дилась в состоянии статистич. равновесия, а затем адиабатически было включено внеш. возмущение H_t (напр., вызванное электрич. или магн. полем), зависящее от времени, то с помощью $\rho(t)$ можно найти реакцию системы на внеш. возмущение. В линейном приближении по внеш. возмущению

$$\rho(t)=\rho_0+(i\hbar)^{-1}\int_{-\infty}^{t}\exp\left\{iH(\tau-t)/\hbar\right\}\left[H'_\tau,\rho_0\right]\times$$
$$\times\exp\left\{-iH(\tau-t)/\hbar\right\}d\tau,$$

ρ_0 — статистич. оператор в состоянии равновесия. Отсюда для ср. значения оператора получим

$$\overline{A}=\langle\hat{A}\rangle+(i\hbar)^{-1}\int_{-\infty}^{t}\langle\left[\hat{A}(t),H'_\tau(\tau)\right]\rangle d\tau,$$

$\langle\ldots\rangle=\mathrm{Sp}(\rho_0\ldots)$ и операторы взяты в гейзенберговском представлении:

$$\hat{A}(t)=e^{iHt/\hbar}\,\hat{A}e^{-iHt/\hbar},\quad H'_\tau(\tau)=e^{iH\tau/\hbar}\,H'_\tau e^{-iH\tau/\hbar}.$$

Эти ф-лы можно представить через двухвременные запаздывающие *Грина функции*, что используют в теории электропроводности и магн. резонанса.

М. п. применяют для построения операторов плотности комплексов молекул, удовлетворяющих цепочке *Боголюбова уравнений*, с помощью к-рой можно обосновать кинетич. ур-ние квантового газа.

М. п. используют в теории поляризов. пучков частиц со спином (магн. моментом) или фотонов. Напр., М. п. пучка частиц со спином $\pm{}^1/_2$ в смешанном состоянии имеет вид

$$\rho=w_a\,|\chi_a\rangle\langle\chi_a|+w_b\,|\chi_b\rangle\langle\chi_b|,\quad w_a+w_b=1,$$

$|\chi_a\rangle$, $|\chi_b\rangle$ — спиновые ф-ции двух разл. суперпозиций состояний $|+{}^1/_2\rangle$, $|-{}^1/_2\rangle$. М. п. в представлении спиновых ф-ций $|\pm{}^1/_2\rangle$ даётся выражением

$$\rho=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+P_z & P_x-iP_y\\ P_x+iP_y & 1-P_z\end{pmatrix}=\frac{1}{2}(e+\sum_i P_i\sigma_i),$$

где $P_i=\mathrm{Sp}(\rho\sigma_i)$ — i-я компонента поляризации, σ_i — матрицы Паули, e — единичная матрица. М. п. пучка фотонов с разл. поляризацией имеет аналогичный вид и зависит от трёх *Стокса параметров*, описывающих степени линейной и круговой поляризации относительно разл. осей.

Смешанный ансамбль частиц в разл. состояниях угл. момента $|JM\rangle$ описывается М. п. с элементами $\langle JM|\rho|J'M'\rangle$:

$$\rho=\sum_{JJ'MM'}\langle J'M'\,|\,\rho\,|\,JM\rangle\,|\,J'M'\rangle\langle JM\,|.$$

Для того чтобы учесть симметрию, связанную с угл. моментом частиц ансамбля, удобно разложить ρ по неприводимым тензорным операторам угл. моментов $T(J'J)_{KQ}$:

$$\rho=\sum_{JJ'KQ}\langle T\left(J'J\right)^+_{KQ}\rangle\;T(J'J)_{KQ},$$

где

$$|J'-J|\leqslant K\leqslant J'+J,\quad -K\leqslant Q\leqslant K,$$

$$T(J'J)_{KQ}=\sum_{MM'}(-1)^{J-M}(J'M',J-M\,|\,KQ)\,|\,J'M'\rangle\langle JM\,|,$$

$(J'M',J-M|KQ)$ — *Клебша — Гордана коэффициенты*, K,Q — полный момент и его z-компонента, $T(J'J)_{KQ}$ — матрица, имеющая $2J'+1$ строк и $2J+1$ столбцов.

Величины

$$\langle T(J'J)^+_{KQ}\rangle=\mathrm{Sp}\left(\rho T(J'J)^+_{KQ}\right)$$

наз. мультиполями состояния и характеризуют свойства поляризации и когерентности пучков. Три параметра (при $J'=J$) $\langle T(J)^+_{1Q}\rangle$ с $Q=\pm1,0$ наз. вектором ориентации и характеризуют средний по ансамблю угл. момент. Тензор 2-го ранга $\langle T(J)^+_{2Q}\rangle$ наз. тензором выстроенности, он пропорционален ср. сферич. компонентам тензора электрич. квадрупольного момента.

Лит.: Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Квантовая механика, 4 изд., М., 1989, § 4; их же, Статистическая физика, ч. 1, 3 изд., М., 1976, § 5; Мандельштам Л. И., Полн. собр. трудов, т. 5, М., 1950; Фон Нейман И., Математические основы квантовой механики, пер. с нем., М., 1964, гл. 5; Боголюбов Н. Н., Избр. труды, т. 2, К., 1970, с. 288; Зубарев Д. Н., Неравновесная статистическая термодинамика, М., 1971, гл. 2—3; Александров И. В., Теория магнитной релаксации, М., 1975; Блум К., Теория матрицы плотности и ее приложения, пер. с англ., М., 1983.

Д. Н. Зубарев.

МА́ТРИЦА РАССЕ́ЯНИЯ (S-матрица) в квантовой теории — оператор, переводящий состояние системы (точнее, *вектор состояния*) $\Phi_{-\infty}$ до рассеяния (или реакции) в состояние $\Phi_{+\infty}$ после рассеяния:

$$\Phi_{+\infty}=S\Phi_{-\infty}.\tag{1}$$

В конкретном представлении (см. *Представлений теория*) таким оператором является матрица, строки и столбцы к-рой удобно нумеровать значениями полного набора физ. величин, сохраняющихся при свободном движении частиц. М. р. имеет важное значение в *квантовой механике* и является одним из осн. объектов в *квантовой теории поля*.

Понятие М. р. возникает в квантовомеханич. задаче о рассеянии на потенциальном центре (см. *Рассеяние микрочастиц*). Физ. картина рассеяния бесспиновой частицы на финитном потенциале $V(\boldsymbol{r})$ подсказывает, что в асимптотике (при $r=|\boldsymbol{r}|\to\infty$) решение стационарного *Шрёдингера уравнения*

$$-\Delta\psi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})=\mathbf{k}^2\psi(\boldsymbol{r})$$

(Δ — *Лапласа оператор*, $\mathbf{k}$ — импульс частицы; принята система единиц, в к-рой $\hbar=c=1$) должно иметь слагаемое, отвечающее частице, налетающей на рассеивающий центр по направлению $\boldsymbol{\varkappa}=\mathbf{k}/k$, $k=|\mathbf{k}|$,

$$\psi_-\sim\frac{e^{ikr}}{r}\,\delta(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{\varkappa}),\tag{2}$$

и слагаемое, описывающее удаляющуюся по всем возможным направлениям $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$ частицу,

$$\psi_+\sim\frac{-e^{-ikr}}{r}\,S(k;\boldsymbol{n},\boldsymbol{\varkappa}).\tag{3}$$

Здесь $\delta(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{n}_0)$ — δ-функция на единичной сфере, определяемая соотношением

$$\int f(\boldsymbol{n})\delta(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{n}_0)d\boldsymbol{n}=f(\boldsymbol{n}_0),\quad d\boldsymbol{n}=\sin\theta d\theta d\varphi$$

в сферич. системе координат.

Для свободной частицы $[V(r)=0]$ при $r\to\infty$ имеем

$$\psi^0_{\mathbf{k}}(\boldsymbol{r})=\frac{\mathbf{k}}{2\pi i}\,e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{r}}=$$
$$=\frac{e^{-ikr}}{r}\,\delta(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{\varkappa})-\frac{e^{ikr}}{r}\,\delta(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{\varkappa})+O(r^{-2}),\tag{4}$$

так что в отсутствие взаимодействия М. р. тривиальна:

$$S^0(k;\boldsymbol{n},\boldsymbol{\varkappa})=\delta(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{\varkappa}).\tag{5}$$

Для нетривиального рассеяния М. р. определяется как *интегральный оператор* S с ядром

$$S(k;\boldsymbol{n},\boldsymbol{\varkappa})=\delta(\boldsymbol{n}-\boldsymbol{\varkappa})+\frac{ik}{2\pi}\,f(k;\boldsymbol{n},\boldsymbol{\varkappa});\tag{6}$$