

## Operatore densità

Molto spesso si presenta la situazione in cui l'apparato preparatore non produce uno stato quantistico bene definito ma una distribuzione statistica di stati. Esiste una situazione analoga in fisica classica quando descriviamo lo stato di un sistema mediante un insieme statistico, cioè mediante una funzione densità  $\rho(q, p, t)$  nello spazio delle fasi per cui i valori medi delle variabili dinamiche sono dati da

$$\bar{F} = \int F(q, p) \rho(q, p, t) dq dp / \int \rho(q, p, t) dq dp$$

Talvolta  $F$  può pure dipendere esplicitamente dal tempo ed in generale si prende  $\int \rho dq dp = 1$ .

Ricordiamo che dalla conservazione del numero dei punti nello spazio delle fasi (determinismo in entrambe le direzioni temporali) segue che

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(q, p, t) dq dp = - \int_{\Sigma} \mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} d\Sigma$$

con  $\mathbf{v} = (\dot{q}_1 \dot{q}_2 \dots \dot{q}_n \dot{p}_1 \dot{p}_2 \dots \dot{p}_n)$  e quindi

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho(q, p, t) dq dp = - \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dq dp$$

cioè

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(q, p, t) = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} - \mathbf{v} \cdot \nabla \rho.$$

Tenendo conto che dalle equazioni di Hamilton segue  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  si ha infine

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(q, p, t) = -\mathbf{v} \cdot \nabla \rho = -[\rho, H]_{PP}$$

Nel caso della meccanica quantistica siamo in una situazione in cui abbiamo più stati  $\psi_j$  che si presentano con probabilità  $\rho_j$  con  $\sum_j \rho_j = 1$ . Il valore medio delle misure della osservabile  $F$  su questo insieme di stati è

$$\bar{F} = \sum_j \rho_j (\psi_j, F \psi_j)$$

Questo può essere scritto in maniera più concisa come

$$\bar{F} = Tr(FW)$$

con  $W$  operatore statistico (detto anche matrice densità)

$$W = \sum_j \rho_j \psi_j \circ \psi_j$$

La traccia su di uno spazio di Hilbert è definita da

$$Tr(A) = \sum_k (\zeta_k, A\zeta_k)$$

con  $\zeta_k$  un insieme completo ortonormale nello spazio di Hilbert.

Si ha infatti

$$\begin{aligned} Tr(FW) &= \sum_k \sum_j (\zeta_k, F\psi_j) \rho_j(\psi_j, \zeta_k) = \sum_j \sum_k \rho_j(\psi_j, \zeta_k) (\zeta_k, F\psi_j) = \\ &= \sum_j \rho_j(\psi_j, F\psi_j) = \end{aligned}$$

Si noti che

$$Tr(W) = \sum_j \rho_j = 1$$

I singoli stati evolvono secondo

$$\psi_k(t) = e^{-iHt/\hbar} \psi_k(0)$$

da cui

$$W(t) = U(t)W(0)U^\dagger(t)$$

Prendendo la derivata rispetto al tempo si ha

$$\frac{\partial}{\partial t} W(t) = -\frac{1}{i\hbar} [W(t), H(t)]$$

Abbiamo le seguenti corrispondenze tra meccanica classica e meccanica quantistica

$$\int dq dp \leftrightarrow Tr$$

$$\rho(q, p, t) \leftrightarrow W(t)$$

$$[ , ]_{PP} \leftrightarrow \frac{1}{i\hbar} [ , ]$$

Gli stati puri sono rappresentati da

$$W = \psi \circ \psi$$

Tutti gli altri si ottengono per combinazione convessa di stati puri. Gli stati puri sono estremali nell'insieme convesso degli operatori densità. Se lo stato è puro si ha

$$W^2 = W$$

Questo è necessario ma anche sufficiente affinché l'operatore densità  $W$  rappresenti uno stato puro. Infatti dato che  $TrW = 1$  non può essere  $W = 0$ ; quindi esiste  $\phi$  tale che

$$W\phi \neq 0$$

Da  $W^2 = W$  si ha

$$WW\phi = W\phi \equiv \phi_1 \neq 0$$

e scegliamo  $(\phi_1, \phi_1) = 1$ . Costruiamo una base ortonormale nello spazio di Hilbert  $\phi_1, \phi_2, \dots$

Essendo  $W^+ = W$  sia ha

$$1 = Tr(W) = (\phi_1, W\phi_1) + (\phi_2, W\phi_2) + (\phi_3, W\phi_3) + \dots = 1 + (W\phi_2, W\phi_2) + (W\phi_3, W\phi_3) + \dots$$

e quindi  $W\phi_k = 0$  per  $k \geq 2$ . Segue che  $W - \phi_1 \circ \phi_1 = 0$  come si vede applicando tale operatore alla base  $\phi_k$ .

Pur di effettuare un numero sufficiente di misure è possibile distinguere un insieme statistico dagli stati puri. Si considerino infatti le osservabili  $Z = \zeta \circ \zeta$ . Si ha

$$\bar{Z} = Tr(ZW) = (\zeta, W\zeta).$$

Ma la conoscenza di  $(\zeta, W\zeta)$  per ogni  $\zeta$  è sufficiente per determinare l'operatore  $W$ . Se risulta  $W^2 = W$ , si ha che  $W$  rappresenta uno stato puro, altrimenti no.

Un caso importante in cui compare un operatore statistico è nel calcolo di valori medi di osservabili di un sottosistema di un sistema composto. Sia un sistema composto  $S + M$  descritto dallo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  prodotto tensoriale di  $\mathcal{H}_S$  e di  $\mathcal{H}_M$ . Indichiamo con  $\phi$  i vettori di  $\mathcal{H}_S$  e con  $\xi$  i vettori di  $\mathcal{H}_M$ . Il generico vettore di  $\psi \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_M$  è scrivibile come

$$\psi = \sum_{jk} c_{jk} \phi'_j \xi'_k = \sum_j \phi_j \xi_j$$

con  $(\phi_j, \phi_j) = 1$  e  $(\xi_j, \xi_k) = 0$  per  $j \neq k$ . Poniamo  $(\xi_j, \xi_j) = \rho_j$ . Si ha

$$1 = (\psi, \psi) = \sum_j (\xi_j, \xi_j) = \sum_j \rho_j$$

Se misuriamo una osservabile  $F$  relativa al sottosistema  $S$ , dato che  $F$  non opera su  $H_M$  si ha

$$\bar{F} = (\psi, F\psi) = \sum_j (\xi_j, \xi_j) (\phi_j, F\phi_j) = \sum_j \rho_j (\phi_j, F\phi_j) = Tr_{\mathcal{H}_S}(WF)$$

dove  $W = \sum_j \rho_j \phi_j \circ \phi_j$  è un operatore densità che agisce su  $\mathcal{H}_S$  e la traccia è fatta sullo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}_S$ .

La hamiltoniana del sistema  $S + M$  è data da

$$H = H_S + H_M + H_I$$

dove  $H_S$  è la hamiltoniana di  $S$  e come tale agisce su  $\mathcal{H}_S$ ,  $H_M$  è la hamiltoniana di  $M$  e come tale agisce su  $\mathcal{H}_M$  mentre  $H_I$  è la hamiltoniana di interazione che agisce su  $\mathcal{H}$ .

Se lo stato iniziale  $\psi(0)$  è tale che per  $t > 0$  l'interazione sia trascurabile i.e. (decadimento per esempio)

$$\psi(t) = e^{-i(H_S + H_M + H_I)t/\hbar} \psi(0) = e^{-i(H_S + H_M)t/\hbar} \psi(0)$$

si ha per  $t > 0$

$$\begin{aligned} \bar{F}(t) &= (\psi(t), F\psi(t)) = (e^{-i(H_S + H_M)t/\hbar} \psi(0), F e^{-i(H_S + H_M)t/\hbar} \psi(0)) = \\ &= (e^{-iH_S t/\hbar} e^{-iH_M t/\hbar} \psi(0), F e^{-iH_S t/\hbar} e^{-iH_M t/\hbar} \psi(0)) = \\ &= \sum_j (e^{-iH_M t/\hbar} \xi_j(0), e^{-iH_M t/\hbar} \xi_j(0)) (e^{-iH_S t/\hbar} \phi_j(0), F e^{-iH_S t/\hbar} \phi_j(0)) \\ &= \sum_j (\xi_j(0), \xi_j(0)) (e^{-iH_S t/\hbar} \phi_j(0), F e^{-iH_S t/\hbar} \phi_j(0)) = \sum_j \rho_j(\phi_j(t), F\phi_j(t)) = Tr_{\mathcal{H}_S}(FW(t)) \end{aligned}$$

dove  $W(T)$  è l'operatore densità evoluto secondo la hamiltoniana  $H_S$ .