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

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

где $\mathbf{p}_k$, m_k и $U_k(\mathbf{r}_k)$ 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 $\hat{\mathbf{p}}_k$, где индекс k обозначает дифференцирование по координатам k-й частицы. После указанной замены получим уравнение Шредингера. Оно имеет вид

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

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

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

Разделив левую и правую части последнего уравнения на $\psi(x, t)$, имеем

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt} \frac{1}{\chi} = \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)}.$$

Отношение, стоящее в левой части равенства, может зависеть только от времени t, а отношение, стоящее в правой части — только от координат системы. Из равенства этих отношений следует, что каждое из них равно одной и той же постоянной, которую обозначим через E. Тогда получим:

$$\chi(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$

где C — произвольная постоянная.

Мы видим, что постоянная E имеет смысл собственного значения оператора $\hat{H}$, т. е. определяет возможные значения энергии системы, а функция $\psi(x)$ описывает состояние с заданной энергией.

Оператор Гамильтона может обладать как дискретным, так и непрерывным спектром, как мы это видели на разобранных выше примерах. Часто приходится встречаться и со смешанным спектром: дискретным в одном интервале энергий и сплошным в другом.

Предполагая для определенности, что оператор $\hat{H}$ обладает дискретным спектром, выпишем волновые функции (28,1)

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \tag{28,2}$$

Состояния системы, описываемые волновыми функциями типа (28, 2), называются стационарными. Волновые функции стационарных состояний зависят от времени по гармоническому закону с частотами $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$. Как мы уже отмечали в § 6, в стационарном состоянии плотность вероятности нахождения частицы в данной точке пространства не зависит от времени. Действительно,

$$W_n(x, t) = |\psi_n(x, t)|^2.$$

Подставляя выражение (28, 2) для волновой функции, найдем

$$W_n(x, t) = |\psi_n(x)|^2 = W_n(x, 0). \tag{28,3}$$

Можно легко обобщить это утверждение. Вероятность $W(F_k, t)$ наблюдать собственное значение F_k, в стационарном состоянии $\psi_n(x, t)$ не зависит от времени. По общим правилам (см. § 21), для того чтобы получить искомую вероятность, мы должны разложить волновую функцию $\psi_n(x, t)$ по собственным функциям ψ_{F_k} оператора $\hat{F}$, и взять квадрат модуля соответствующей амплитуды разложения c_k. По формуле (19,2)

$$c_k(t) = \int \psi_n(x, t)\psi^*_{F_k}(x)\,dV = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n^i}} \int \psi_n(x)\psi^*_{F_k}(x)\,dV.$$

Соответствующая вероятность $W(F_k, t)$ равна

$$W(F_k, t) = |c_k(t)|^2 = \left|\int \psi_n(x)\psi^*_{F_k}(x)\,dV\right|^2 = W(F_k, 0). \quad (28,4)$$

Произвольное решение уравнения Шредингера $\psi(x, t)$ может быть разложено по волновым функциям (28, 2). Функция $\psi(x, t)$ при этом описывает состояние, в котором энергия системы не имеет определенного значения.

§ 29. Интегральная форма уравнения Шредингера

Оказывается, что дифференциальному уравнению Шредингера можно сопоставить интегральное уравнение. В ряде случаев последняя форма имеет ряд преимуществ как с принципиальной стороны, так и с точки зрения чисто расчетных удобств. Принципиальное достоинство интегрального представления уравнений квантовой механики тесно связано с развитием идей Фейнмана[1]) и с квантовой теорией поля (см. гл. XIV).

В § 58 мы подробно остановимся на достоинствах приближенных методов решения уравнения Шредингера в интегральной форме.

Рассмотрим одну частицу с гамильтонианом $\hat{H}$, зависящим, вообще говоря, от времени. Пусть в начальный момент времени задана волновая функция

$$\psi_0 = \psi(\boldsymbol{r}_1, t_1). \quad (29,1)$$

Волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \quad (29,2)$$

Волновая функция частицы, удовлетворяющая уравнению (29,2) при граничном условии (29,1) в момент времени $t_2 > t_1$, может быть представлена в виде

$$\psi(\boldsymbol{r}_2, t_2) = \int K(\boldsymbol{r}_2, t_2; \boldsymbol{r}_1, t_1)\,\psi(\boldsymbol{r}_1, t_1)\,d\boldsymbol{r}_1. \quad (29,3)$$

Функция $K(\boldsymbol{r}_2, t_2; \boldsymbol{r}_1, t_1)$ является функцией Грина уравнения (29,2) (ср. § 19). Формула (29,3) допускает наглядную

---

[1]) См. Р. Фейнман, А. Хитс, Квантовая механика и интегралы по траекториям, «Мир», 1968.