41.2. Временное уравнение Шрёдингера.

Используя свойства оператора эволюции, найдём, как изменяется со временем волновая функция $\left|\psi(t)\right\rangle$: т. е. найдём $\dfrac{\partial\psi(t)}{\partial t}$. Но оператор производной $\dfrac{\partial}{\partial t}$ не является эрмитовым, $\left(\dfrac{\partial}{\partial t}\right)^{+}=-\dfrac{\partial}{\partial t}$.

Нас интересуют *эрмитовы* операторы, так как физическим величинам можно сопоставить только эрмитовы операторы (их собственные значения вещественны). Эрмитовым будет оператор $i\dfrac{\partial}{\partial t}\Rightarrow i\dfrac{\partial\psi}{\partial t}\overset{(95)}{=}i\dfrac{\partial\hat{\mathrm{U}}(t,t_0)}{\partial t}\psi(t_0)$, так как $\psi(t_0)$ не зависит от *t*.

Выразим правую часть этого соотношения через $\psi(t)$ с помощью (95). Умножим (95) слева на $\hat{\mathrm{U}}^{-1}(t,t_0)$:

$$\hat{\mathrm{U}}^{-1}(t,t_0)\left|\psi(t)\right\rangle=\hat{\mathrm{U}}^{-1}(t,t_0)\hat{\mathrm{U}}(t,t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle=\left|\psi(t_0)\right\rangle.$$

Преобразуем это соотношение, используя равенство (100), $\hat{\mathrm{U}}^{+}(t,t_0)\left|\psi(t)\right\rangle=\left|\psi(t_0)\right\rangle$, тогда для производной волновой функции получим:

$$i\frac{\partial\left|\psi(t)\right\rangle}{\partial t}=i\frac{\partial\hat{\mathrm{U}}(t,t_0)}{\partial t}\hat{\mathrm{U}}^{+}(t,t_0)\left|\psi(t)\right\rangle. \tag{101}$$

Обозначим в (101)

$$i\frac{\partial\hat{\mathrm{U}}(t,t_0)}{\partial t}\hat{\mathrm{U}}^{+}(t,t_0)=\frac{\hat{\mathrm{H}}}{\hbar}. \tag{102}$$

Опыт показывает, что оператор (102) не зависит от t_0 явно, т. е. изменение $\psi(t)$ не зависит от предыдущего момента времени t_0 – нет запаздывающего действия прошлого.

Подставим (102) в (101):

$$i\hbar\frac{\partial\left|\psi(t)\right\rangle}{\partial t}=\hat{\mathrm{H}}\left|\psi(t)\right\rangle. \tag{103}$$

<u>Постулат квантовой механики</u>. Пусть $\left|\psi(t)\right\rangle$ – состояние системы в момент времени *t*. Тогда до тех пор, пока система не будет возмущена каким-либо экспериментом, состояние $\left|\psi(t)\right\rangle$ будет удовлетворять дифференциальному уравнению (103), где $\hat{\mathrm{H}}$ – оператор, описывающий полную энергию системы.

Уравнение (103) называется <u>*временным уравнением Шрёдингера*</u>, оно устанавливает вид уравнения движения в квантовой механике и аналогично уравнению второго закона Ньютона в классической механике.

$\hat{\mathrm{H}}$ называется <u>*гамильтонианом*</u> (<u>*оператором Гамильтона*</u>) рассматриваемой системы. Задание гамильтониана системы аналогично заданию сил в ньютоновской механике, которые действуют на систему.

Для классической частицы, движущейся в трёхмерном пространстве под действием силы $\vec{F} = -\nabla \mathrm{U}(\vec{r})$, функция Гамильтона есть $H(\vec{r},\vec{p}) = \dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + U(\vec{r})$, а в квантовой механике соответствующий этой функции оператор имеет вид $(91')$, так что уравнение (103) приобретает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi(t) + \mathrm{U}(\vec{r})\psi(t). \tag{104}$$

Свяжем оператор Гамильтона с оператором эволюции $\hat{\mathrm{U}}$. Используем в (103) уравнение (95):

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\mathrm{U}}(t,t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle}{\partial t} = \hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{U}}(t,t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \hat{\mathrm{U}}(t,t_0)}{\partial t}\left|\psi(t_0)\right\rangle = \hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{U}}(t,t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle \Rightarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\mathrm{U}}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{U}}(t,t_0). \tag{105}$$

Предположим, что гамильтониан системы $\hat{\mathrm{H}}$ не зависит от времени явно (при этом он совпадает с оператором полной энергии), тогда сразу можно записать формальное решение уравнения (105):

$$\int \frac{d\,\hat{\mathrm{U}}}{\hat{\mathrm{U}}} = -\frac{i}{\hbar}\int \hat{\mathrm{H}} \mathrm{d}t \Rightarrow \ln \hat{\mathrm{U}} = -\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t + \ln C \Rightarrow \hat{\mathrm{U}} = C\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}.$$

Учитывая унитарность (96) оператора $\hat{\mathrm{U}}$, запишем:

$$\hat{1} = \hat{\mathrm{U}}^{+}\hat{\mathrm{U}} = \mathrm{e}^{+\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|C\right|^2 \Rightarrow \left|C\right| = 1.$$

Тогда, при не зависящем от времени гамильтониане $\hat{\mathrm{H}}$,

$$\hat{\mathrm{U}}(t,t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}. \tag{106}$$

Коэффициент C, ввиду того, что $\left|C\right| = 1$, может иметь вид $C = \mathrm{e}^{i\alpha}$, это несущественно, так как сама волновая функция определена с точностью до такого множителя.

Перепишем уравнение эволюции (95) для $\psi(t)$ с учётом (106):

$$\psi(t) \overset{(106),(95)}{=} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\psi(t_0).$$