Гамильтонианом $\hat{H}$ по определению назовём вот такой оператор:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) *$$

Второе слагаемое автор специально написал со звёздочкой, потому что оно «ждёт» домножения на пси: когда мы гамильтонианом подействует на пси, U(x)* домножится на пси, а действие $\hat{p}^2$ будет заключаться (в одномерном случае) во второй производной по абсциссе.

Вообще гамильтониан – это оператор полной энергии (что видно хотя бы потому, что он является суммой оператор кинетической и потенциальной энергии). Почему он называется «гамильтонианом»? Это название пришло из теормеха, где есть функция гамильтона, которая очень похоже на квантовый гамильтониан. К сожалению, гамильтонов формализм в теормехе проходится на ФФ лишь в 5-м семестре. Логичнее бы его поместить в 4-й, а бесполезный лагранжев в 5-й, но увы.

Оператор $\hat{H}$ участвует в двух уравнениях: нестационарном уравнении Шрёдингера и стационарном.

Нестационарное (!) уравнения Шрёдингера – это

$$-ih\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t)$$

Это святая святых квантмеха. Наверное, святая святых классической механики – это второй закон Ньютона **F**=d**p**/dt. Смысл его в том, что зная всё сейчас (т.е. силу, действующую на тело), мы знаем, что будем происходить дальше (как будет меняться импульс).
Нестационарное уравнение Шрёдингера о том же: зная гамильтониан от ВФ СЕЙЧАС, мы узнаем её производную по времени, т.е. как она будет меняться с течением времени. В частности, если мы знаем точный вид гамильтониана (т.е. потенциал), то подстановкой $\widehat{H}|\Psi>$ в нестационарное ур-е Шрёдингера мы можем получить дифур. Правда, в левой части у нас будет производная по времени, а в правой – по координате, так что решить его с наскоку в общем случае будет достаточно сложно.

Чтобы вы лучше прониклись нестационарным уравнением, Шрёдингера, вот вам пример итерационного расчёта.

Момент времени	ВФ	Гамильтониан от неё
t=0	$\Psi(0)$	
t=Δt		

Считаем гамильтониан в начальный момент времени:

Момент времени	ВФ	Гамильтониан от неё
t=0	$\Psi(0)$	$\widehat{H}\Psi(0)$
t=Δt		

Так как

$$-ih*\frac{\Psi(t+\Delta t)-\Psi(t)}{\Delta t}=\widehat{H}\Psi(t)$$

мы получаем

$$\Psi(t+\Delta t)=\Psi(t)+\frac{\widehat{H}\Psi(t)}{-ih}\Delta t$$

Поэтому

Момент времени	ВФ	Гамильтониан от неё
t=0	$\Psi(0)$	$\widehat{H}\Psi(0)$
t=Δt	$\Psi(0)+\frac{\widehat{H}\Psi(0)}{-ih}\Delta t$	

Снова считаем гамильтониан:

Момент времени	ВФ	Гамильтониан от неё
t=0	$\Psi(0)$	$\widehat{H}\Psi(0)$
t=Δt	$\Psi(0)+\frac{\widehat{H}\Psi(0)}{-ih}\Delta t$	$\widehat{H}[\Psi(0)+\frac{\widehat{H}\Psi(0)}{-ih}\Delta t]$

Благодаря этому сможем просчитать ВФ в момент времени $2\Delta t$:

Момент времени	ВФ	Гамильтониан от неё
t=0	$\Psi(0)$	$\widehat{H}\Psi(0)$

t=Δt	$\Psi(0)+\frac{\widehat{H}\Psi(0)}{-ih}\Delta t$	$\widehat{H}[\Psi(0)+\frac{\widehat{H}\Psi(0)}{-ih}\Delta t]$
t=2Δt	$\Psi(0)+\frac{\widehat{H}\Psi(0)}{-ih}\Delta t+\frac{\widehat{H}[\Psi(0)+\frac{\widehat{H}\Psi(0)}{-ih}\Delta t]}{-ih}\Delta t$	

Полагаю, алгоритм вы поняли ☺

Хорошо, а что с аналитическим решением? Поподробней поговорим в теме про нестационарность, а пока заметим, что будет, если вначале ВФ удовлетворяля стационарному уравнению Шрёдингера. Подставим $\widehat{H}\Psi(x)=E\Psi(x)$ в $-ih\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\widehat{H}\Psi(x,t)$:

$$-ih\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=E\Psi(x,t)$$

Что легко решается:

$$\Psi(x,t)=\Psi(x,0)e^{\frac{itE}{h}}$$

Таким образом, если нам удалось решить более простое $\widehat{H}\Psi(x)=E\Psi(x)$, то мы затем будем знать, что будет дальше с ВФ – она будет домножаться на мнимую экспоненту $e^{\frac{itE}{h}}$. Именно этот известным нам явный вид зависимости от времени позволяет писать нам в дальнейшем $\Psi(x)$, а не $\Psi(x,t)$. И именно это обеспечивает невероятную важность решения стационарного уравнения Шрёдингера $\widehat{H}\Psi(x)=E\Psi(x)$. Теперь понятно, почему оно называется стационарным – нет зависимости от времени.