

$$[F(\hat{p}), \hat{p}_\alpha]_- = [G(\hat{r}), \hat{r}_\alpha]_- = 0.$$

Для системы из N частиц динамич. переменные представляются совокупностью координат r_1, \dots, r_N и импульсов p_1, \dots, p_N и в написанных выше ф-лах аргументы r и p заменяются на r_1, \dots, r_N и $\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_N$, где каждое \hat{p}_i является дифференц. О., действующим на аргумент \hat{r}_i ф-ции $\psi(r_1, \dots, r_N)$.

В качестве примеров для О. $\hat{F}(p, r)$ может служить оператор Гамильтона (гамильтониан) \hat{H} , играющий принципиальную роль во всей квантовой теории и определяющий данную конкретную систему, и О. орбитального (углового) момента \hat{M} . Для N взаимодействующих между собой нерелятивистских частиц гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{1 \leq i \leq N} \left\{ \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + U(r_i) \right\} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(r_i, r_j),$$

где m_i — масса i -й частицы, $U(r_i)$ и $\Phi(r_i, r_j)$ — потенциалы взаимодействия частиц с внеш. полем и друг с другом (если это взаимодействие не зависит от скоростей частиц). Для системы заряд. частиц О. импульса заменяется:

$$\hat{p}_i \rightarrow \hat{p}_i - (e_i/c)A(r_i, t),$$

где $A(r, t)$ — векторный потенциал эл.-магн. поля, e_i — заряд частицы (в гауссовой системе единиц).

О. момента \hat{M} представляет собой сумму О. моментов для каждой из N частиц. Для одной частицы $\hat{M} = [r\hat{p}] = [(r/\hbar i)\nabla]$. Компоненты О. моменты не коммутируют друг с другом, $[\hat{M}_x, \hat{M}_y]_- = i\hat{M}_z$ (две др. пары соотношений получаются при циклич. замене $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$), но $[\hat{M}^2, \hat{M}_\alpha]_- = 0$, поэтому в квантовой теории имеет смысл говорить о состояниях с определёнными значениями квадрата момента и одной из его компонент, обычно \hat{M}_z . Эти О. как коммутирующие друг с другом имеют общую систему собств. ф-ций [сферические функции $Y_l^m(\theta, \varphi)$, где θ и φ — угл. переменные сферич. координат] и характеризуются собств. значениями $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ и $M_z = \hbar m$, где $l = 0, 1, 2, \dots$ и $m = -l, -l+1, \dots, l$ — соответственно орбит. и магн. квантовые числа. Если частица движется в центрально-симметричном поле $U(r) = U(|r|)$, то \hat{H} , \hat{M}^2 и \hat{M}_z образуют полный набор коммутирующих О. для данной системы с общей системой собств. ф-ций $R_{nl}(|r|)Y_l^m(\theta, \varphi)$, причём l определяет не только величину M^2 (и наряду с гл. квантовым числом n энергетич. состояние системы), но и пространственную чётность состояния, характеризующую изменение волновой ф-ции при инверсии координат, $\hat{P}\psi(r) \equiv \psi(-r) = (-1)^l \psi(r)$ (\hat{P} — О. инверсии), т. е. чётность состояния совпадает с чётностью l .

Импульсное представление. Если разложить $\psi(r)$ по собств. ф-циям $\psi_p(r)$ О. импульса:

$$\psi(r) = \int \Phi(p)\psi_p(r)dp, \quad \Phi(p) = \int \psi(r)\psi_p^*(r)dr,$$

то волновой ф-цией системы в импульсном представлении (в к-ром квадрат её модуля определяет распределение плотности вероятности распределения по p) будет её фурье-образ $\Phi(p)$. В соответствии с этим преобразованием О. координаты становится дифференциальным, а О. импульса — О. умножения:

$$\hat{r}\Phi(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\Phi(p); \quad \hat{p}_0\Phi(p) = p_0\Phi(p).$$

Нормированные на δ -функцию собств. ф-ции этих О. имеют вид

$$\Phi_r(p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \exp\{-ipr/\hbar\}; \quad \Phi_{p_0}(p) = \delta(p - p_0).$$

О. динамич. величин $\hat{F}(p, r)$ определяются как

$$\hat{F}(p, r) = F(\hat{p}, \hat{r}) = F\left(p, i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right).$$

Матричное представление. Рассмотренные выше представления являются частными случаями, когда в качестве системы базисных ф-ций $\{\psi_n(x)\}$ выбирались собств. ф-ции координаты или импульса. В общем случае волновая ф-ция системы $\psi(x, t)$ может быть задана совокупностью компонент $\Phi(t) = \{\Phi_n(t)\}$ в пространстве с достаточно произвольно выбранным базисом $\{\psi_n(t)\}$,

$$\Phi_n(t) = \int \psi(x, t)\psi_n^*(x)dx,$$

причём величины $|\Phi_n(t)|^2$ определяют вероятности обнаружить систему в каждом из состояний $\psi_n(x)$. Представляя $\psi(x, t)$ в виде столбца из её компонент $\{\Phi_n(t)\}$ [сопряжённую ей — в виде строки из элементов $\Phi_n(t)$], а \hat{F} в виде квадратной матрицы

$$\langle n|F|m\rangle = \int \psi_n^*(x)\hat{F}\psi_m(x)dx,$$

можно записать результат действия этого О. $\hat{F}\Phi = f\Phi'$ в виде алгебраич. соотношений, определяющих изменённые в результате поворота вектора $\Phi(t)$ значения компонент $\Phi'(t)$ через их исходные значения:

$$f\Phi'_n = \sum_m \langle n|F|m\rangle \Phi_m, \quad \sum_n |\Phi'_n|^2 = 1.$$

Матричные представления могут быть дискретными, непрерывными (как в случаях координатного и импульсного представления) и смешанного типа, когда часть квантовых чисел, входящих в n , дискретна, часть непрерывна. Приведём неск. общих соотношений в матричном выражении. Алгебраич. действия над О.:

$$\langle n|F_1 \cdot F_2|m\rangle = \sum_k \langle n|F_1|k\rangle \langle k|F_2|m\rangle,$$

$$\langle n|F_1 + F_2|m\rangle = \langle n|F_1|m\rangle + \langle n|F_2|m\rangle;$$

условие самосопряжённости \hat{F} :

$$\langle n|F^+|m\rangle = \langle n|(F^T)^*|m\rangle = \langle m|F|n\rangle^*;$$

единичный О. $\langle n|I|m\rangle = \Delta(n - m)$ [в случае дискретного спектра $\Delta(n - m) = \delta_{nm}$, где δ_{nm} — Кронекера символ, в случае непрерывного спектра $\Delta(n - m) = \delta(n - m)$, где $\delta(n - m)$ — дираковская δ -функция]; ф-ла для ср. значений:

$$\bar{F} = \sum_{nm} \Phi_n^* \langle n|F|m\rangle \Phi_m.$$

Проблема расчёта собств. значений и собств. ф-ций сводится к решению системы однородных относительно компонент Φ_n ур-ний

$$\sum_m \langle n|F|m\rangle \Phi_m = f\Phi_n,$$

причём условие существования нетривиального решения для $\{\Phi_n\}$

$$\det\|\langle n|F|m\rangle - f\Delta(n - m)\| = 0$$

является ур-нием (степени, равной рангу матриц, фигурирующих в данном представлении), определяющим спектр собств. значений $\{f_n\}$.

Если в качестве базиса $\{\psi_n(x)\}$ выбрана система собств. ф-ций О. \hat{F} , то его матричное представление диагонально, $\langle n|F|m\rangle = f_n\Delta(n - m)$, поэтому проб-