ — так называемая силовая функция, связанная с силой, действующей на частицу соотношением

$$\boldsymbol{f} = -\nabla U.$$

Найденные формулы для оператора Гамильтона неприменимы в случае движения частицы в поле сил, зависящих от ее скорости. К ним относится, прежде всего, случай движения заряженной частицы в магнитном поле.

Для получения оператора Гамильтона в этом случае воспользуемся общими правилами. Выпишем функцию Гамильтона классической механики для частиц, движущихся в электромагнитном поле. Согласно (41, 4) ч. I, имеем

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\varphi, \tag{27,5}$$

где вектор $\boldsymbol{p}$ — обобщенный импульс частицы, а $\boldsymbol{A}$ и φ — векторный и скалярный потенциалы, e — заряд частицы. Согласно общему правилу, заменим в формуле (27,5) функцию Гамильтона оператором Гамильтона, обобщенный импульс — оператором импульса. Векторный и скалярный потенциал, зависящие только от координат и времени, можно оставить без изменений, поскольку в координатном представлении применение соответствующих операторов сводится к умножению на эти функции. Тогда находим:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + e\varphi. \tag{27,6}$$

С помощью найденного нами оператора Гамильтона основное уравнение квантовой механики — уравнение Шредингера — может быть представлено в виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \tag{27,7}$$

Операторная форма записи уравнения Шредингера имеет наиболее общий характер и пригодна для описания движения частицы в произвольном стационарном или нестационарном поле. В частности, в таком виде оно справедливо и в случае движения частицы в электромагнитном поле. Как и классическую функцию Гамильтона, гамильтониан можно преобразовать к произвольной криволинейной системе координат. Для этого следует лишь преобразовать к этой системе дифференциальный оператор Лапласа Δ. В зависимости от симметрии поля сил удобно выбирать ту или иную систему криволинейных координат.

в которой выражение для потенциальной энергии частицы приобретает наиболее простой вид. В частности, как мы увидим в § 35, часто удобно записывать оператор Гамильтона в сферической системе координат.

Оператор Гамильтона системы частиц может быть построен по той же схеме, которая была уже успешно применена к случаю одной частицы. Именно, следует написать классическое выражение для функции Гамильтона, а затем заменить все входящие в него величины на квантовомеханические операторы.

Классическое выражение для гамильтониана системы N частиц имеет вид

$$H = \sum_{k=1}^{N} \frac{p_k^2}{2m_k} + \sum_{k=1}^{N} U_k(\boldsymbol{r}_k) + U_{\text{вз}}, \tag{27,8}$$

где $\boldsymbol{p}_k$, m_k и $U_k(\boldsymbol{r}_k)$ соответственно импульс, масса и потенциальная энергия k-й частицы во внешнем поле; $U_{\text{вз}}$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц.

Оператор Гамильтона мы получим, если заменим импульсы частиц на соответствующие операторы $\hat{\boldsymbol{p}}_k$, где индекс k обозначает дифференцирование по координатам k-й частицы. После указанной замены получим уравнение Шредингера. Оно имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad \hat{H} = \sum_{k=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m_k}\Delta_k + \sum_{k=1}^{N} U_k(\boldsymbol{r}_k) + U_{\text{вз}}. \tag{27,9}$$

Очевидным образом обобщается и выражение оператора Гамильтона (27, 6) для системы заряженных частиц, находящихся во внешнем электромагнитном поле.

§ 28. Стационарные состояния

Предположим, что гамильтониан системы не зависит от времени явно. В этом случае уравнение Шредингера (27,7) допускает разделение переменных. Этим обстоятельством мы воспользовались уже в § 6. Однако сейчас мы можем более глубоко проанализировать получающееся при этом решение.

Ищем решение уравнения Шредингера (27,7) в виде

$$\psi(x, t) = \chi(t)\,\psi(x), \tag{28,1}$$

где под x мы понимаем всю совокупность координат, от которых зависит волновая функция.

Подставляя это выражение в (27,7), получаем

$$i\hbar \frac{d\chi(t)}{dt}\,\psi(x) = \chi(t)\,\hat{H}\psi(x).$$