Матрица плотности

15 сентября 2018 года

Матрица плотности подсистемы

Матрица плотности естественным образом возникают при рассмотрении квантовой механики так называемых **открытых систем** — в противовес замкнутым, это системы, которые взаимодействуют с окружающей средой, или являются подсистемами какой-то большой квантомеханической системы. В случае наличия запутанности между подсистемой и окружающей средой, описание первой на языке волновых функций затруднено (даже если вся большая система описывается на этом языке).

Итак, пусть имеется система, которая состоит из двух подсистем, A и B (математически это означает, что гильбертово пространство представимо в виде тензорного произведения $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$), описываемая какой-то волновой функцией $|\psi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}$. При этом пусть все интересующие нас физические наблюдаемые относятся именно к подсистеме A (например, подсистема B описывает термостат или окружающую среду). Пусть $\{|\alpha\rangle\} \in \mathcal{H}_A$ и $\{|\beta\rangle\} \in \mathcal{H}_B$ образуют базисы соответствующих подсистем. В таком случае, для произвольной наблюдаемой $\hat{O}_A$, относящейся к подсистеме A, мы можем записать[1]:

$$\langle\psi_{AB}|\,\hat{O}_A\,|\psi_{AB}\rangle = \sum_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} \underbrace{\langle\psi_{AB}|\alpha'_A,\beta'_B\rangle}_{\equiv\psi^*_{\alpha'\beta'}} \underbrace{\langle\alpha'_A,\beta'_B|\,\hat{O}_A\,|\alpha_A,\beta_B\rangle}_{\equiv(\hat{O}_A)_{\alpha'\alpha}\cdot\delta_{\beta'\beta}} \underbrace{\langle\alpha_A,\beta_B|\psi_{AB}\rangle}_{\equiv\psi_{\alpha\beta}} = \sum_{\alpha\alpha'} \underbrace{\left(\sum_\beta \psi_{\alpha\beta}\psi^*_{\alpha'\beta}\right)}_{\equiv(\hat{\rho}_A)_{\alpha\alpha'}} (\hat{O}_A)_{\alpha'\alpha} \equiv \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_A\hat{O}_A) \tag{1}$$

Таким образом естественным образом возникает матрица плотности подсистемы $\hat{\rho}_A$. Давайте сперва изучим свойства этого объекта:

- $\hat{\rho}_A$ — линейный оператор, действующий на подпространстве A.
- С помощью матрицы плотности можно считать любые средние, относящиеся к подсистеме A — а значит, она содержит *абсолютно всю* необходимую информацию про систему A (и никакой ненужной информации о внешней системе B — мы от неё полностью избавились).
- Матрица плотности «нормирована» следующим условием: $\mathrm{Tr}\hat{\rho} = \sum_{\alpha\beta}\psi_{\alpha\beta}\psi^*_{\alpha\beta} = 1$.
- Матрица плотности — эрмитов оператор $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$.
- Матрица плотности неотрицательно определена: $\langle\phi|\,\hat{\rho}\,|\phi\rangle = \sum_{\alpha\alpha',\beta}\phi^*_\alpha\psi_{\alpha\beta}\psi^*_{\alpha'\beta}\phi_{\alpha'} = \sum_\beta \left|\sum_\alpha \psi_{\alpha\beta}\phi^*_\alpha\right|^2 \geq 0$.

Эти свойства, в частности, означают, что матрицу плотности можно диагонализовать, представив в следующем виде:

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n\,|n\rangle\,\langle n|\,, \quad 0 \leq p_n \leq 1, \quad \sum_n p_n = 1 \tag{2}$$

Чистое состояние

Разбиение системы на две подсистемы может быть совершенно произвольным. В частности, в качестве системы B можно взять пустое множество, и сделать систему A совпадающей со всей системой AB. Последняя, как мы предполагали, описывается волновой функцией $|\psi\rangle$. Несложно видеть, что матрица плотности в таком случае имеет вид $\hat{\rho} = |\psi\rangle\,\langle\psi|$ — действительно:

$$\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) = \mathrm{Tr}(|\psi\rangle\,\langle\psi|\,\hat{O}) = \langle\psi|\,\hat{O}\,|\psi\rangle \tag{3}$$

Состояние, описываемое такой матрицей плотности, называют **чистым состоянием**; только такие состояния допускают описание на языке волновых функций. Для чистых состояний описание на языке матриц плотности избыточно[2]. В противном случае состояние называется **смешанным**. Обсудим базовые свойства чистых состояний (которые можно использовать как критерии):

[1] На первом семинаре мы уже сталкивались с тензорным произведением

[2] В частности, если $\dim\mathcal{H} = n$, то матрица плотности — это $O(n^2)$ параметров, а волновая функций — $O(n)$

- Собственные числа равны такой матрицы плотности равны $p_n = (1, 0, 0, \dots)$.
- Матрица плотности чистого состояния удовлетворяет условию $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. В частности, $\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2 = 1$. В случае общего положения, $\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2 = \sum_n p_n^2 < \sum_n p_n = 1$

Различные часто используемые количественные характеристики чистоты состояния включают в себя:

- Энтропия фон-Неймана: $S = -\mathrm{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\sum_n p_n \ln p_n$. Равна нулю только для чистых состояний.
- Энтропия Реньи $S_n = \frac{1}{1-n} \ln \mathrm{Tr}\hat{\rho}^n$. Тоже равна нулю только для чистых состояний; часто используется для численных расчётов (или аналитических расчётов с помощью метода реплик). Несложно видеть, что $\lim_{n\to 1} S_n = S$.

Частичный след

Наконец, отметим, что исходное предположение о том, что вся система AB описывается волновой функцией (является чистым состоянием), на самом деле не нужно. Действительно, если система AB находится в смешанном состоянии, описываемом какой-то матрицей плотности $\hat{\rho}_{AB}$, то для получения матрицы плотности подсистемы A необходимо взять так называемый **частичный след** (или «след по степеням свободы подсистемы B»)

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} \Leftrightarrow (\hat{\rho}_A)_{\alpha\alpha'} = \sum_\beta (\hat{\rho}_{AB})_{\alpha\beta,\alpha'\beta}. \tag{4}$$

(несложно видеть, что эта операция ассоциативна: если есть система ABC, и сначала взять след по C, а затем по B, то мы получим ровно ту же матрицу плотности, какая была бы если бы мы сразу взяли след по BC).

Смысл этой операции можно понять следующим образом. Для упрощения обозначений предположим, что системы A и B — двухуровневые, и их базисы имеют вид $\{|1\rangle, |2\rangle\}_{A,B}$. Тогда стандартный выбор базиса всей системы имеет вид (см. предыдущий семинар):

$$\{|11\rangle, |12\rangle, |21\rangle, |22\rangle\}_{AB} \tag{5}$$

и в таком базисе о произвольной матрице плотности системы можно думать как имеющую блочную структуру:

$$\hat{\rho}_{AB} = \left(\begin{array}{cc|cc} \rho_{11,11} & \rho_{11,12} & \rho_{11,21} & \rho_{11,22} \\ \rho_{12,11} & \rho_{12,12} & \rho_{12,21} & \rho_{12,22} \\ \hline \rho_{21,11} & \rho_{21,12} & \rho_{21,21} & \rho_{21,22} \\ \rho_{22,11} & \rho_{22,12} & \rho_{22,21} & \rho_{22,22} \end{array}\right) \tag{6}$$

В таком случае, взятие частичного следа отвечает попросту взятию следа в каждом блоке:

$$\mathrm{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} = \begin{pmatrix} \mathrm{Tr}\begin{pmatrix} \rho_{11,11} & \rho_{11,12} \\ \rho_{12,21} & \rho_{12,12} \end{pmatrix} & \mathrm{Tr}\begin{pmatrix} \rho_{11,21} & \rho_{11,22} \\ \rho_{12,21} & \rho_{12,22} \end{pmatrix} \\ \mathrm{Tr}\begin{pmatrix} \rho_{21,11} & \rho_{21,12} \\ \rho_{22,11} & \rho_{22,12} \end{pmatrix} & \mathrm{Tr}\begin{pmatrix} \rho_{21,21} & \rho_{21,22} \\ \rho_{22,21} & \rho_{22,22} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \tag{7}$$

Примеры

Пример 1. Чистое состояние Давайте рассмотрим спин-1/2 (или любую другую произвольную квантомеханическую систему), описываемый квантомеханической суперпозицией

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \tag{8}$$

Это — чистое состояние, о котором «наивно» можно думать следующим образом: с вероятностью $\frac{1}{2}$ мы работаем со спином, «смотрящим» вверх, и с вероятностью $\frac{1}{2}$ мы работаем со спином, «смотрящим» вниз. Дальше мы покажем, что такая картинка не совсем правильная — в действительности, такая волновая функция описывает спин, «смотрящий» влево (вдоль оси x). Матрица плотности такого состояния имеет вид:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \hat{\sigma}_x) \tag{9}$$

С её помощью можно вычислить разные наблюдаемые:

$$\langle\hat{\sigma}_x\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_x) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = 1, \quad \langle\hat{\sigma}_y\rangle = \frac{i}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = 0, \quad \langle\hat{\sigma}_z\rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = 0 \tag{10}$$

Пример 2. «ЭПР» Давайте теперь рассмотрим два спина-1/2 (или любые другие двухуровневые системы), A и B, которые «приготовлены» в классическом запутанном «ЭПР»-состоянии:

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow_A\downarrow_B\rangle + |\downarrow_A\uparrow_B\rangle\right). \tag{11}$$

Пусть при этом судьба спина B нам неизвестна (и мало интересует) — пусть мы можем проводить измерения только над спином A. Матрица плотности всей системы AB имеет в базисе $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ следующий вид:

$$\hat{\rho}_{AB} = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&1&1&0\\0&1&1&0\\0&0&0&0\end{pmatrix} \tag{12}$$

Теперь возьмём след по степеням свободы спина B, представив матрицу в виде блочной матрицы 2×2 и взяв следы в каждом блоке:

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{\mathbb{I}} \tag{13}$$

С точки зрения наблюдаемой $\hat{\sigma}_z$, такая матрица плотности, как и предыдущая, описывает систему, что с вероятностью $\frac{1}{2}$ находится в состоянии со спином «вверх» и $\frac{1}{2}$ — со спином «вниз». В этом смысле она никак не отличается от предыдущей. Но есть нюанс — ведь сама матрица плотности отличается! Это означает, что можно придумать наблюдаемую, измеряя которую мы сможем отличить одну систему от другой. Действительно, несложно видеть, что если с такой матрицей плотности измерить $\hat{\sigma}_x$ (как и остальные проекции $\hat{\sigma}_{y,z}$), то мы получим ноль, в отличии от предыдущего случая. Таким образом, эти две системы действительно различимы с точки зрения наблюдаемых величин!

Пример 3. «Классическая запутанность» В противовес ЭПР, можно помыслить совершенно классическую систему, которая ничего про квантовую запутанность «не знает», но описывает ансамбль, внешне похожий на ЭПР: *классическая* суперпозиция состояний[3] $|\uparrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\uparrow\rangle$. Она описывается следующей матрицей плотности:

$$\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{P}}_{\uparrow\downarrow} + \hat{\mathbb{P}}_{\downarrow\uparrow}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&0\end{pmatrix} \tag{14}$$

Матрица плотности отличается от обсуждаемой в предыдущем разделе — значит, системы всё-таки различны. Но можно задать себе следующий вопрос — сможет ли отличить наблюдатель A такую классическую систему от квантовой? На этот вопрос можно ответить, взглянув на редуцированную матрицу плотности наблюдателя A:

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{\mathbb{I}} \tag{15}$$

Матрица плотности (а значит, и все наблюдаемые) тождественно совпадает с матрицей плотности для ЭПР! Значит, ни наблюдатель A, ни наблюдатель B не смогут ответить, с квантовой системой они работают, или классической. Но если они скажут результаты своих измерений некоему наблюдателю C (что эквивалентно тому, что наблюдатель C провёл измерения с обоими системами) — то он уже эти системы сможет отличить.

Классическая vs. квантовая статистика

Выше мы утверждали, что матрицы плотности необходимы для описания открытых систем, но на этом их полезность не ограничивается.

Исходно, когда мы работали с волновыми функциями, вероятности различных исходов измерений давались *билинейными* формами по волновой функции. Это — ключевое свойство, отличающее квантовую статистику от классической. Действительно, классическая статистика оперирует распределениями типа «система находится с вероятностью p_n в состоянии $|\psi_n\rangle$». Но если мы попробуем аналог этого распределения на языке волновых функций — например, состояние $|\psi\rangle = \sum_n \sqrt{p_n}\,|\psi_n\rangle$, то, из-за билинейности, при измерении различных величин будут возникать интерференционные члены:

$$\langle O\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \underbrace{\sum_n p_n\langle O\rangle_n}_{\text{classical statistics}} + \underbrace{\sum_{m\neq n}\sqrt{p_np_m}\,\langle\psi_n|\hat{O}|\psi_m\rangle}_{\text{quantum interference terms}} \tag{16}$$

[3]Тут можно привести пример с башмаками — пусть имеется ящик с набором из правого и левого башмака. Наблюдателям A и B отправляется по башмаку, и заранее неизвестно, какому именно. Наблюдатель A, проведя измерение над пришедшим ему башмаком, и увидев, что он — левый, немедленно придёт к выводу, что у наблюдателя B — правый. Такой вот себе «коллапс волновой функции» с передачей информации быстрее скорости света.

Теперь же мы ознакомились с аппаратом матриц плотности. Мы видим, что выражение для средних является *линейным* по матрице плотности. Это позволяет нам включить классическую статистику в наше квантомеханическое описание. Действительно, рассмотрим линейную комбинацию двух матриц плотностей и отметим, что она обладает следующим свойством:

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n \hat{\rho}_n \Rightarrow \langle O \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{O} \sum_n p_n \hat{\rho}_n\right) = \sum_n p_n \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_n O) = \sum_n p_n \langle O \rangle_n \tag{17}$$

Таким образом, она описывает как раз интересующее нас классическое распределение «система находится с вероятностью p_n в состоянии, описываемом матрицей плотности $\hat{\rho}_n$», и никаких интерференционных членов при этом не возникает. Это — ещё одно преимущество аппарата матриц плотности, они позволяют рассматривать как классические, так и квантовые (а также их произвольные комбинации) статистические ансамбли.

Наконец, записав общее выражение для среднего значения произвольной величины в смешанном состоянии, мы можем установить физический смысл диагональных и оффдиагональных элементов матрицы плотности:

$$\langle O \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) = \underbrace{\sum_n \rho_{nn} \langle O \rangle_n}_{\text{classical statistics}} + \underbrace{\sum_{m \neq n} \rho_{nm} \langle m | \hat{O} | n \rangle}_{\text{quantum interference terms}} \tag{18}$$

т.е. диагональные члены матрицы плотности описывают классическую функцию распределения величины $\hat{O}$, а оффдиагональные члены отвечают за величину квантовых интерференционных поправок.

Измерения и редукция фон-Неймана

Теперь мы можем перейти к обсуждению вопроса измерения на языке матриц плотности.

- Мы начали с того, что среднее значение наблюдаемой O даётся формулой:

$$\langle O \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) \tag{19}$$

- Для определения вероятности определённых исходов этого измерения, мы можем поступить точно так же, как и с волновыми функциями — а именно, определить их как среднее значение проектора на соответствующее собственное подпространство, что (в случае отсутствия вырождения) даётся диагональными элементами матрицы плотности:

$$P(O = o_n) \equiv \left\langle \hat{\mathbb{P}}_n \right\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mathbb{P}}_n) = \rho_{nn} \tag{20}$$

Наконец, постулат о редукции гласит, что «в результате измерения будет получено значение o_n с соответствующей вероятностью, а волновая функция спроецируется на соответствующее собственное подпространство». В соответствии с написанным выше, в результате измерения мы должны иметь дело с *классическим ансамблем*, который, как мы уже выяснили можно описать как линейную комбинацию соответствующих, спроецированных матриц плотности:

$$\boxed{\hat{\rho} \underset{\text{measurement}}{\mapsto} \sum_n \hat{\mathbb{P}}_n \hat{\rho} \hat{\mathbb{P}}_n \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \dots & \rho_{1n} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \dots & \rho_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{n1} & \rho_{n2} & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix}} \tag{21}$$

Такое изменение матрицы плотности является *объективным* результатом взаимодействия системы с измеряющим прибором. Во-первых, мы ничего не говорили о результате измерений, узнали ли мы его или нет. Во-вторых, оно затронет результаты измерений любой другой наблюдаемой, в базисе которой матрица плотности не диагональна (т.е. которая не коммутирует с $\hat{O}$), поэтому это — наблюдаемый эффект. Наконец, на некоторых конкретных моделях можно аккуратно проследить, как такая диагонализация происходит в результате унитарной эволюции — взаимодействия с окружающей средой. «Вымирание» оффдиагональных элементов матрицы плотности в результате взаимодействия с окружающей средой носит название **дефазировки** или **декогеренции**. Наконец, как мы установили выше, оффдиагональные элементы матрицы плотности характеризуют степень «квантовости» нашей системы; поэтому мы выяснили, что в результате взаимодействия с окружающей средой, система как бы становится «классической».

Наконец, если мы всё-таки узнали результат измерения (выяснили, что система находится в состоянии $|k\rangle$), то мы можем учесть это знание (говоря на языке теории вероятностей, вычислять условные вероятности, или провести **селективное измерение**), модифицировав соответствующим матрицу плотности:

$$\hat{\rho} \underset{\text{measurement}}{\mapsto} \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \underset{\text{selective measurement}}{\mapsto} \frac{\hat{\mathbb{P}}_k \hat{\rho} \hat{\mathbb{P}}_k}{\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{\mathbb{P}}_k)} = |k\rangle \langle k| \tag{22}$$

В результате, как мы видим, получается матрица плотности, описывающая чистое состояние $|k\rangle$. Редукция фон-Неймана таким образом является следствием следующей цепочки событий:

1. Мы имели дело с чистым состоянием $|\psi\rangle$ (эквивалентно матрице плотности $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$)
2. В результате взаимодействия с измеряющим приборам, происходит запутывние и дефазировка; система переходит в смешанное состояние, матрица плотности диагонализуется: $\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$.
3. Если измерение — селективное, то учёт знания о результате измерения приводит к (уже субъективному!) изменению матрицы плотности на $\hat{\rho} = |k\rangle\langle k|$.
4. Таким образом, в результате мы возвращаемся к чистому состоянию $|k\rangle$.

Термодинамика

В случае, когда система находится в термодинамическом равновесии с большим термостатом температуры T, как мы знаем из статистической физики и термодинамики, система описывается **Гиббсовским (каноническим)** ансамблем. Это — классический ансамбль, в котором вероятности различных собственных состояний гамильтониана $|n\rangle$ пропорциональна $p_n \propto e^{-\beta E_n}$. Такой ансамбль достаточно легко записывается на языке матриц плотности:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta\hat{H}}, \quad Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = \sum_n e^{-\beta E_n} \tag{23}$$

(Z — **статсумма**, обеспечивающая нормировку $\mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1$; $\beta = 1/T$; постоянная Больцмана k_B выбрана равной единице).

Динамика

С течением времени матрица плотности как-то эволюционирует $\hat{\rho} = \hat{\rho}(t)$. Эту эволюцию можно записать в форме уравнения Гейзенберга:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(t) = \sum_{mn} |n(t)\rangle \rho_{nm} \langle m(t)| \Rightarrow i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} &= \sum_{mn}\left[i\hbar\frac{\partial |n(t)\rangle}{\partial t}\rho_{nm}\langle m(t)| + i\hbar |n(t)\rangle \rho_{nm}\frac{\partial\langle m(t)|}{\partial t}\right] = \\ &= \sum_{mn}\left[\hat{H}|n(t)\rangle\rho_{nm}\langle m(t)| - |n(t)\rangle\rho_{nm}\langle m(t)|\hat{H}\right] = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \Rightarrow \boxed{\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\rho}(t), \hat{H}\right]}\end{aligned} \tag{24}$$

(обратите внимание: в представлении Гейзенберга, эволюция обыкновенных операторов происходит согласно уравнению с противоположным знаком: $\frac{\partial\hat{O}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{O}(t)]$!).

Полезно отметить связь этого уравнения с термодинамикой. Очевидно, что термодинамическая матрица плотности $\hat{\rho} = \frac{1}{Z}e^{-\beta\hat{H}}$ является стационарным решением этого уравнения. Более того, таковым является произвольная матрица плотности вида $\hat{\rho} = f(\hat{H})$. Наконец, можно пойти дальше и отметить, что стационарным будет также произвольное решение вида $\hat{\rho} = f(\hat{H}, \hat{O}_1, \ldots, \hat{O}_k)$, где $\{\hat{O}_i\}$ — набор сохраняющихся величин.