

по заранее выбранным базисным ф-циям $\{\psi_n(x)\}$ (определяющим конкретное представление как волновой ф-ции, так и действующих на неё О.), т. е. задана как вектор $\Phi(t) = \{\Phi_n(t)\}$ в бесконечномерном гильбертовом пространстве, то действие О. \hat{F} приводит помимо умножения на число f к повороту вектора Φ в этом пространстве, а изменение его компонент $\Phi_n \rightarrow \Phi'_n$ — к перераспределению квантовомеханич. вероятностей $|\Phi_n(t)|^2$ обнаружить систему в каждом из состояний, характеризующих $\psi_n(x)$. Ф-ции ψ и ψ' считаются нормированными на 1, т. е. вне зависимости от наличия штриха

$$\int \psi^*(t, x)\psi(t, x)dx = \sum_n |\Phi_n(t)|^2 = 1.$$

С каждым О. \hat{F} в квантовой механике связывается ур-ние $\hat{F}\psi_n(x) = f_n\psi_n(x)$, определяющее его собств. значения f_n и полную систему ортонормированных собств. ф-ций ψ_n , подчинённых определённым граничным и всем необходимым общим для ψ -функций условиям. Совокупность величин $\{f_n\}$ определяет спектр возможных значений физ. величины F , а система ф-ций $\{\psi_n\}$ (каждая из k -рых характеризует состояние, в k -ром эта величина имеет значение f_n) может служить базисом пространства, в k -ром представляются все др. состояния системы.

Требование линейности О.

$$\hat{F}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{F}\psi_1 + c_2\hat{F}\psi_2$$

(где ψ_1 и ψ_2 — волновые ф-ции двух возможных состояний системы, c_1 и c_2 — числа) можно рассматривать как выражение *суперпозиции состояний принципа* в квантовой механике, условие же самосопряжённости оператора \hat{F} обеспечивает действительность квантовомеханич. ср. значений физ. величины F , k -рые определяются как

$$\bar{F} = \int \psi^*(x)\hat{F}\psi(x)dx,$$

где $\psi(x)$ — волновая ф-ция состояния, для k -рого определяется ср. значение F , а $\psi^*(x)$ — её комплексно сопряжённая величина (если ψ — многокомпонентная ф-ция, то вместо ψ^* здесь стоит эрмитово сопряжённая ф-ция ψ^\dagger). Определяя О. \hat{F}^T , транспонированный по отношению к исходному с помощью соотношения

$$\int \psi_1\hat{F}\psi_2dx = \int \psi_2\hat{F}^T\psi_1dx,$$

можно записать условие самосопряжённости О. \hat{F} в виде $\hat{F}^+ = \hat{F}$, где $\hat{F}^+ = (\hat{F}^T)^*$. В случае, когда система находится в одном из состояний ψ_n , ср. значение \bar{F} автоматически совпадает с собств. значением f_n . Более того, ур-ние, определяющее собств. ф-ции и собств. значения О. \hat{F} , математически эквивалентно обращению в нуль квантовомеханич. дисперсии (не только квадратичной, но и любого порядка) величины F : $(\Delta F)^2 \equiv (F - \bar{F})^2 = 0$ для состояний ψ , совпадающих с любым из ψ_n . В связи с этим говорят, что в рамках квантовомеханических представлений измерение физ. величины F может привести только к k -л. из значений f_n .

Алгебраич. действия с О. определяются согласно ф-лам

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi, \quad (\hat{F}\hat{G})\psi = \hat{F}(\hat{G}\psi).$$

Деление на О. определяется с помощью введения обратного О. \hat{F}^{-1} , такого, что $\hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{F}\hat{F}^{-1} = I$, где I означает О. умножения на единицу, причём $\hat{F}^{-1}\psi_n = = f_n^{-1}\psi_n$ для $f_n \neq 0$. Если О. \hat{F} выступает в качестве аргумента нек-рой ф-ции $\mathcal{F}(\xi)$, то О. $\mathcal{F}(\hat{F})$ понимается как разложение этой ф-ции в формальный сте-

пенной ряд, в k -ром вместо степеней ξ стоят соответствующие степени О. \hat{F} ,

$$\mathcal{F}(\hat{F}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \xi^k} \right)_{\xi=0} (\hat{F})^k,$$

а его собств. значения непосредственно выражаются через собств. значения \hat{F} :

$$\mathcal{F}(\hat{F})\psi_n = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \xi^k} \right)_{\xi=0} f_n^k \psi_n = \mathcal{F}(f_n)\psi_n.$$

Если два О. \hat{F} и \hat{G} имеют одну и ту же систему собств. ф-ций, $\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$ и $\hat{G}\psi_n = g_n\psi_n$, то порядок действия этих О. в произведении безразличен и коммутатор этих О. равен нулю: $[\hat{F}\hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = 0$.

И наоборот, величины F и G могут одновременно иметь определённые значения только в том случае, если коммутатор О. \hat{F} и \hat{G} равен нулю. В противном случае физ. величины F и G не могут (в рамках квантовой теории) одновременно иметь точные значения. Некоммутативность ряда О. физ. величин приводит к существованию соответствующих *неопределённости соотношений* в квантовой механике. Т. к. при эрмитовом сопряжении произведения двух О. порядок их расположения меняется, $(\hat{F}\hat{G})^+ = \hat{G}^+\hat{F}^+$, то произведение эрмитовых О. будет также эрмитовым О. только в случае, если эти О. коммутируют друг с другом.

Постановка задачи на полное определение ф-ции состояния и полного набора квантовых чисел n , характеризующих это состояние, для системы с λ степенями свободы (с обязат. включением степени свободы, связанной с возможными энергетич. состояниями) заключается в построении полного набора независимых коммутирующих друг с другом О. $\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_\lambda$, характеризующих положение системы по отношению к её степеням свободы, и совместном решении ур-ний

$$\hat{F}_i\psi_{n_1, \dots, n_\lambda}(x) = f_i(n_1, \dots, n_\lambda)\psi_{n_1, \dots, n_\lambda}(x), \quad i = 1, \dots, \lambda,$$

со всеми необходимыми для волновой ф-ции ψ дополнит. условиями, соответствующими характеру рассматриваемой задачи.

Конкретное матем. выражение О. динамич. величины зависит от выбора пространства x , на k -ром определены ф-ции состояния $\psi(x)$.

О. в конфигурационном (координатном) представлении. Если волновая ф-ция системы задана как ф-ция пространства, координат и времени, $\psi = \psi(r, t)$, то простейшими О., с помощью k -рых строятся все остальные О. динамич. величин, являются О. координаты $\hat{r} = = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, определяемый как умножение на координату $\hat{r}\psi(r, t) = r\psi(r, t)$, и О. импульса $\hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$, являющийся дифференц. О. первого порядка:

$$\hat{p}\psi(r, t) = -i\hbar\nabla\psi(r, t).$$

Собств. ф-ция О. координаты, соответствующая собств. значению r_0 , представляет собой *дельта-функцию* Дирака: $\psi_{r_0}(r) = \delta(r - r_0)$, а собств. ф-ция О. импульса, соответствующая собств. значению p , — плоскую волну

$$\psi_p(r) = (1/2\pi\hbar)^{3/2} \exp(ipr/\hbar)$$

[в обоих случаях нормировка $\psi_{r_0}(r)$ и $\psi_p(r)$ произведена на δ -функцию]. О. любой динамич. величины $F(p, r)$ определяется как

$$\hat{F}(p, r) = F(\hat{p}, \hat{r}) = F(-i\hbar\nabla, r).$$

Т. к. \hat{r} и \hat{p} не имеют общей системы собств. ф-ций, то О. динамич. величин, как правило, не коммутируют друг с другом, в частности

$$[F(\hat{p}), \hat{r}_\alpha] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_\alpha}; \quad [\hat{p}_\alpha, G(\hat{r})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial r_\alpha}, \quad \alpha = x, y, z, \quad 411$$