

лему определения собств. ф-ций и собств. значений нек-рого  $O$ . или неск. коммутирующих друг с другом  $O$ . можно представить как проблему одноврем. диагонализации их матричных представлений.

Если в качестве базисных ф-ций  $\{\psi_n(x)\}$  используются собств. ф-ции оператора Гамильтона,  $\hat{H}\psi_n = \mathcal{E}_n\psi_n$ , то говорят об энергетич. представлении  $O$ . и ф-ций состояния. Однако собств. ф-ции  $O$ .  $\hat{H}$ , как правило, неизвестны. Поэтому в ряде случаев в качестве системы базисных ф-ций  $\{\psi_n^{(0)}(x)\}$  выбирают собств. ф-ции той части  $\hat{H}_0$  полного гамильтониана  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ , для к-рой удаётся получить точное решение для собств. ф-ций и собств. значений,  $\hat{H}_0\psi_n^{(0)}(x) = \mathcal{E}_n^{(0)}\psi_n^{(0)}(x)$ , и затем уже в этом матричном представлении развивают теорию возмущений по параметру, к-рому пропорц. часть  $\hat{H}_1$ , как для расчёта собств. значений  $\mathcal{E}_n$  полного  $\hat{H}$ , так и его собств. ф-ций.

Матричное представление является органичным для  $O$ . момента ввиду дискретности квантовых чисел  $l$  и  $m$ . Т. к. каждому  $l$  соответствует  $2l + 1$  значений числа  $m$ , то собств. ф-ции  $O$ .  $\hat{M}^2$  и  $\hat{M}_z$  представляются столбцами, а  $O$ . момента — матрицами  $(2l + 1)$ -ранга, ненулевые элементы к-рых определяются ф-лами

$$\langle l, m | M^2 | l, m \rangle = \hbar^2 l(l + 1), \quad \langle l, m | M_z | l, m \rangle = \hbar m,$$

$$\langle l, m | M_x + iM_y | l, m - 1 \rangle = \langle l, m - 1 | M_x - iM_y | l, m \rangle = \hbar \sqrt{(l - m + 1)(l + m)}.$$

Эти же соотношения справедливы и для  $O$ . полного момента  $\hat{J} = \hat{M} + \hat{S}$ , включающего помимо  $O$ . орбит. момента  $\hat{M}$  также и  $O$ . спина  $\hat{S}$  (для к-рого нематричного представления просто не существует), причём квантовое число  $j$ , заменяющее в этом случае  $l$  в приведённых выше ф-лах, принимает ряд целых или полуцелых значений, а число  $m = -j, -j + 1, \dots, j$  пробегает  $2j + 1$  значений.

Общие ф-лы для  $O$ . момента определяют также и  $O$ . спинового момента частицы  $\hat{S}$ . Так, для частиц со спином  $1/2$   $O$ . спина  $\hat{S} = (\hbar/2)\sigma$ , где  $\sigma$  — двухрядные Паули матрицы. Поэтому и состояние электрона (в нерелятивистской теории) будет описываться соответственно двухкомпонентной волновой ф-цией (причём помимо классич. замены в гамильтониане этой системы  $p \rightarrow p - (e/c)A$  он должен быть дополнен энергией взаимодействия —  $\mu\mathcal{H}$  собств. магн. момента электрона  $\mu = (e\hbar/2mc)\sigma$  с внеш. магн. полем  $\mathcal{H}(r, t)$ ). В релятивистской теории электрона состояние частицы описывается четырёхкомпонентной волновой ф-цией (не исключено матричное представление для каждой из них) в соответствии с разл. спиновыми состояниями электрона и состояниями частица и античастица, а  $O$ . выражается четырёхрядными матрицами, элементы к-рых сами могут быть  $O$ . в к.-л.  $x$ -представлении. Простейшие примеры полных наборов коммутирующих  $O$ . для случая свободного движения электрона: гамильтониан  $\hat{H}_D = c(\hat{p}\alpha) + mc^2\beta$ , импульс, проекция спина на направление импульса ( $\hat{S}\hat{p}$ ), где  $\hat{S} = (\hbar/2)\sigma$ , а  $\alpha = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ ,  $\beta$  — четырёхрядные Дирака матрицы; или  $O$ .  $\hat{H}_D, \hat{J}^2, \hat{J}_z$  и  $O$ . инверсии  $\hat{I}\beta$ . Собств. ф-ции при первом выборе характеризуются плоскими волнами (с импульсом  $p$ ), проекцией спина  $s = \pm 1/2$  и энергией  $\mathcal{E} = \pm c\sqrt{p^2 + m^2c^2}$ , при втором — сферич. волнами, числами  $j, m$  и  $l$  (чётность). При движении электрона в центрально-симметричном поле  $U(r)$  системой коммутирующих  $O$ ., полностью определяющих состояние системы, являются гамильтониан  $\hat{H} = \hat{H}_D + U(|r|)$ ,  $O$ . квадрата полного момента  $\hat{J}^2$ , его проекции  $\hat{J}_z$  и чётности  $\hat{I}\beta$ . Для частиц со спином 1

необходимо использовать уже как минимум трёхрядные матрицы и т. д.

Представление вторичного квантования эффективно при рассмотрении систем, состоящих из большого числа одинаковых частиц (проблема мн. тел в статистич. механике; см. *Квантовая теория многих частиц*), или систем, допускающих существование любого числа частиц одного и того же сорта (см. *Квантовая теория поля*), и является одним из наиб. естеств. способов учёта свойств симметрии волновых ф-ций системы по отношению к перестановкам одинаковых частиц. В основе своей — это матричное представление, для формулирования к-рого используются  $N$ -частичные базисные ф-ции с определённым типом симметрии  $\psi_n(x)$ , сконструированные как симметризов. или антисимметризов. произведения одночастичных ф-ций  $\psi_f(x_i)$  (чаще всего для этого используются известные решения задач на свободное движение частицы данного типа), где  $x = x_1, \dots, x_N$ , а в наборе квантовых чисел  $n = \{\dots, n_f, \dots\}$  каждое из  $n_f$  указывает, сколько раз в структуре данной базисной ф-ции встречается ф-ция  $\psi_f(x_i)$  с данным индексом  $f$ . Числа  $n_f$  наз. числами заполнения (очевидно,  $\sum_f n_f = N$ ), а базисные ф-ции обычно обозначают символами  $\psi_n(x) = |\dots, n_f, \dots\rangle$ , введёнными П. А. М. Дираком (P. A. M. Dirac), при этом  $\psi^*(x) = \langle \dots, n_f, \dots |$ . Отличие систем, симметричных и антисимметричных по отношению к перестановкам двух частиц, проявляется в том, что в первом случае (бозе-частицы)  $n_f$  могут принимать любые целые неотрицат. значения, а во втором (ферми-частицы) — только 0 и 1. Это ограничение на числа заполнения для ферми-систем выражает Паули принцип.  $O$ . динамич. величин, представляемые соответствующими матрицами  $\langle \dots, n_f, \dots$

$|f| \dots, n_f, \dots \rangle$ , действуя на волновую ф-цию, имеющую в этом представлении вид вектора с компонентами  $\Phi(\dots, n_f, \dots)$ , характеризуются определёнными наборами чисел  $n_f$ , «перепутывают» эти наборы. Иными словами, вместо нек-рого  $\Phi(\dots, n_f, \dots)$  в результате действия  $O$ .  $F$  появляется амплитуда  $\Phi(\dots, n_f', \dots)$ , к-рая характеризуется уже другими, изменёнными числами заполнения тех же состояний  $f$ , т. е.  $O$ . в этом представлении меняют числа частиц в каждом из состояний  $f$ . Удобно рассматривать «элементарные»  $O$ ., изменяющие на единицу к.-л. из чисел заполнения  $n_f$ , т. е.  $O$ . рождения и  $O$ . уничтожения частицы в состоянии  $f$ , и с их помощью выразить более сложные  $O$ .  $F$ . Действие каждого такого  $O$ . рождения и уничтожения меняет на единицу не только определённое число  $n_f$ , но и общее число частиц  $N$ . Т. о., для использования формализма вторичного квантования необходимо оперировать с бесконечным набором пространств и соответствующих им базисных систем ф-ций  $|\dots, n_f, \dots\rangle$  для всех значений общего числа  $N$  от нуля до бесконечности. Конкретный результат действия элементарных  $O$ . на эти базисные ф-ции определяется с помощью непосредств. расчёта соответствующих матричных элементов. Действие их на  $|\dots, n_f, \dots\rangle$  в случае бозе-систем можно представить в виде

$$a_f |\dots, n_f, \dots\rangle = \sqrt{n_f} |\dots, n_f - 1, \dots\rangle$$

для  $O$ . уничтожения  $a_f$  и

$$a_f^+ |\dots, n_f, \dots\rangle = \sqrt{n_f + 1} |\dots, n_f + 1, \dots\rangle$$

для  $O$ . рождения  $a_f^+$ , причём ни  $a_f$ , ни  $a_f^+$  не действуют на числа  $n_{f'}$ , если  $f' \neq f$ . Отсюда следуют перестановочные соотношения

$$[a_f, a_{f'}]_- = \Delta(f - f');$$

$$[a_f, a_{f'}]_- = [a_f^+, a_{f'}^+]_- = 0.$$