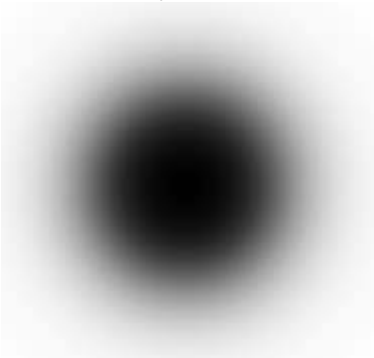
Волновая функция.
Дамы и господа, я представляю вам главного героя квантов – волновую функцию (ВФ)! Пока – одной частицы.
Она определена во всём пространстве и зависит от трёх координат и времени – Ψ(x,y,z,t). Она отображает это 4-мерное пространство на комплексную плоскость, т.е. она скалярна (в отличие, например, от электромагнитного поля **E**(x,y,z,t)), но комплексная.

Квадрат модуля ВФ в данной точке отражает возможность засечь частицу в данный момент в данной точке. Представьте себе кота под одеялом.

В месте, где будет кот, одеяло будет приподнято, и вы, даже не видя кота, сможете определить его местоположение.
С элементарными частицами будет точно так же. Если принять, что чем больше квадрат модуля ВФ, тем чернее точка, то изображение покоящейся элементарной частицы будет таким:



А волновая функция может, например, иметь вид A*exp(-r) (0 системы координат – в центре картинки). Тогда с удалением от центра вероятность будет падать как exp(-2r).

Т.к. частица уж точно ГДЕ-ТО да находится, то вероятность найти ещё ХОТЬ ГДЕ-НИБУДЬ – единица. Тогда квадрат модуля ВФ по всему пространству должен быть 1:

$$\iiint\limits_{R^3} |\Psi(x,y,z,t)|^2 dx\,dy\,dz = 1$$

Это так называемое условие нормировки.

Упражнение 1. Пусть ВФ в какой-то момент времени имеет вид $A^3\exp(-(x/a)^2)\exp(-(y/b)^2)\exp(-(z/c)^2)$, где a, b, c – известные константы, нужные для подгонки размерности. Найдите A.
Решение. Надо вспомнить, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(\frac{x}{a}\right)^2\right) dx = \sqrt{\pi}\ |a|$$

Тогда условие нормировки запишется как $A^3 * \sqrt{\pi} * a * \sqrt{\pi} * b * \sqrt{\pi} * c$, откуда $A = 1/\sqrt{\pi} * 1/(abc)^{1/3}$.
Упражнение 2. Пусть a=b=c=1 единица длины (метр или сантиметр, как хотите). Найдите вероятность найти частицу в данный момент времени точке (0; 2; 0).
Ответ: $A^3\exp(-2^2)$, где $A^3=1/\pi^{3/2}$, поэтому искомая вероятность $\exp(-2^2)/\pi^{3/2}$.

Теперь переходим к операторам.
Хорошо было в школе: p=mv, $W_к=mv^2/2$, мы всё получали с помощью операций умножения и деления. В квантмехе так просто нельзя.
Итак, есть у нас волновая функция | Ψ >, которая зависит в одномерном случае от абсциссы и координаты. Мы с ней можем развлекаться. Например, домножить на x. Например, если мы домножим на икс функцию x^2, то получим x^3. Назовём этот оператор (т.е. правило, по которому мы каждой функции ставим в соответствие другую) оператором координаты.
(некоторая накладка терминов: функция ***в самом широком смысле*** (т.е. над произвольным множеством) вообще – это как раз правило, сопоставляющее элементу одного множества элемент другого множества, но у нас немного другая терминология: функция делает из числа другое число, а вот оператор делает из функции другую функцию:
функция: число->число
оператор: функция->функция

Оператор дифференцирования, домноженный на -ih, назовём оператором импульса.
Т.е.

$$\widehat{p_x} = -ih\frac{\partial}{\partial x}$$

Подействовав им, например, на ту же параболу x^2, получим

$$\widehat{p_x}x^2 = -ih\frac{\partial}{\partial x}x^2 = -ih(2x) = -2ihx$$

Ну вот как-то так это всё и работает.

Можно убедиться, что оба оператора выше линейны (т.е. результат от действия операторов на линейную комбинацию есть линейная комбинация результатов действия оператора).

Ещё все операторы в квантах эрмитовы. Мы не будем объяснять и доказывать это. Автор пытался этот момент заботать… Поверьте мне, это никак не поможет вам в пониманиях квантов. Просто скажите на экзамене, что все операторы в квантмехе эрмитовы и из этого следует, что всех их собственные значения действительны. Это вам добавит плюсик в карму.

Операторы можно складывать (как раз благодаря линейности: оператором $\hat{A} + \hat{B}$ назовём такой, что $(\hat{A} + \hat{B})$**(**| Ψ >)= $\hat{A}$ **(**|Ψ >) +$\hat{B}$ **(**|Ψ >)), можно умножать, но не как обычные числа, а немного иначе. $\hat{A}\hat{B}$**(**|Ψ >) – это значит, что мы сначала применили к пси оператор B, а затем к промежуточному результату (также функии x и t) оператор A (и вновь получили функцию x и t). Умножение операторов в общем случае не коммутативно!

Давайте приведём пример умножения операторов. Оператор импульса $\widehat{p_x} = -ih\frac{\partial}{\partial x}$. Домножим его на него же. Для этого нам придётся взять производную от производной… то есть вторую производную. Коэффициент возведётся в квадрат. Получим, что

$$\widehat{p_x}^2 = -ih\frac{\partial}{\partial x}\left(-ih\frac{\partial}{\partial x}\right) = -h^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Ещё пример: подсчитаем

$$\hat{x}\widehat{p_x} = x * -ih\frac{\partial}{\partial x}$$

Здесь всё просто. А $\widehat{p_x}\hat{x}$? Чтобы не запутаться, подставим аргумент – произвольную функцию | Ψ >.

$$\widehat{p_x}\hat{x}\Psi = -ih\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = -ih\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi\right)$$

Коммутатор операторов A и B – это оператор, равный $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ (т.е. $[\hat{A}, \hat{B}]$ от | Ψ > = $\hat{A}\hat{B}$(Ψ >)-$\hat{B}\hat{A}$ **(**|Ψ >).

Нужно помнить, что коммутатор $[\hat{x}, \widehat{p_x}]$=ih. Это можно легко проверить, потому что выражения для $\hat{x}\widehat{p_x}$ и $\widehat{p_x}\hat{x}$ мы получили недавно выше:

$$\hat{x}\widehat{p_x}\Psi = x * -ih\frac{\partial\Psi}{\partial x}$$

$$\widehat{p_x}\hat{x}\Psi = -ih\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi\right)$$

$$[\hat{x}, \widehat{p_x}]\Psi = \hat{x}\widehat{p_x}\Psi - \widehat{p_x}\hat{x}\Psi = -ih\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial x} + x\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\right) = -ih\Psi$$

Мы подействовали коммутатором на пси, получили пси, домноженную на ih. Значит, искомый коммутатор – домножение на ih.
То же самое для ординаты и проекции импульса на ординату, аппликаты и проекции импульса на ось аппликат, а вот координата и проекция импульса на разные оси дают нулевой коммутатор (т.е. например, $[\hat{z}, \widehat{p_x}]$ - нулевой оператор, т.е. обращающий любую волновую функцию в 0).

Если два оператора имеют ненулевой коммутатор, то мы не можем точно одновременно измерить две величины, которые им соответствуют – т.н. принцип неопределённости. Отметим, что здесь мы его ***вывели.*** Философский вопрос, является ли этот принцип фундаментальным и из него выводятся операторы, или, напротив, фундаментальны операторы (мы постулируем, что $\hat{x} = x *, \widehat{p_x} = -ih\ d/dx$) , а принцип неопределённости – следствие из них, причём достаточно неважное и малоконструктивное – оно ничего не даёт, кроме как «жить плохо, есть неопределённость».
Ответ на вопрос: в наивной интерпретации квантов, которая правит бал в 4-5 семестре, коммутаторы – это бесполезная хрень. Прикольная, но и бесполезная. Принцип неопределённости, соответственно, тоже малополезен.
А вот в 6–м семестре мы к этому вопросу вернёмся, и там всё станет наоборот. А пока что коммутаторы роли не играют, но один–то вы точно должны помнить - $[\hat{x}, \widehat{p_x}]$=ih.

С точки зрения измерений квантовая система сама по себе НЕ обладает ни координатой, не импульсом (!!!) У неё есть лишь волновая функция в любой точке пространства. Чтобы у системы появилась, например, проекция импульса, мы должны сделать измерение. А измерение равносильно необратимому (!) действию на волновую функцию системы в каждой точке соответствующим оператором. Если два оператора коммутируют, то от воздействия первым оператором система изменилась, но так, что второму оператору плевать. Скажем, если у вас второй оператор – это измерение ординаты или проекции на ось OY, то на изменение абсциссы или проекции импульса на OZ ему будет совершенно фиолетово. Такие операторы коммутируют.

Давайте я вам приведу пример. Вы заметили сидящую на скамейке красивую девушку и хотите с ней познакомиться. Вас интересует её имя и то, есть ли у неё парень. Так вот, каждый из ваших двух вопросов – это оператор, и применение этого оператора к девушке влечёт необратимые последствия. Например, если вы сначала спросите имя, а потом спросите про парня, вы можете узнать ответ на оба вопроса. А если вы сначала спросите про парня, получите ответ «да», то имя вам будет уже не узнать – девушка-волновая функция изменилась. Таким образом, два данных вопроса не коммутируют.

Вопрос, как именно меняется ВФ при изменении, описан в 14.1.

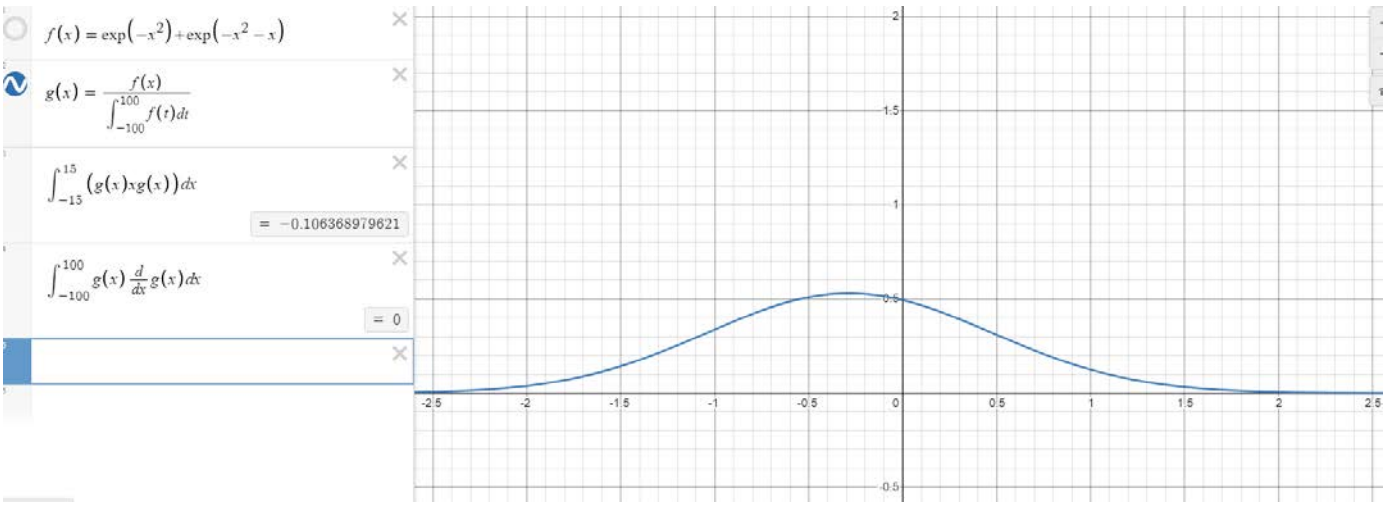
В 13.2 также просят пояснить за гамильтониан, что будет сделано чуть ниже – когда мы будем обсуждать 11.2.

Волновая функция – функция, описывающая всё. Серьёзно. Зная её, мы можем подсчитать:
А) Вероятность нахождения частицы в какой-либо точке (x_0). Это $\Psi^*(x_0)\Psi(x_0)$

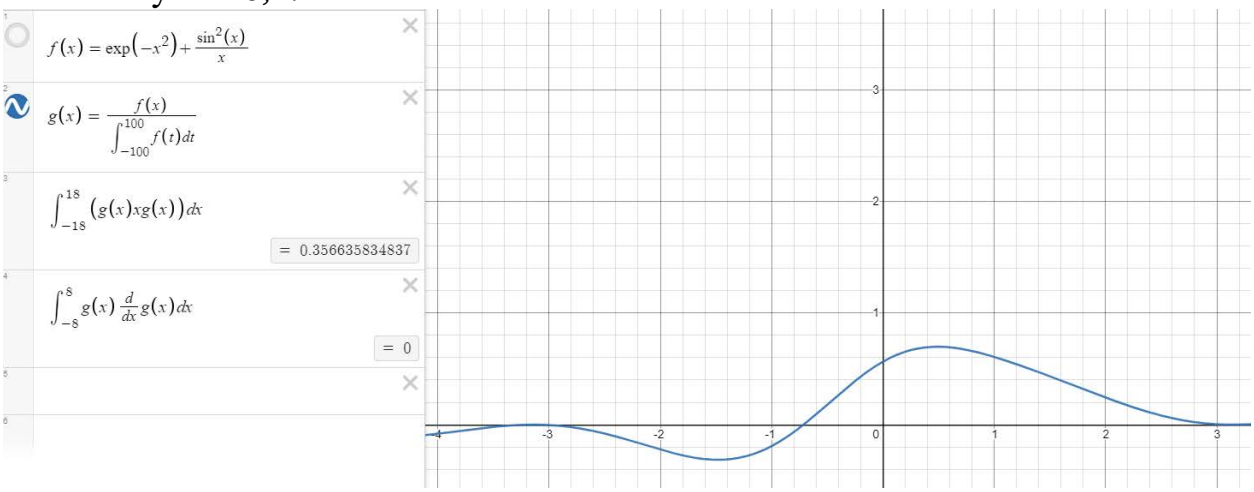
Так как интеграл вероятности найти частицу хоть где-то равен 1, то интеграл от -8 до 8 от

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$$

1 – т.н. условие нормировки.
Б) Среднюю абсциссу/ординату/аппликату/проекции импульса на абсциссу/проекции момента импульса на абсциссу и т.д. частицы. Нам потребуется вновь интеграл от -8 до 8, тоже от произведения двух функции. Первой функцией всегда будет < Ψ (x)| - сопряжённая волновая функция. А вот справа будет волновая функция, на которую подействовали нужным оператором.
Таким образом алгоритм нахождения среднего чего-то:
1) Находим волновую функцию. Если она нам дана – отлично. Если нет – придётся её найти, решить уравнение Шрёдингера, что не всегда просто.
2) Найти сопряжённую к ней.
3) Подействовать на исходную функцию оператором чего-то. Получить ещё одну функцию.
4) Перемножить 2) и 3)
5) Проинтегрировать произведение от -8 до 8.
Полезной будет аналогия с интурами: там скалярное умножение двух функций f и g определено как интеграл от a до b от их произведения. Здесь в a возьмём -8, b плюс 8. То есть по сути мы считаем скалярное произведение двух функций.
Если ситуация нестационарная, то считаем время параметром, проделываем все пять действий, и после пятого действия-интегрирования у нас уходят все координаты, остаётся только время. Вот мы и получим зависимость среднего значения чего-то от времени.
Приведём несколько наглядных иллюстраций. Автор взял несколько функций (для простоты действительных, а не комплексных), похожих на волновые (по крайней мере, они убывают на бесконечности), нормировав их, получил волновые функции – на скринах это функции g. А далее рассчитаны средняя абсцисса и средний импульс:



Как мы видим по графику, волновая функция (и квадрат от ней, то бишь вероятность!) расположен скорее левее оси ординат. И как раз средняя абсцисса меньше нуля – 0,1.



А на этот график скорее правее оси ординат. И средняя абсцисса также больше нуля – 0,36.