ANEXA 2

A 2.1. Matricea densitate

În studiul sistemelor cuantice intervin în cazul general, pe lângă *stările pure*, şi *stări mixte* sau *amestecuri de stări*. Stările mixte implică absenţa posibilităţii unor măsuri maximale asupra sistemelor cuantice, astfel că informaţia noastră asupra acestora este incompletă.

Dacă se consideră un ansamblu de N sisteme cuantice ($N \to \infty$) ale căror stări pure $|\psi_k>$ nu sunt cunoscute cu precizie, singura informaţie posibilă despre un anumit sistem este probabilitatea p_k de a fi în starea pură $|\psi_k> p_k \geq 0, \sum_k p_k = 1$). Ca urmare, pentru sistemul studiat se defineşte o stare mixtă, care se poate reprezenta printr-o superpoziţie necoerentă de stări pure, astfel că valoarea medie a unui operator se obţine printr-o medie statistică în sens clasic

$$<\hat{A}>= \sum_k p_k < \psi_k|\hat{A}|\psi_k > \tag{A 2.1}$$

probabilităţile p_k fiind determinate, de asemenea, prin măsurări efectuate asupra sistemului.

Formalismul matricei densitate a fost propus de J. von Neumann şi permite tratarea atât a stărilor pure cât şi a celor mixte.

Introducerea operatorului densitate se poate face scriind expresia (A 2.1) a valorii medii a unui operator $\hat{A}$ cu ajutorul operatorului identitate

$$\sum_n |u_n >< u_n| = \hat{I} \tag{A 2.2}$$

astfel

$$\begin{aligned} <\hat{A}> &= \sum_k p_k < \psi_k|\hat{A}|\, u_k >< u_k \psi_k| >= \\ &= \sum_k p_k < u_k \psi_k| < \psi_k|\hat{A}|\, u_k >= \sum_k < u_k|\hat{\rho}\hat{A}|\, u_k >, \end{aligned} \tag{A 2.3}$$

unde prin definiţie

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |\psi_k >< \psi_k| \tag{A 2.4}$$

reprezintă operatorul densitate. Relaţia de calcul al valorii medii (A 2.3) scrisă sub forma:

$$< A >= \mathrm{Urm}(\hat{\rho}\hat{A}) \tag{A 2.5}$$

reprezintă o altă definiţie echivalentă a operatorului densitate. În cazul unei stări pure operatorul densitate degenerează într-un operator de proiecţie.

Operatorul densitate are câteva proprietăţi mai importante. Astfel, operatorul $\hat{\rho}$ este hermitic

$$< \psi_1|\hat{\rho}|\hat{\psi}_2 >=< \psi_2|\hat{\rho}|\hat{\psi}_1 >^* \tag{A 2.6}$$

şi este normat la unitate

$$\mathrm{Urm}\left(\hat{\rho}\right) = 1\,. \tag{A 2.7}$$

Dacă

$$\mathrm{Urm}\left(\hat{\rho}^2\right) = 1, \tag{A 2.8}$$

starea este pură.

În ultimul caz $\left(\hat{\rho}^2\right)_{nm} = \rho_{mn}$; matricea densitate pentru starea pură este diagonală având o singură valoare proprie egală cu unitatea, celelalte fiind nule; elementele diagonale ale matricei densitate $\hat{\rho}$ reprezintă probabilitățile ca un sistem din ansamblu să fie caracterizat de stările proprii $|u_n>$; întrucât $\hat{\rho}$ este atât un *înlocuitor* al vectorilor de stare cât şi observabilă (este hermitic, pozitiv definit, având urma finită), schimbarea reprezentării se face după regula cunoscută

$$\hat{\rho}' = \hat{U}^{-1}\hat{\rho}\hat{U} \tag{A 2.9}$$

unde $\hat{U}$ este un operator unitar.

Dacă se consideră un amestec de stări $|\psi_n>$ având ponderile p_n care caracterizează starea dinamică a sistemului la momentul t_0 şi care evoluează în timp, înseamnă că la momentul $t > t_0$ sistemul va fi descris de vectorii de stare $|\psi_n>_t$, cu aceleaşi ponderi statistice p_n ca şi la momentul t_0

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_t &= \sum_n |\psi_n>_t p_n <\psi_n|_t = \sum_n \hat{T}(t,t_0)|\psi_n>_0 p_n <\psi_{n0}|\hat{T}^{+}(t,t_0) = \\ &= \hat{T}(t,t_0)\hat{\rho}_0\hat{T}^{+}(t,t_0)\end{aligned} \tag{A 2.10}$$

unde $\hat{T}(t,t_0)$ este operatorul unitar de evoluție.

A 2.2. Ecuația de mişcare pentru operatorul densitate

Expresia operatorului unitar de evoluție este următoarea:

$$\hat{T}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right] \tag{A 2.11}$$

unde $\hat{H}$ reprezintă hamiltonianul sistemului.

Dacă se ține seama de ecuația de evoluție a operatorilor $\hat{T}(t,t_0)$ şi $\hat{T}^{+}(t,t_0)$, rezultă:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}}{\mathrm{d}t} = \left[\hat{H},\hat{\rho}\right] \tag{A 2.12}$$

numită ecuația Schrödinger pentru operatorul densitate, care formal se identifică, până la semnul comutatorului, cu ecuația Heisenberg pentru operatori.